

4

Votação por tensores

O método de votação por tensores foi proposto por Guy e Medioni em 1996 (21) e se baseou nos princípios Gestalt de proximidade e boa continuação. Os sinais (pontos de dados genéricos) observados são agrupados, de acordo com os princípios mencionados, para produzir estruturas salientes, isto é, estruturas que se sobressaem devido a configuração dos seus elementos locais ¹. A lei Gestalt de proximidade afirma que “objetos ou formas que estão próximos uns dos outros, parecem formar grupos”. Por exemplo, na figura 4.1, a ilustração (a) apresenta nove quadrados dispostos sem proximidade, assim, eles são percebidos como formas separadas. Já na figura (b), os quadrados são colocados próximos e, com isso, a unidade ocorre, isto é, embora eles sejam formas separadas, são percebidos como um grupo. Na figura 4.2, vemos um exemplo da boa continuação, segundo a lei Gestalt “[Aprendizes] tendem a continuar formas além de seus pontos finais”. Dessa forma, na figura percebemos duas linhas cruzadas ao invés de quatro linhas que se encontram.

Os sinais representam a posição dos elementos, tais como pontos e curvas, além de conter outras informações, tais como orientação da curva e superfície. O método foi inicialmente proposto para dados bidimensionais, no entanto,

¹Os elementos locais da estrutura não são salientes isoladamente, mas ao invés disso, o arranjo dos elementos é que torna a estrutura saliente.

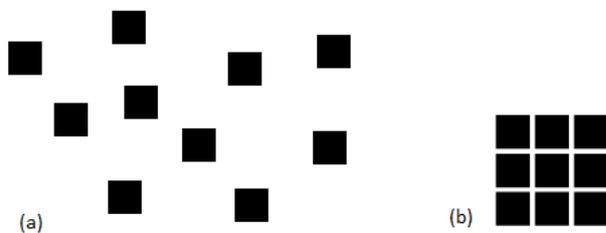


Figura 4.1: Princípio Gestalt da proximidade

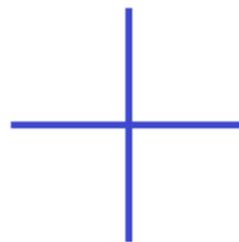


Figura 4.2: Princípio Gestalt da boa continuação

Guy e Medioni em (22) estenderam o método para dados em três dimensões. Os dois principais aspectos do método incluem a representação por tensores e um mecanismo de propagação da informação através da votação com tensores. O método funciona como uma ferramenta computacional para agrupamento de dados orientados e não orientados, gerados baseados em imagens ou outros primitivos. A generalização do método para n dimensões descrita em (44) não é prática, principalmente devido a complexidade computacional e os requisitos de armazenamento em n dimensões, já que há necessidade de gerar e armazenar os chamados campos de votação, cujo número equivale a dimensionalidade do espaço. Assim, Mordohai e Medioni em (47) fornecem uma nova formulação do processo de votação, que é prática para espaços com algumas centenas de dimensões. Essa formulação mais recente que será estudada.

O método de votação com tensores lida com sinais apresentados como grandes conjuntos de observações, possivelmente contendo *outliers*, em dimensões altas. O aprendizado de uma função desconhecida baseada nessas observações é visto como sendo equivalente a aprender uma variedade, ou variedades. Assim, com uma boa estimativa da estrutura da variedade, pode-se prever as posições de novos pontos nela. A primeira tarefa consiste em determinar a dimensionalidade intrínseca dos dados. Isto fornece conhecimentos na complexidade do sistema que gera os dados, o tipo de modelo necessário para descrevê-lo, bem como os graus de liberdade do sistema, os quais, em geral, não são iguais a dimensionalidade do espaço de entrada. A orientação de cada ponto na variedade também é estimada.

A estimativa da dimensionalidade e inferência da estrutura são explicados simultaneamente pela codificação das observações como tensores de segunda ordem, simétricos, definidos não negativos e também pela análise da saída da votação com os tensores. O método não mapeia os dados para um espaço de dimensão inferior e o processo é realizado no espaço dos dados de entrada original. No entanto, após realizar todas as tarefas, a fim de reduzir os requisitos de armazenagem e se for desejável, pode-se utilizar a redução da dimensionalidade empregando, por exemplo, um dos métodos mostrados no capítulo 3. O método não define explicitamente uma função objetivo a ser otimizada de acordo com algum critério global, ao invés disso, a aproximação é local, não paramétrica e tem um modelo implementado na forma de votos, que comunica a orientação preferida de um ponto a seus vizinhos (47).

4.1

Representação dos dados

A representação dos dados é feita por tensores de segunda ordem, simétricos, definidos não negativos, os quais equivalem a uma matriz $n \times n$ e a um elipsóide em um espaço n -dimensional. Convém ressaltar que toda vez que nos referirmos a tensores, subentenda-se que se tratará de tensores de segunda ordem, simétricos, definidos não negativos. Os tensores codificam a saliência perceptual², indicando a saliência de cada tipo de estrutura perceptual a qual pertence o dado, bem como suas orientações tangente e normal preferidas. O poder dessa representação reside no fato de que todos os tipos de saliência são codificados pelo mesmo tensor, ou seja, o tensor pode codificar todos os tipos de estruturas, tais como superfícies, curvas e regiões, bem como a incerteza dessa informação. Intuitivamente, a forma do tensor define o tipo de informação capturada (ponto, curva, parte de superfície) e o tamanho do tensor codifica a saliência da característica.

O tensor representa o espaço normal no ponto. Por exemplo, um hiperplano possui uma normal \mathbf{n} , que pode ser codificada na forma tensorial como $T = \mathbf{nn}^T$. Uma estrutura com um espaço normal de posto d , possui d normais e é representada por um tensor da forma:

$$T = \sum_{i=1}^d \mathbf{n}_i \mathbf{n}_i^T. \quad (4-1)$$

Um ponto sem informação de orientação pode equivalentemente ser visto como tendo todas as normais possíveis e é codificado como a matriz identidade. Um tensor nesta forma representa uma preferência igual por todas as orientações e é chamado de tensor bola (*ball tensor*), e o elipsóide correspondente é uma esfera ou hiper-esfera. Por outro lado, um tensor que contém apenas uma orientação é chamado de tensor palito (*stick tensor*). Tensores palitos representam o hiperplano de um espaço D -dimensional, o qual possui uma normal e $(D - 1)$ tangentes. Dependendo do tipo de estrutura a qual o dado pertence, ele tem um número diferente de normais e tangentes. Por exemplo, um ponto pertencente a uma variedade de dimensão 2 em um espaço n -dimensional é representado por duas tangentes e $n - 2$ normais. As figuras 4.3, 4.4 e 4.5 representam três exemplos de tensores em um espaço tridimensional.

²O termo saliência perceptual indica a qualidade de características que se destacam notavelmente, de serem importantes e proeminentes, atraindo a nossa atenção.



Figura 4.3: Tensor Orientado ou palito.

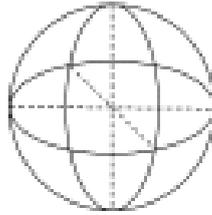


Figura 4.4: Tensor não orientado ou bola.



Figura 4.5: Tensor genérico.

O autosistema do tensor codifica o número de tangentes e normais a variedade em cada ponto. Autovetores associados ao espaço tangente correspondem a autovalores zero, enquanto que, aqueles que pertencem ao espaço normal correspondem a autovalores não nulos (tipicamente igual a 1). Portanto, pontos com orientação conhecida podem ser codificados nesta representação por tensores adequadamente construídos, como em 4-1. Pontos com orientação desconhecida são representados pela matriz identidade (tensores bola).

Pela equação 4-1, qualquer ponto em uma variedade de dimensionalidade e orientação conhecidas, pode ser representado por um tensor daquela forma. Por outro lado, dado um tensor n -dimensional, o tipo de estrutura codificada nele pode ser inferido examinando seu autosistema. Qualquer tensor pode ser decomposto como na seguinte equação:

$$\begin{aligned}
 T &= \sum_{d=1}^n \lambda_d \mathbf{e}_d \mathbf{e}_d^T = \\
 &= (\lambda_1 - \lambda_2) \mathbf{e}_1 \mathbf{e}_1^T + (\lambda_2 - \lambda_3) (\mathbf{e}_1 \mathbf{e}_1^T + \mathbf{e}_2 \mathbf{e}_2^T) + \dots + \lambda_n (\mathbf{e}_1 \mathbf{e}_1^T + \dots + \mathbf{e}_n \mathbf{e}_n^T) \\
 &= \sum_{d=1}^{n-1} [(\lambda_d - \lambda_{d+1}) \sum_{k=1}^d \mathbf{e}_k \mathbf{e}_k^T] + \lambda_n (\mathbf{e}_1 \mathbf{e}_1^T + \dots + \mathbf{e}_n \mathbf{e}_n^T)
 \end{aligned}
 \tag{4-2}$$

onde λ_d são os autovalores em ordem decrescente de magnitude e \mathbf{e}_d são os autovetores correspondentes. Uma vez que o tensor é definido não negativo, os autovalores são não-negativos. O tensor simultaneamente codifica todos os tipos de estrutura possíveis. A confiança ou saliência em termos de organização perceptual, do tipo que tem d normais é codificada na diferença $\lambda_d - \lambda_{d+1}$ ou λ_n para o tensor bola. Se apenas uma dessas diferenças de autovalores é não nula, então o tensor codifica um único tipo de estrutura. Caso contrário, mais de um tipo pode ser apresentado no local do tensor, cada um tendo um valor

de saliência dado pela diferença apropriada entre autovalores consecutivos de λ_n . A figura 4.6 mostra uma decomposição de tensores em um espaço tridimensional. Nesse caso, quando $\lambda_1 = 1, \lambda_2 = \lambda_3 = 0$, apenas o primeiro termo em 4-2 permanece, o qual corresponde a um elipsóide alongado, chamado o tensor palito, e representa um dado de uma superfície com \mathbf{e}_1 como sua normal. Quando $\lambda_1 = \lambda_2 = 1, \lambda_3 = 0$, apenas o segundo termo permanece, o qual corresponde a um elipsóide degenerado em forma de disco, chamado o tensor placa (*plate tensor*), e representa uma curva (ou uma interseção de superfícies) com \mathbf{e}_3 como sua tangente ou, com \mathbf{e}_1 e \mathbf{e}_2 como as duas normais que geram o subespaço de orientações, que é ortogonal a curva. Finalmente, quando todos os autovalores são iguais, apenas o terceiro termo permanece, o qual corresponde a uma esfera, chamada o tensor bola e corresponde a um dado não orientado o qual pode ser um volume interior (*inlier*) ou uma junção.

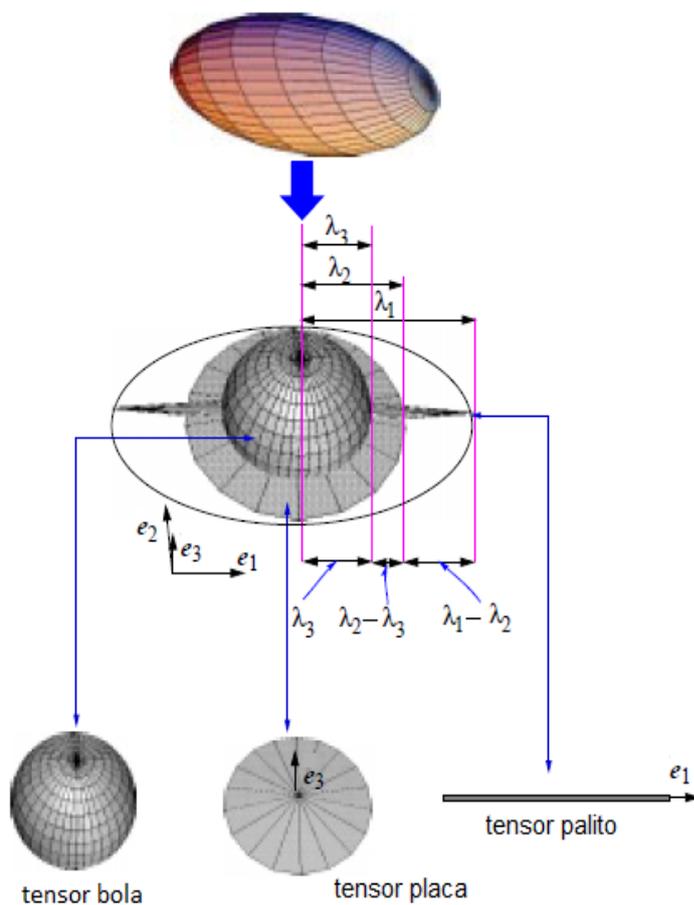


Figura 4.6: Decomposição de um tensor tridimensional em seus componentes: bola, placa e palito. (69)

Um esquema de representação suficiente para os nossos propósitos deve ser capaz de codificar tanto a estrutura perceptual suave quanto descontinuidade.

des, as quais podem aparecer de duas formas: descontinuidades de orientação e estruturais. Com relação a primeira, enquanto existe uma única orientação associada com um local dentro de um segmento de curva suave ou uma superfície elementar ou uma região fronteira, existem múltiplas orientações associadas com locais onde uma descontinuidade ocorre. Portanto, a representação de dados desejável é aquela que codifica mais do que uma orientação em um dado local e, um tensor simétrico de segunda ordem possui precisamente esta propriedade. Convém mencionar que os tensores simétricos de segunda ordem falham ao descrever descontinuidades estruturais, porque eles não podem capturar propriedades de primeira ordem, e as propriedades de segunda ordem da estrutura permanecem invariantes nas suas fronteiras. Com a finalidade de superar essa falha da estrutura, vetores (tensores de primeira ordem) são introduzidos (44). Assim, além dos tensores de segunda ordem, cada dado está associado com um vetor polaridade que codifica a probabilidade de um dado ser o término de uma estrutura perceptual. Vetores polaridade são sensíveis a propriedades de primeira ordem tais como a distribuição de dados vizinhos em torno de um dado qualquer. Término de estruturas podem ser detectados baseados na propriedade essencial de possuírem todos os vizinhos, ao menos localmente, no mesmo lado de um semi-espaço. Algumas referências que usam o tensor de primeira ordem incluem (75),(76),(45). Nesta tese, apenas trabalha-se com tensores simétricos de segunda ordem.

4.2

O processo de votação

Após a codificação das entradas como tensores, será realizada a chamada votação por tensores, isto é, um método de propagação da informação onde os dados comunicam suas preferências na orientação a seus vizinhos, na forma de votos. O voto de segunda ordem é um tensor de segunda ordem, que tem a orientação em termos de normais e tangentes que o receptor teria se o votante e o receptor fossem parte de uma mesma estrutura perceptual suave. Cada voto é uma estimativa da orientação de uma estrutura perceptual consistindo de apenas dois dados: o votante e o receptor. De acordo com os princípios Gestalt de proximidade, a força do voto se atenua com a distância, tornando menor a influência de dados distantes e possíveis interferências de dados não relacionados. A força do voto também diminui com o aumento da curvatura da estrutura hipotética, tornando preferíveis continuações retas a curvilíneas, seguindo o princípio de continuidade suave e simplicidade (43).

Os votos são depositados diretamente do votante para o receptor e

possuem perfeita certeza da informação que transmitem, já a incerteza se deve ao acúmulo dos diferentes votos em cada dado.

Vamos descrever os campos de votação n -dimensionais.

4.2.1 Votação Palito

Inicialmente, considera-se o caso de um votante associado com um tensor palito em um espaço bidimensional, isto é, o espaço normal é formado por um único vetor nesse espaço bidimensional. Considere um dado em A com normal \mathbf{n} e um dado em B que pertence a mesma estrutura perceptual suave, o voto que o dado em A (o votante) deposita em B (o receptor) tem a orientação que o receptor teria, se tanto o receptor quanto o votante pertencessem a mesma estrutura perceptual. A magnitude do voto é uma função da confiança que se tem que o votante e o receptor de fato pertencem a mesma estrutura intuitiva. Na falta de outra informação, o arco do círculo osculador (círculo que divide a mesma normal que uma curva no ponto dado) em A e que passa por B é o caminho suave mais provável, já que ele mantém a curvatura constante (45). O círculo osculador se degenera para um segmento de reta se o vetor conectando o votante e o receptor for ortogonal a normal do votante. Veja figura 4.7.

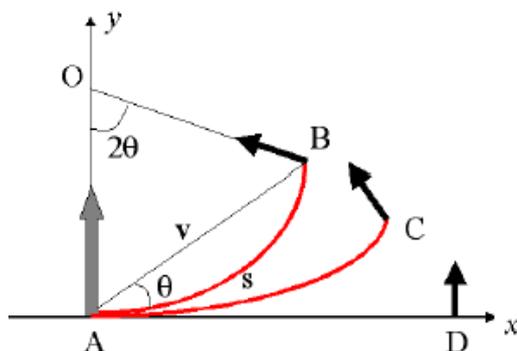


Figura 4.7: Votação Palito. A deposita um voto palito em B , C e D . O voto é uma função da posição relativa do votante palito, do receptor e da orientação do votante.

O voto de segunda ordem é também um tensor palito e tem uma normal situada ao longo do raio do círculo osculador em B . De acordo com os princípios Gestalt, o comprimento da normal em B , o qual representa a saliência do voto, deveria ser uma função de proximidade e continuação suave (ou de menor curvatura). A influência de um dado a outro deveria ser atenuada com a distância, a fim de minimizar interferências de dados não relacionados e curvatura, e favorecer continuação reta sobre alternativas curvas, quando

ambas possibilidades existirem. Assim, a magnitude do voto é inversamente proporcional ao comprimento do arco AB e também a curvatura do arco circular. Nota-se ainda que a conexão conforme dada pelo círculo osculador se torna menos provável se o ângulo subtendido por \mathbf{n} e \overline{AB} é menor do que 45° . Assim, nenhum voto é depositado se o receptor estiver em um ângulo maior do que 45° com respeito a tangente do círculo osculador no votante. Essa restrição, embora não seja uma escolha crítica, é feita para eliminar o cálculo de votos insignificantes. O decaimento dos votos palito (Função decaimento Gaussiana) toma a seguinte forma:

$$e^{-\left(\frac{s^2+c\kappa^2}{\sigma^2}\right)} \quad (4-3)$$

Na equação 4-3, s é o comprimento do arco entre o votante e o receptor (AB), κ é sua curvatura, a qual pode ser calculada do raio OA do círculo osculador na figura 4.7, σ é a escala de votação e c é uma constante, a qual controla o grau de decaimento da curvatura. A constante c é uma função da escala e seu valor é dado por: $c = \frac{-16 \log(0.1)(\sigma-1)}{\pi^2}$. A escala σ essencialmente controla o alcance dentro do qual dados podem influenciar outros dados. Também pode ser visto como uma medida de suavidade que regula a inevitável troca entre super suavização e super-ajuste. Enquanto valores pequenos preservam melhor os detalhes, mas são mais vulneráveis a ruídos, valores grandes produzem aproximações mais suaves que são mais robustas a ruídos. Nos testes realizados com dados sintéticos, verificamos que os resultados são estáveis com respeito a escala. Observe que σ é o único parâmetro livre nesta estrutura. O campo de votação palito para um votante palito unitário localizado na origem e alinhado com o eixo y pode ser definido como uma função da distância s entre o votante e o receptor e o ângulo θ , o qual é o ângulo entre a tangente do círculo osculador no votante e o segmento que liga o votante e o receptor. Para uma explicação detalhada da função decaimento Gaussiana consulte (44).

O voto é gerado de acordo com a equação 4-4:

$$S_{voto}(s, \theta, \kappa) = e^{-\left(\frac{s^2+c\kappa^2}{\sigma^2}\right)} \begin{pmatrix} -\text{sen}(2\theta) \\ \text{cos}(2\theta) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -\text{sen}(2\theta) & \text{cos}(2\theta) \end{pmatrix}, \quad (4-4)$$

$$\begin{aligned}\theta &= \arcsen\left(\frac{\mathbf{v}^T \mathbf{e}_1}{\|\mathbf{v}\|}\right), \\ s &= \frac{\theta \|\mathbf{v}\|}{\text{sen}(\theta)}, \\ \kappa &= \frac{2\text{sen}(\theta)}{\|\mathbf{v}\|}.\end{aligned}$$

Por simplicidade, pode-se utilizar a notação: $S_{voto}(s, \theta, \kappa) = S_{voto}(A, B, \mathbf{n}) = S_{voto}(s(A, B, \mathbf{n}), \theta(A, B, \mathbf{n}), \kappa(A, B, \mathbf{n}))$ para denotar o voto palito de A a B com \mathbf{n} sendo a normal em A . Temos que $s(A, B, \mathbf{n}), \theta(A, B, \mathbf{n}), \kappa(A, B, \mathbf{n})$ são os valores resultante dos parâmetros em 4-4, dados A, B e \mathbf{n} . Os votos são também tensores palito. Para tensores palito de tamanhos arbitrários, a magnitude do voto é dada pela função decaimento gaussiana da equação 4-4 multiplicada pelo tamanho da orientação $\lambda_1 - \lambda_2$. Essa votação é uma função apenas da posição do receptor relativo ao votante e da preferência de orientação do votante. Assim, o problema se resume a encontrar o caminho mais suave entre o votante e o receptor através do ajuste de arcos do círculo osculador. Como o votante, o receptor e a normal no votante definem um plano, o procedimento de votação está restrito a este plano. Portanto, a votação palito sempre ocorre num subespaço bidimensional definido pelo vetor conectando os dois pontos e pela normal no votante, independente da dimensão do espaço de entrada, tornando o caso n -dimensional idêntico ao caso bidimensional. O cálculo do voto palito é idêntico em qualquer espaço entre 2 e n dimensões. Após o voto ter sido calculado, ele tem que ser transformado para o espaço n -dimensional e alinhado ao votante por uma rotação e translação.

4.2.2

Votação Bola

A geração de votos bola se baseia na observação de que o voto gerado por um votante bola propaga a preferência do votante por uma linha reta conectando ele ao receptor, veja a figura 4.8. A linha reta é a continuação mais simples e suave entre dois pontos, na falta de outra informação. Portanto, o voto gerado por um votante bola é um tensor que gera o espaço normal da linha, de dimensão $(n-1)$ e possui um autovalor zero associado com o autovetor que é paralelo a linha. Sua magnitude é uma função da distância entre os dois pontos, já que a curvatura é zero. Considerando essas observações, o voto bola pode ser construído pela subtração do produto direto do vetor unitário na direção

do votante pelo receptor de um tensor de posto máximo com autovalores iguais (isto é, a matriz identidade). O tensor resultante é atenuado pelo mesmo peso gaussiano de acordo com a distância entre o votante e o receptor.

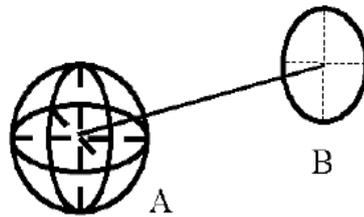


Figura 4.8: Votação Bola

O voto bola é gerado de acordo com a equação:

$$B_{voto}(s) = e^{-\left(\frac{s^2}{\sigma^2}\right)} \left(I - \frac{\mathbf{v}\mathbf{v}^T}{\|\mathbf{v}\mathbf{v}^T\|} \right). \quad (4-5)$$

Na equação 4-5, \mathbf{v} é o vetor unitário paralelo a linha que conecta o votante ao receptor e I é a matriz identidade n -dimensional. Neste caso, $s = \|\mathbf{v}\|$ e θ e κ são omitidos pois não afetam o cálculo. Para os tensores bola, a magnitude do voto tem que ser multiplicada por λ_n . Notação mais simples: $B_{voto}(A, B) = B_{voto}(s(A, B)) = B_{voto}(s)$

4.2.3

Votação por tensores elementares (placa)

Para completar a descrição da geração de votos, vamos descrever o caso de um tensor que tem d autovalores iguais, onde d não é igual a 1 ou n . Um exemplo é um elemento de uma curva em um espaço tridimensional, o qual possui subespaço normal de posto 2 e um subespaço tangente de posto 1. A descrição também se aplica aos casos onde $d = 1$ e $d = n$, isto é, aos tensores palito e bola, porém, para estes casos, serão utilizados os cálculos diretos já apresentados, por serem mais rápidos.

Considere \mathbf{v} o vetor conectando o votante e o receptor. Ele pode ser decomposto em \mathbf{v}_t no espaço tangente do votante (nulo no caso de um votante bola) e \mathbf{v}_n no espaço normal. O novo processo de geração de votos é baseado na observação de que a curvatura na equação 4-4 não é um fator quando θ é zero, ou, em outras palavras, se o voto palito é ortogonal a \mathbf{v}_n . Este fato será explorado pela definição de uma nova base para o espaço normal do votante que inclua \mathbf{v}_n . A nova base é calculada usando o procedimento de Gram-Schmidt. O voto é então construído pela adição tensorial dos votos depositados

pelos tensores palitos paralelos aos vetores da nova base. Dentre aqueles votos, apenas aquele gerado pelo tensor palito paralelo a \mathbf{v}_n , não é paralelo ao espaço normal do votante e a curvatura tem que ser considerada. Todos os outros votos são uma função do comprimento de \mathbf{v}_t apenas. Veja a figura 4.9 para uma ilustração em um espaço tridimensional. Neste exemplo, o votante é um tensor com duas normais em em um espaço tridimensional. O vetor conectando o votante e o receptor é decomposto em \mathbf{v}_n e \mathbf{v}_t , que pertencem ao espaço normal e tangente do votante, respectivamente. Uma nova base que inclua \mathbf{v}_n é definida para o espaço normal e cada componente da base deposita um voto palito. Apenas o voto gerado pela orientação paralela a \mathbf{v}_n não é paralela ao espaço normal. A adição dos tensores dos votos palitos produzem o voto combinado.

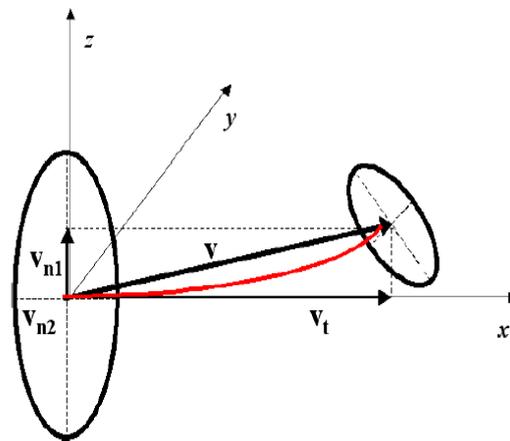


Figura 4.9: Votação por tensores genéricos. Neste esquema, o votante é um tensor com duas normais (\mathbf{v}_{n1} e \mathbf{v}_{n2}) em um espaço tridimensional.

Analicamente, o voto é calculado como a soma de d votos palitos depositados pela nova base do espaço normal. Seja N_S o espaço normal do votante e seja $\mathbf{b}_i, i \in [1, d]$, uma base para este espaço com \mathbf{b}_1 sendo paralelo a \mathbf{v}_n . Se $S_{voto}(A, B, \mathbf{b})$ é a função que gera o voto palito de um tensor palito unitário em A paralelo a \mathbf{b} para o receptor B , então o voto de um tensor genérico com espaço normal N é dado por:

$$V_{voto}(A, B, T_{e,d}) = S_{voto}(A, B, \mathbf{b}_1) + \sum_{i \in [2,d]} S_{voto}(A, B, \mathbf{b}_i). \quad (4-6)$$

Na equação 4-6, $T_{e,d}$ denota o tensor elementar (placa) com d autovalores iguais não nulos. No lado direito da equação, todos os termos são tensores

palitos puros paralelos aos votantes, com exceção do primeiro, o qual é afetado pela curvatura do caminho conectando o votante e o receptor. Portanto, apenas um voto requer o cálculo completo da orientação e magnitude. Isto torna o esquema proposto computacionalmente de baixo custo. A magnitude do voto placa tem que ser multiplicada por $\sum_{d \in [2, n-1]} (\lambda_d - \lambda_{d+1})$.

4.2.4

Implementação da Votação por Tensores

Dado um conjunto de dados de entrada, eles são primeiramente codificados como tensores. Esses tensores iniciais se comunicam por meio de uma votação, chamada votação esparsa. Nesta votação, cada dado coleta todos os valores de tensores depositados em seu local por outros dados em uma vizinhança, além de depositar votos nos dados vizinhos. O valor do tensor resultante é a soma dos tensores de todos os votos depositados no local daquele dado. Essa votação resulta em um conjunto de tensores genéricos, os quais descrevem a preferência de orientação. Cada tensor é então decomposto em seus n elementos componentes. Uma nova votação é realizada, chamada votação densa. Nessa etapa, cada componente de cada dado transmite a informação da orientação preferida em uma vizinhança, assim, um tensor é depositado em todo local na vizinhança e recebe votos dos dados vizinhos. A informação densa resultante pode ser usada para extrair características da estrutura, como a orientação preferida (ou nenhuma orientação) em cada local.

Representação: Cada dado codifica a informação do tensor local. Os pontos sem orientação conhecida são representados pela matriz identidade (tensores bola perfeitos). Já os pontos com orientação conhecida, são codificados conforme a informação inicial apresentada, podendo ser codificados como um palito perfeito ou tensor genérico perfeito (no caso de n dimensões, teremos um total de $n - 2$ casos desse tipo).

Votação esparsa: Cada dado, codificado com o tensor apropriado, deposita um voto a cada um dos dados dentro de uma vizinhança. Os votos recebidos são acumulados pela adição dos tensores, o que equivale a adição matricial. Estes tensores iniciais se comunicam uns com os outros para obterem informações sobre a orientação preferida ou refinar a orientação inicial, caso esta seja dada. O resultado desta primeira votação é um conjunto de tensores genéricos.

Decomposição: Após a primeira votação, o tensor acumulado é decomposto como na equação 4-2.

Votação densa: Nessa segunda etapa, o componente bola é descartado, pois não possui informação sobre orientação preferida e não deve ser propagado. Já os outros componentes votam. A informação inferida na votação anterior é propagada com o propósito de se extrair características coerentes.

Análise do voto: Esta etapa será explicada na próxima subseção, tem por objetivo extrair informações da dimensionalidade intrínseca local e orientações preferidas.

O resultado desse procedimento são tensores densos, os quais contêm informações sobre as estruturas locais que representam, bem como orientação. Observe que todos os tensores são matrizes $n \times n$ simétricas, definidas não negativa. Um esboço do algoritmo é apresentado a seguir.

Algoritmo 1: O processo de votação

Dados:

N pontos de entrada $P_i \in \mathbb{R}^n$ e condições iniciais, se disponíveis;

Considere:

T_i o tensor elementar associado a cada ponto P_i ;

R_i a matriz que acumulará os votos.

1. Inicialização:

Inicialize T_i de acordo com as condições iniciais.

for $i \in [1, N]$:

if P_i é um ponto em um espaço n -dimensional sem orientação, ele é codificado como tensor bola n -dimensional ($\lambda_1 = \lambda_2 = \lambda_3 = \dots = \lambda_n = 1$), com $\mathbf{e}_1 = [1 \ 0 \ \dots \ 0]^T$, $\mathbf{e}_2 = [0 \ 1 \ \dots \ 0]^T$ e $\mathbf{e}_N = [0 \ 0 \ \dots \ 1]^T$

$T_i = I$, onde I representa a matriz identidade $n \times n$.

end if

if P_i representa um elemento de uma hipersuperfície n -dimensional:

T_i equivale a um tensor palito ($\lambda_1 = 1, \lambda_2 = \lambda_3 = \dots = \lambda_n = 0$), com \mathbf{e}_1 igual a direção da normal a hipersuperfície dada e $\mathbf{e}_2, \dots, \mathbf{e}_n$ são vetores unitários ortonormais uns aos outros e também ao \mathbf{e}_1 .

$T_i = \mathbf{e}_1 \mathbf{e}_1^T$

end if

if P_i representa um elemento de uma curva em um espaço n -dimensional então:

T_i é codificado como um tensor placa ($\lambda_1 = \lambda_2 = \dots = \lambda_{n-1} = 1, \lambda_n = 0$) com \mathbf{e}_n igual a direção da tangente a curva.

$$T_i = \sum_{d=1}^{n-1} \mathbf{e}_d \mathbf{e}_d^T$$

Outros tensores placa são codificados de maneira semelhante. Para $2 \leq j < n$, $\lambda_1 = \lambda_2 = \dots = \lambda_j = 1, \lambda_{j+1} = \lambda_{j+2} = \dots = \lambda_n = 0$, teremos $T_i = \sum_{d=1}^j \mathbf{e}_d \mathbf{e}_d^T$, indicando a incerteza em j direções, as quais definem uma característica $(n - j)$ -dimensional, cujas direções são dadas por $\mathbf{e}_{j+1}, \mathbf{e}_{j+2}, \dots, \mathbf{e}_n$.

end if

$$R_i \leftarrow 0$$

Calcule os vizinhos de cada dado P_i .

2. Votação esparsa:

for $i \in [1, N]$:

for P_j na vizinhança de P_i :

if $\frac{\lambda_1 - \lambda_2}{\lambda_1} > 0.01$:

Calcule o voto palito $S_{voto}(P_i, P_j, \mathbf{e}_1^{(i)})$ de P_i em P_j como em 4-4.

end if

if $\lambda_n > 0$:

Calcule o voto bola $B_{voto}(P_i, P_j)$ como em 4-5.

end if

for $d \in [2, n - 1]$:

if $\frac{\lambda_d - \lambda_{d+1}}{\lambda_d} > 0.01$:

Calcule o voto placa $V_{voto}(P_i, P_j, T_{e,d}^{(i)})$ de P_i em P_j como em 4-6.

end if

end for

Adicione os votos ao acumulador de P_j :

$$R_j \leftarrow R_j + (\lambda_1 - \lambda_2) S_{voto}(P_i, P_j, \mathbf{e}_1^{(i)}) + \lambda_n B_{voto}(P_i, P_j) + \sum_{d \in [2, n-1]} (\lambda_d - \lambda_{d+1}) V_{voto}(P_i, P_j, T_{e,d}^{(i)}).$$

end for

3. Decomposição

Cada tensor T_i é decomposto como na equação 4-2. Assim,

for $i \in [1, N]$:

Calcule os autovalores e autovetores $(\lambda_d^{(i)}, \mathbf{e}_d^{(i)})$ de T_i .

end for

4. Votação densa:

Cada um dos componentes da decomposição de um tensor vota separadamente nesse etapa, com exceção do tensor bola, que não possui informação sobre orientação preferida a ser propagada.

Faça $R_i \leftarrow 0$.

for $i \in [1, N]$:

for P_j na vizinhança de P_i :

if $\frac{\lambda_1 - \lambda_2}{\lambda_1} > 0.01$:

Calcule o voto palito $S_{voto}(P_i, P_j, \mathbf{e}_1^{(i)})$ de P_i em P_j como em

4-4.

end if

for $d \in [2, n - 1]$:

if $\frac{\lambda_d - \lambda_{d+1}}{\lambda_d} > 0.01$:

Calcule o voto placa $V_{voto}(P_i, P_j, T_{e,d}^{(i)})$ de P_i em P_j como em

4-6.

end if

end for

Adicione os votos ao acumulador de P_j :

$$R_j \leftarrow R_j + (\lambda_1 - \lambda_2)S_{voto}(P_i, P_j, \mathbf{e}_1^{(i)}) + \sum_{d \in [2, n-1]} (\lambda_d - \lambda_{d+1})V_{voto}(P_i, P_j, T_{e,d}^{(i)}).$$

end for

5. Análise do voto

for $i \in [1, N]$:

Calcule os autovalores e autovetores $(\lambda_d^{(i)}, \mathbf{e}_d^{(i)})$ de R_i a fim de determinar a dimensionalidade e orientação.

end for

4.2.5

Análise do voto

Existem $n + 1$ tipos de estruturas em uma espaço n -dimensional, abrangendo de pontos 0 - D a hipervolumes n -dimensionais. No algoritmo apresentado

(Algoritmo 1), definimos o tensor receptor R_i , o qual acumula os votos recebidos pelo tensor i dos tensores dentro da vizinhança de P_i . Ao término do processo de votação, calculam-se os autovalores e autovetores de R_i e o tensor é decomposto como na equação 4-2.

Em um espaço tridimensional, a inferência do tipo de estrutura a qual um ponto pertence é explicada do seguinte modo:

- $\lambda_1 - \lambda_2$ codifica a confiança em uma superfície, com a normal a superfície dada por \mathbf{e}_1 .
- $\lambda_2 - \lambda_3$ codifica a confiança em uma curva ou a uma junção de superfícies, com as normais a curva dadas por \mathbf{e}_1 e \mathbf{e}_2
- λ_3 codifica a confiança em uma junção.
- $\lambda_1 \approx \lambda_2 \approx \lambda_3 \approx 0$ codificam um valor atípico (*outlier*) desde que recebem pouco ou inconsistentes suportes dos vizinhos.

A generalização para dimensões maiores é feita sem dificuldades. A estimativa da dimensionalidade intrínseca local é dada pela máxima diferença nos autovalores. Em geral, se a máxima diferença nos autovalores é dada por $\lambda_d - \lambda_{d+1}$, a dimensionalidade intrínseca local estimada é $n - d$, e a variedade possui d normais e $n - d$ tangentes. Ademais, os d primeiros autovetores correspondentes aos maiores autovalores são as normais a variedade e os autovetores restantes são as tangentes. Os valores atípicos, chamados *outliers* podem ser detectados, pois todos os autovalores deles são pequenos e nenhum tipo de estrutura preferida emerge. Tal fato ocorre porque eles estão mais isolados que os valores típicos ou interiores (*inliers*), portanto, não recebem votos que consistentemente suportem qualquer estrutura saliente. Em (47), mostra-se que a votação por tensores é robusta contra valores atípicos.

Em (46), é apresentado um algoritmo que permite a interpolação e produção de novos pontos na variedade. O primeiro passo para interpolação é a aprendizagem da estrutura da variedade, usualmente tomando pontos sem orientação, representados por tensores bola. Seleciona-se um ponto de partida, que deve estar na variedade, e um ponto alvo ou uma direção desejada a partir do ponto de partida. A cada passo, projeta-se a direção desejada no espaço tangente do ponto atual, obtendo assim um novo ponto em uma distância pequena. O espaço tangente do novo ponto é então calculado coletando votos dos pontos vizinhos, como em uma votação regular. Nessa etapa, os tensores utilizados não serão mais os tensores bola, mas sim os tensores resultantes do passo anterior da votação, de acordo o algoritmo 1, passo 4. A direção desejada é então projetada no espaço tangente do novo ponto e o processo se repete até

que o destino seja alcançado. Este procedimento é utilizado na estimação de distâncias geodésicas entre pontos na variedade e comparado com alguns dos algoritmos mais amplamente utilizados na literatura. Os resultados podem ser vistos em (46),(47). Esse algoritmo também será utilizado para aproximação de funções.

Com relação a aproximação de funções, considere os dados de entrada cujas saídas são desconhecidas, o objetivo é encontrar pontos na variedade que correspondam a uma entrada similar àquele dado cuja saída se quer obter. Assume-se que se tem disponível para treinamento observações no espaço n -dimensional que incluem valores para as variáveis de entrada e saída. Assim, a fim de prever a saída y da função, para uma entrada desconhecida $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$, sobre a hipótese de suavidade local, devemos nos mover na variedade formada pelas amostras de treinamento até que seja alcançado um ponto correspondente as coordenadas de entrada dadas. Para garantir que sempre estamos na variedade, iniciamos de um ponto nela e procedemos como no algoritmo para interpolação. O procedimento ocorre do seguinte modo, para encontrar um ponto de partida adequado, deve-se buscar o vizinho mais próximo de \mathbf{x} no espaço de entrada, o qual tem menos dimensões do que o espaço de votação entrada-saída. Portanto, pode-se calcular a direção desejada no espaço de baixa dimensão e projetá-lo no espaço entrada-saída. Caso muitas saídas sejam possíveis para uma mesma entrada (fato que ocorre caso os dados não tenham sido gerados por uma função no sentido estrito), pode-se tanto encontrar os vizinhos em cada ramo da função e produzir múltiplas saídas, quanto usar outra informação, tal como o estado anterior do sistema, para seguir apenas uma das alternativas. Pode-se ainda encontrar múltiplos vizinhos mais próximos, rodar o algoritmo proposto iniciando de cada um deles e produzir uma resposta com vários valores com uma probabilidade associada com cada valor de saída potencial.

4.3 Experimentos

Realizaremos alguns testes com dados sintéticos para avaliar o desempenho da votação por tensores quanto a estimação da dimensionalidade correta e orientação dos vetores obtidos. Também propomos alguns métodos para o cálculo do erro na orientação obtida.

Inicialmente, vamos testar o método de votação por tensores com relação a estimação da dimensionalidade correta. Conforme estudado no capítulo 4, a dimensionalidade intrínseca em cada ponto pode ser obtida como a máxima

diferença nos autovalores do tensor resultante dos votos acumulados dos pontos vizinhos. Todas as entradas consistem apenas de pontos sem informação quanto a orientação e, portanto, são codificadas como tensores bola. Para essa etapa, geramos 1500 e 5000 pontos e os resultados estão em função do parâmetro σ e do número de vizinhos dado, como mostram as tabelas para cada conjunto de dados estudado. A primeira coluna exibe o parâmetro σ testado; a segunda coluna, mostra o percentual dos pontos com a dimensionalidade estimada corretamente. Num segundo momento, estudamos a orientação dos vetores obtidos, de acordo com o caso de estudo. Assim, as duas últimas colunas mostram a precisão da estimativa da orientação obtida, independente da dimensionalidade ter sido estimada corretamente.

4.3.1

Curva no \mathbb{R}^3

Consideremos a representação paramétrica da hélice 4.10.

$$\begin{aligned} \mathbf{r} : \mathbb{R} &\rightarrow \mathbb{R}^3 \\ t &\rightarrow (\cos t, \sin t, t/2\pi), \quad t \in [0, 6\pi] \end{aligned}$$

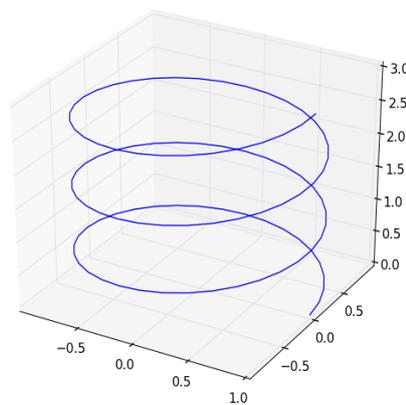


Figura 4.10: Hélice

A dimensionalidade correta ocorre quando a máxima diferença nos autovalores é dada por $\lambda_2 - \lambda_3$. O erro reportado nas tabelas é o ângulo entre o autovetor correspondente ao menor autovalor do tensor estimado em cada ponto (neste exemplo, \mathbf{e}_3) e o vetor tangente local. Cada linha da tabela mostra o resultado sobre 10 amostragens diferentes.

N=1500 e viz=15				N=1500 e viz=150			
σ	DE	Erros Orientação(graus)		σ	DE	Erros Orientação(graus)	
		mediana	média			mediana	média
3	100%	0.77	0.87	3	98%	2.95	3.44
5	100%	0.93	1.01	5	98%	3.64	4.10
8	100%	1.25	1.33	8	99%	4.11	4.66
10	100%	1.11	1.20	10	99%	4.29	4.88
15	100%	1.19	1.29	15	99%	4.76	5.31
20	100%	1.23	1.34	20	99%	4.88	5.51
30	100%	1.31	1.40	30	99%	5.19	5.77
40	100%	1.33	1.42	40	99.7%	5.19	5.83

Tabela 4.1: Curva no \mathbb{R}^3 . Taxa da estimativa correta da dimensionalidade(DE) e erro (em graus) da orientação tangente, em função do parâmetro σ e do número de vizinhos (viz).

N=1500 e viz=300			
σ	DE	Erros Orientação(graus)	
		mediana	média
3	74.94%	6.5	11.5
5	68.66%	6.31	14.56
8	67.81%	6.36	17.44
10	66.64%	6.68	17.3
15	65.91%	7.21	19.59
20	65.08%	6.9	19.59
30	64.25%	7.5	19.52
40	62.72%	7.3	21.67

Tabela 4.2: Curva no \mathbb{R}^3 . Taxa da estimativa correta da dimensionalidade(DE) e erro (em graus) da orientação tangente, em função do parâmetro σ e do número de vizinhos (viz).

Com relação aos resultados exibidos nas tabelas 4.1, 4.2, 4.3, 4.4, o que podemos notar é que a precisão é estável para um grande alcance de valores de σ , desde que se tome um número adequado de vizinhos. Uma vizinhança muito grande não é capaz de capturar a curvatura da variedade, assim, para que o método forneça boas estimativas torna-se necessário que se faça uma escolha adequada do número de vizinhos.

N=5000 e viz=50				N=5000 e viz=500			
σ	DE	Erros Orientação(graus)		σ	DE	Erros Orientação(graus)	
		mediana	média			mediana	média
3	100%	0.82	0.84	3	89%	4.58	4.64
5	100%	0.96	0.99	5	89.4%	5.45	5.56
8	100%	1.09	1.12	8	96.5%	6.18	6.35
10	100%	1.15	1.18	10	96.75%	6.45	6.77
15	100%	1.23	1.26	15	98.9%	4.64	5.22
20	100%	1.28	1.31	20	97.4%	7.18	7.65
30	100%	1.32	1.35	30	99.4%	4.98	5.62
40	100%	1.33	1.37	40	99.5%	5.12	5.77

Tabela 4.3: Curva no \mathbb{R}^3 . Taxa da estimativa correta da dimensionalidade(DE) e erro (em graus) da orientação tangente, em função do parâmetro σ e do número de vizinhos (viz).

N=5000 e viz=1000			
σ	DE	Erros Orientação(graus)	
		mediana	média
3	72.37%	5.19	11.78
5	69.48%	5.16	16.44
8	67.25%	5.7	17.36
10	67.16%	5.86	18.28
15	65.62%	5.71	20.13
20	65.67%	5.95	21.37
30	65.36%	6.35	23.84
40	64.11%	6.21	22.5

Tabela 4.4: Curva no \mathbb{R}^3 . Taxa da estimativa correta da dimensionalidade (DE) e erro (em graus) da orientação tangente, em função do parâmetro σ e do número de vizinhos (viz).

4.3.2 Superfície no \mathbb{R}^3

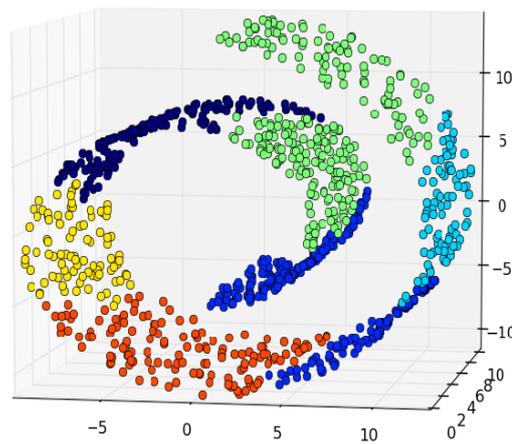
Consideraremos o conjunto de dados *Swiss Roll*, que consiste de pontos de uma variedade bidimensional em um espaço tridimensional. A representação paramétrica é dada por:

$$\mathbf{r} : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}^3$$

$$(t_1, t_2) \rightarrow (\sqrt{2 + 2t_1} \cos(2\pi\sqrt{2 + 2t_1}), \sqrt{2 + 2t_1} \sin(2\pi\sqrt{2 + 2t_1}), 2t_2),$$

onde $t_1, t_2 \in [-1, 1]$.

Para este exemplo, a dimensionalidade estimada corretamente ocorre para os pontos cuja maior diferença nos autovalores é dada por $\lambda_1 - \lambda_2$. O erro

Figura 4.11: *Swiss Roll*

de orientação é o ângulo entre o autovetor correspondente ao maior autovalor do tensor estimado em cada ponto e a normal a superfície naquele ponto, a qual foi calculada pelo produto vetorial entre as derivadas parciais em relação a cada um dos parâmetros. Cada linha da tabela mostra o resultado sobre 10 amostragens diferentes.

N=1500 e viz=10				N=1500 e viz=15			
σ	DE	Erros Orientação(graos)		σ	DE	Erros Orientação(graos)	
		mediana	média			mediana	média
3	72.17%	3.37	6.29	3	77.16%	4.03	6.48
5	74.59%	3.38	5.82	5	79.37%	4.13	6.18
8	76.63%	3.40	5.39	8	82.14%	4.25	5.98
10	76.67%	3.39	5.19	10	82.28%	4.28	5.88
15	78.19%	3.43	5.07	15	84.16%	4.44	5.84
20	78.26%	3.49	5.03	20	84.80%	4.48	5.81
30	77.99%	3.45	4.88	30	84.11%	4.51	5.79
40	77.64%	3.47	4.98	40	84.00%	4.60	5.83

Tabela 4.5: *Swiss Roll*. Taxa da estimativa correta da dimensionalidade (DE) e erro (em graus) da orientação normal, em função do parâmetro σ e do número de vizinhos (viz).

Com relação aos resultados obtidos nas tabelas 4.5, 4.6, 4.7, 4.8, verificamos que se deve tomar um número de vizinhos que possa capturar a estrutura da variedade e tal número deve escolhido observando-se tanto o número de dados disponíveis quanto o número de variáveis. A escolha do parâmetro σ não afeta a precisão, uma vez que se fez uma escolha adequada do número de vizinhos.

N=1500 e viz=20				N=1500 e viz=50			
σ	DE	Erros Orientação(graos)		σ	DE	Erros Orientação(graos)	
		mediana	média			mediana	média
3	78.71%	4.78	7.27	3	80.92%	8.32	10.58
5	82.19%	4.87	6.79	5	84.45%	8.34	10.4
8	84.82%	5.08	6.76	8	88.13%	8.54	10.18
10	85.07%	5.14	6.56	10	88.45%	8.7	10.25
15	86.37%	5.25	6.51	15	89.13%	8.78	10.12
20	86.88%	5.30	6.57	20	89.84%	8.97	10.17
30	87.11%	5.39	6.65	30	90.97%	9.18	10.41
40	87.5%	5.65	6.85	40	90.55%	9.16	10.43

Tabela 4.6: *Swiss Roll*. Taxa da estimativa correta da dimensionalidade (DE) e erro (em graus) da orientação normal, em função do parâmetro σ e do número de vizinhos (viz).

N=5000 e viz=5				N=5000 e viz=15			
σ	DE	Erros Orientação(graos)		σ	DE	Erros Orientação(graos)	
		mediana	média			mediana	média
3	64.68%	1.80	5.12	3	81.54%	2.29	4.30
5	65.91%	1.75	4.62	5	84.26%	2.31	3.91
8	67.06%	1.71	4.17	8	86.73%	2.35	3.68
10	67.33%	1.69	4.02	10	87.61%	2.36	3.53
15	67.75%	1.63	3.72	15	88.95%	2.40	3.45
20	68.04%	1.59	3.44	20	89.67%	2.39	3.32
30	68.00%	1.57	3.25	30	90.31%	2.45	3.28
40	68.00%	1.53	3.17	40	90.56%	2.48	3.33

Tabela 4.7: *Swiss Roll*. Taxa da estimativa correta da dimensionalidade (DE) e erro (em graus) da orientação normal, em função do parâmetro σ e do número de vizinhos (viz).

N=5000 e viz=50				N=5000 e viz=100			
σ	DE	Erros Orientação(graos)		σ	DE	Erros Orientação(graos)	
		mediana	média			mediana	média
3	88.32%	4.91	6.67	3	88.15%	7.41	9.24
5	91.33%	5.02	6.36	5	90.70%	7.48	8.86
8	93.38%	5.20	6.19	8	93.55%	7.70	8.69
10	94.21%	5.27	6.17	10	94.32%	7.82	8.64
15	95.62%	5.46	6.24	15	95.47%	8.06	8.71
20	95.81%	5.49	6.19	20	95.78%	8.14	8.82
30	96.52%	5.60	6.32	30	96.83%	8.27	8.94
40	96.69%	5.69	6.51	40	96.58%	8.41	9.13

Tabela 4.8: *Swiss Roll*. Taxa da estimativa correta da dimensionalidade (DE) e erro (em graus) da orientação normal, em função do parâmetro σ e do número de vizinhos (viz).

4.3.3

Curva no \mathbb{R}^4

A representação paramétrica da curva no \mathbb{R}^4 estudada é dada por:

$$\begin{aligned} \mathbf{r} : \mathbb{R} &\rightarrow \mathbb{R}^4 \\ t &\rightarrow (\cos(t), \sin(t), t/2\pi, e^{-t}), \end{aligned}$$

onde $t \in [0, 6\pi]$.

A estimativa da dimensionalidade correta em cada ponto ocorre quando a diferença máxima nos autovalores é dada por $\lambda_3 - \lambda_4$. O erro reportado nas tabelas é o ângulo entre o autovetor correspondente ao menor autovalor do tensor estimado em cada ponto (neste exemplo, \mathbf{e}_4) e o vetor tangente local. Cada linha da tabela mostra o resultado sobre 10 amostragens diferentes.

N=1500 e viz=15				N=1500 e viz=150			
σ	DE	Erros Orientação(graus)		σ	DE	Erros Orientação(graus)	
		mediana	média			mediana	média
3	100%	0.45	0.55	3	100%	1.81	2.46
5	100%	0.52	0.62	5	100%	2.06	2.71
8	100%	0.60	0.70	8	100%	2.45	3.01
10	100%	0.63	0.73	10	100%	2.58	3.18
15	100%	0.70	0.79	15	100%	2.78	3.40
20	100%	0.73	0.82	20	100%	3.04	3.56
30	100%	0.76	0.86	30	100%	3.22	3.74
40	100%	0.83	0.93	40	100%	3.26	3.82

Tabela 4.9: Curva no \mathbb{R}^4 . Taxa da estimativa correta da dimensionalidade(DE) e erro (em graus) da orientação tangente, em função do parâmetro σ e do número de vizinhos (viz).

Nas tabelas 4.9, 4.10, 4.11 e 4.12, verificamos que temos uma boa precisão para um amplo alcance de valores de σ . Deve-se atentar para a escolha do número de vizinhos, pois um número de vizinhos muito grande pode interferir na precisão. Nesses casos, o desempenho diminui, como se verifica quando temos 1500 dados e 300 vizinhos e 5000 dados e 1000 vizinhos.

N=1500 e viz=300			
σ	DE	Erros Orientação(graos)	
		mediana	média
3	58%	3.84	13.2
5	54.6%	3.62	12.4
8	53.95%	4.11	13.7
10	55.75%	4.00	17.43
15	51.86%	4.29	15.88
20	51.89%	4.2	14.8
30	52.28%	4.13	14.73
40	52.29%	4.55	15.77

Tabela 4.10: Curva no \mathbb{R}^4 . Taxa da estimativa correta da dimensionalidade (DE) e erro (em graus) da orientação tangente, em função do parâmetro σ e do número de vizinhos (viz).

N=5000 e viz=15				N=5000 e viz=500			
σ	DE	Erros Orientação(graos)		σ	DE	Erros Orientação(graos)	
		mediana	média			mediana	média
3	100%	0.47	0.49	3	100%	1.69	2.26
5	100%	0.57	0.59	5	100%	2.04	2.60
8	100%	0.66	0.68	8	100%	2.41	2.97
10	100%	0.70	0.72	10	100%	2.60	3.14
15	100%	0.76	0.78	15	100%	2.81	3.38
20	100%	0.79	0.82	20	100%	2.95	3.50
30	100%	0.83	0.85	30	100%	3.10	3.67
40	100%	0.85	0.87	40	100%	3.15	3.75

Tabela 4.11: Curva no \mathbb{R}^4 . Taxa da estimativa correta da dimensionalidade(DE) e erro (em graus) da orientação tangente, em função do parâmetro σ e do número de vizinhos (viz).

N=5000 e viz=1000			
σ	DE	Erros Orientação(graos)	
		mediana	média
3	58.36%	3.39	12.49
5	57%	3.35	13.48
8	55.42%	3.71	13.59
10	55.42%	3.61	14.55
15	55.17%	3.77	17.81
20	54.61%	3.89	18.04
30	53.33%	3.85	16.96
40	53.58%	4.17	19.35

Tabela 4.12: Curva no \mathbb{R}^4 . Taxa da estimativa correta da dimensionalidade (DE) e erro (em graus) da orientação tangente, em função do parâmetro σ e do número de vizinhos (viz).

4.3.4 Superfície no \mathbb{R}^4

A representação paramétrica da superfície no \mathbb{R}^4 estudada é dada por:

$$\begin{aligned} \mathbf{r} : \mathbb{R}^2 &\rightarrow \mathbb{R}^4 \\ (t_1, t_2) &\rightarrow (t_1 \cos(t_2), t_1 \sin(t_2), t_1^2 \cos(2t_2), t_1^2 \sin(2t_2)), \end{aligned}$$

onde $t_1 \in [0, 1]$, $t_2 \in [0, 2\pi]$.

Essa superfície é originada da equação complexa $\mathbf{w} = \mathbf{z}^2$, onde para cada ponto $P(x, y, z, w)$ pertencente a superfície \mathcal{S} , corresponde $\mathbf{w} = x + yi$ e $\mathbf{z} = z + wi$. A superfície implícita $\mathcal{S} = f^{-1}(0, 0)$ é definida pelas funções $f(x, y, z, w) = (x - z^2 + w^2, y - 2zw)$. Uma visualização dessa superfície é dada na dissertação de Azevedo (3). Essa visualização utiliza um diagrama de coloração de domínio (*Domain Coloring*), no qual as cores variam entre os tons de vermelho, verde e azul, com cores secundárias e terciárias, num total de doze tonalidades. A intensidade de cada cor aumenta conforme se aproxima do centro do círculo, ao qual se atribui a cor branca, e diminui em direção ao raio máximo r_{max} , quando a cor preta é atingida. Dado um número complexo $\mathbf{w} = re^{i\theta}$, o argumento θ representa uma cor e o módulo $r = |\mathbf{w}|$ representa uma intensidade. Assim, a cada um dos pontos $P(x, y, z, w)$ da superfície, associamos uma cor. Considerando-se $\mathbf{w} = x + yi$, temos $\theta = \arctan(\frac{y}{x})$ e $r = \sqrt{x^2 + y^2}$ e a visualização obtida em (3), pode ser vista na figura 4.12.

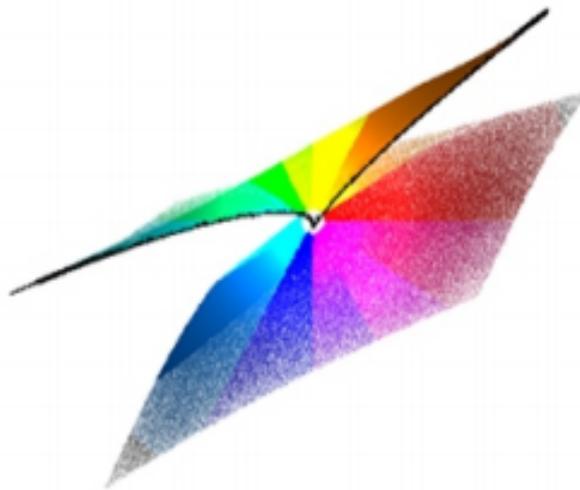


Figura 4.12: Superfície implícita no \mathbb{R}^4 definida pela equação complexa $\mathbf{w} = \mathbf{z}^2$

A estimativa da dimensionalidade correta em cada ponto ocorre quando a máxima diferença entre os autovalores do tensor resultante do acúmulo de

votos dos dados vizinhos naquele ponto é dada por $\lambda_2 - \lambda_3$. Nesse caso temos duas tangentes e duas normais. Para calcular o erro de orientação em cada ponto na variedade elaboramos o seguinte procedimento:

- calculamos as derivadas parciais da função \mathbf{r} em relação a cada um de seus parâmetros, isto é, calculamos $\mathbf{r}_{t_1} = \partial\mathbf{r}/\partial t_1$ e $\mathbf{r}_{t_2} = \partial\mathbf{r}/\partial t_2$. Essas derivadas representam, em cada ponto, os vetores velocidade às curvas t_1 -paramétricas e t_2 -paramétricas, respectivamente. Temos que \mathbf{r}_{t_1} e \mathbf{r}_{t_2} são os geradores do plano tangente à superfície;
- denotamos $\mathbf{v}_1 = \mathbf{r}_{t_1}$ e $\mathbf{v}_2 = \mathbf{r}_{t_2}$. Tomamos o plano normal a superfície através da decomposição QR da matriz $A_{4 \times 2}$, cujas colunas são \mathbf{v}_1 e \mathbf{v}_2 :

$$A = \begin{pmatrix} v_{1x} & v_{2x} \\ v_{1y} & v_{2y} \\ v_{1z} & v_{2z} \\ v_{1w} & v_{2w} \end{pmatrix} = Q_{4 \times 4} R_{4 \times 2}$$

As duas últimas colunas da matriz Q correspondem a base ortogonal desejada, que serão denotadas por \mathbf{u}_1 e \mathbf{u}_2 ;

- calculamos o produto exterior entre u_1 e u_2 , isto é, calculamos $u_1 \wedge u_2 = (u_{1x}u_{2y} - u_{1y}u_{2x}, u_{1x}u_{2z} - u_{1z}u_{2x}, u_{1x}u_{2w} - u_{1w}u_{2x}, u_{1y}u_{2z} - u_{1z}u_{2y}, u_{1y}u_{2w} - u_{1w}u_{2y}, u_{1z}u_{2w} - u_{1w}u_{2z})$. O resultado desse produto é um vetor em um espaço de dimensão 6 e será denotado por \mathbf{n}_1 ;
- calculamos o produto exterior entre os dois autovetores associados aos dois maiores autovalores, isto é, $\mathbf{e}_1 \wedge \mathbf{e}_2 = (e_{1x}e_{2y} - e_{1y}e_{2x}, e_{1x}e_{2z} - e_{1z}e_{2x}, e_{1x}e_{2w} - e_{1w}e_{2x}, e_{1y}e_{2z} - e_{1z}e_{2y}, e_{1y}e_{2w} - e_{1w}e_{2y}, e_{1z}e_{2w} - e_{1w}e_{2z})$, o qual também é um vetor num espaço de dimensão 6 e será denotado por \mathbf{n}_2 ;
- Por fim, o erro de orientação é obtido através do cálculo do ângulo entre \mathbf{n}_1 e \mathbf{n}_2 .

O produto exterior é interpretado geometricamente como a área orientada do paralelogramo gerado por dois vetores. Em três dimensões, uma área orientada é representada pelo produto vetorial entre dois vetores. A área orientada em dimensões maiores pode ser representada por um novo produto anti-simétrico denotado o produto exterior e o valor deste produto será um vetor em um “novo” espaço vetorial, o qual terá $\frac{1}{2}n(n-1)$ componentes e pode ser considerado o “espaço das áreas orientadas”. Para maiores detalhes sobre álgebra exterior e produto exterior, consulte (40) e (80).

N=1500 e viz=5				N=1500 e viz=20			
σ	DE	Erros Orientação(graus)		σ	DE	Erros Orientação(graus)	
		mediana	média			mediana	média
3	53.63%	1.41	2.67	3	89.14%	1.60	1.76
5	54.38%	1.39	2.43	5	90.30%	1.65	1.80
8	54.20%	1.35	2.34	8	91.15%	1.67	1.83
10	54.44%	1.35	2.14	10	91.39%	1.68	1.84
15	54.47%	1.34	2.25	15	91.24%	1.69	1.84
20	54.55%	1.32	2.10	20	91.65%	1.69	1.86
30	52.66%	1.30	2.10	30	91.05%	1.72	1.89
40	52.88%	1.29	2.08	40	91.45%	1.74	1.90

Tabela 4.13: Superfície no \mathbb{R}^4 . Taxa da estimativa correta da dimensionalidade(DE) e erro (em graus) da orientação normal, em função do parâmetro σ e do número de vizinhos (viz).

N=1500 e viz=150				N=1500 e viz=300			
σ	DE	Erros Orientação(graus)		σ	DE	Erros Orientação(graus)	
		mediana	média			mediana	média
3	97.11%	3.82	4.51	3	92.01%	4.05	4.16
5	98.17%	4.15	4.97	5	96.77%	4.28	4.48
8	99.24%	4.25	5.28	8	98.78%	4.47	4.79
10	99.47%	4.4	5.36	10	99.11%	4.35	4.90
15	99.71%	4.42	5.45	15	98.72%	4.58	5.00
20	99.77%	4.41	5.5	20	99.49%	4.57	4.94
30	99.47%	4.53	5.61	30	99.48%	4.76	5.13
40	99.63%	4.42	5.61	40	99.47%	4.74	5.14

Tabela 4.14: Superfície no \mathbb{R}^4 . Taxa da estimativa correta da dimensionalidade(DE) e erro (em graus) da orientação normal, em função do parâmetro σ e do número de vizinhos (viz).

Os resultados exibidos nas tabelas 4.13, 4.14, 4.15, 4.16, confirmam o que já foi verificado para os exemplos anteriores, isto é, a escolha do parâmetro σ não afeta a precisão, desde que se tome um número de vizinhos adequado. Os resultados foram satisfatórios para um amplo alcance de vizinhos tomados.

N=5000 e viz=5				N=5000 e viz=20			
σ	DE	Erros Orientação(graus)		σ	DE	Erros Orientação(graus)	
		mediana	média			mediana	média
3	55.61%	0.84	1.83	3	92.55%	0.85	0.93
5	56.15%	0.83	1.69	5	93.42%	0.85	0.94
8	56.40%	0.81	1.58	8	93.90%	0.86	0.95
10	56.74%	0.80	1.59	10	94.25%	0.87	0.95
15	56.72%	0.79	1.51	15	94.05%	0.87	0.95
20	56.76%	0.78	1.48	20	93.77%	0.87	0.95
30	56.16%	0.76	1.44	30	94.00%	0.87	0.95
40	55.74%	0.75	1.36	40	93.70%	0.88	0.96

Tabela 4.15: Superfície no \mathbb{R}^4 . Taxa da estimativa correta da dimensionalidade(DE) e erro (em graus) da orientação normal, em função do parâmetro σ e do número de vizinhos (viz).

N=5000 e viz=50				N=5000 e viz=500			
σ	DE	Erros Orientação(graus)		σ	DE	Erros Orientação(graus)	
		mediana	média			mediana	média
3	98.46%	1.25	1.32	3	98.75%	3.78	4.42
5	98.78%	1.29	1.37	5	99.69%	4.09	4.97
8	99.04%	1.33	1.41	8	99.92%	4.21	5.23
10	99.05%	1.34	1.43	10	99.73%	4.31	5.34
15	99.05%	1.37	1.45	15	99.99%	4.39	5.44
20	98.85%	1.39	1.47	20	100.00%	4.39	5.48
30	98.86%	1.40	1.48	30	100.00%	4.41	5.57
40	98.98%	1.41	1.50	40	100.00%	4.44	5.6

Tabela 4.16: Superfície no \mathbb{R}^4 . Taxa da estimativa correta da dimensionalidade(DE) e erro (em graus) da orientação normal, em função do parâmetro σ e do número de vizinhos (viz).

4.3.5

Volume no \mathbb{R}^4

Estudaremos uma variedade tridimensional em um espaço 4-dimensional, cuja representação paramétrica é dada por:

$$\begin{aligned} \mathbf{r} : \mathbb{R}^3 &\rightarrow \mathbb{R}^4 \\ (t_1, t_2, t_3) &\rightarrow (\cos(t_1), \text{sen}(t_1) \cos(t_2), \text{sen}(t_1) \text{sen}(t_2) \cos(t_3), \text{sen}(t_1) \text{sen}(t_2) \text{sen}(t_3)), \end{aligned}$$

onde $t_1, t_2 \in [0, \pi]$ e $t_3 \in [0, 2\pi]$.

O exemplo dado é a esfera $\mathbb{S}^4 = \{(x, y, z, w) \in \mathbb{R}^4 | x^2 + y^2 + z^2 + w^2 = 1\}$. A representação é feita por coordenadas hiperesféricas tendo (t_1, t_2, t_3) como parâmetros.

A dimensionalidade correta em cada ponto é obtida quando a máxima diferença nos autovalores do tensor resultante do acúmulo de votos dos dados vizinhos naquele ponto é dada por $\lambda_1 - \lambda_2$. Nesse exemplo temos 1 normal e 3 tangentes. O erro de orientação para cada dado é obtido pelo cálculo do ângulo entre o autovetor associado ao maior autovalor do tensor resultante do acúmulo de votos dos vizinhos no referido ponto e o vetor resultante do produto vetorial entre as derivadas parciais de \mathbf{r} em relação a cada um dos seus 3 parâmetros, calculada no dado ponto. O procedimento é dado do seguinte modo:

- considere $\mathbf{u}_1 = \partial\mathbf{r}/\partial t_1$, $\mathbf{u}_2 = \partial\mathbf{r}/\partial t_2$ e $\mathbf{u}_3 = \partial\mathbf{r}/\partial t_3$;
- calcule o produto vetorial $\mathbf{u}_1 \times \mathbf{u}_2 \times \mathbf{u}_3$. Esse produto vetorial goza das propriedades de um produto exterior de grau 3 e pode ser calculado como um “determinante” simbólico:

$$\mathbf{u}_1 \times \mathbf{u}_2 \times \mathbf{u}_3 = \det \begin{vmatrix} u_{1x} & u_{2x} & u_{3x} & \mathbf{e}_1 \\ u_{1y} & u_{2y} & u_{3y} & \mathbf{e}_2 \\ u_{1z} & u_{2z} & u_{3z} & \mathbf{e}_3 \\ u_{1w} & u_{2w} & u_{3w} & \mathbf{e}_4 \end{vmatrix} \quad (4-7)$$

que deve ser desenvolvido ao longo da última coluna, onde $(\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3, \mathbf{e}_4)$ representa a base canônica no \mathbb{R}^4 .

- seja $\mathbf{v} \in \mathbb{R}^4$ o vetor resultante do cálculo do produto vetorial. Este vetor é ortogonal ao subespaço gerado por $\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \mathbf{u}_3$;
- pode-se verificar o erro de orientação obtido calculando-se o ângulo entre o autovetor associado ao maior autovalor do tensor resultante do acúmulo de votos dos vizinhos e o vetor resultante do cálculo do produto vetorial em 4-7.

Deve-se tomar um número de vizinhos que possa capturar a estrutura da variedade e tal número deve escolhido observando-se tanto o número de dados gerados quanto o número de variáveis dos dados. Como mostram as tabelas 4.17, 4.18, 4.19, 4.20, a escolha do parâmetro σ não afeta a precisão, uma vez que se fez uma escolha adequada do número de vizinhos. Quando tomamos um número pequeno de dados, como $N = 1500$, uma vizinhança muito pequena como $viz = 5$, não apresenta resultados satisfatórios, pois um número muito pequeno de vizinhos não é suficiente para capturar a estrutura da variedade. Mesmo ao considerarmos uma vizinhança maior como $viz = 15$, ainda assim não conseguimos capturar a curvatura da variedade e obtemos estimativas ruins quanto a orientação das normais. Quando tomamos $viz = 30$, a média dos erros de orientação é ainda maior. No entanto, se adotamos $N = 5000$,

N=1500 e viz=5				N=1500 e viz=15			
σ	DE	Erros Orientação(graus)		σ	DE	Erros Orientação(graus)	
		mediana	média			mediana	média
3	18.79%	27.92	33.77	3	43.84%	7.06	11.97
5	19.15%	24.37	30.45	5	48.65%	6.81	10.62
8	19.02%	40.38	42.14	8	51.38%	6.82	10.20
10	18.72%	40.91	41.66	10	52.13%	6.94	10.11
15	18.17%	38.92	40.58	15	52.62%	6.83	9.85
20	18.24%	32.63	37.25	20	51.71%	6.97	9.93
30	17.57%	40.88	42.03	30	51.24%	7.05	9.94
40	16.90%	30.82	34.27	40	50.63%	7.11	9.97

Tabela 4.17: Volume no \mathbb{R}^4 . Taxa da estimativa correta da dimensionalidade(DE) e erro (em graus) da orientação normal, em função do parâmetro σ e do número de vizinhos (viz).

N=1500 e viz=30			
σ	DE	Erros Orientação(graus)	
		mediana	média
3	45.29%	9.97	15.92
5	52.94%	9.51	13.63
8	59.57%	9.23	12.53
10	60.58%	9.33	12.25
15	61.19%	9.20	12.05
20	61.74%	9.40	12.02
30	61.42%	9.55	12.09
40	61.31%	9.78	12.28

Tabela 4.18: Volume no \mathbb{R}^4 . Taxa da estimativa correta da dimensionalidade (DE) e erro (em graus) da orientação normal, em função do parâmetro σ e do número de vizinhos (viz).

obtemos estimativas melhores, ainda que, devemos atentar para o número de vizinhos a ser escolhido.

N=5000 e viz=5				N=5000 e viz=15			
σ	DE	Erros Orientação(graos)		σ	DE	Erros Orientação(graos)	
		mediana	média			mediana	média
3	22.97%	45.17	45.31	3	59.10%	4.27	6.91
5	22.87%	44.10	44.67	5	62.85%	4.27	6.37
8	23.03%	46.40	46.47	8	65.49%	4.23	6.01
10	22.40%	40.39	42.04	10	65.97%	4.21	5.92
15	22.31%	45.98	45.83	15	67.05%	4.24	5.86
20	22.07%	44.96	45.04	20	66.79%	4.27	5.86
30	21.23%	45.11	45.19	30	66.22%	4.33	5.85
40	20.77%	44.70	44.72	40	65.28%	4.37	5.87

Tabela 4.19: Volume no \mathbb{R}^4 . Taxa da estimativa correta da dimensionalidade(DE) e erro (em graus) da orientação normal, em função do parâmetro σ e do número de vizinhos (viz).

N=5000 e viz=20				N=5000 e viz=50			
σ	DE	Erros Orientação(graos)		σ	DE	Erros Orientação(graos)	
		mediana	média			mediana	média
3	65.12%	4.80	7.42	3	68.40%	8.72	13.37
5	69.89%	4.76	6.77	5	77.48%	8.53	11.33
8	73.61%	4.86	6.45	8	81.81%	8.48	10.52
10	74.21%	4.83	6.42	10	83.57%	8.52	10.32
15	75.11%	4.85	6.32	15	84.29%	8.56	10.15
20	75.13%	4.89	6.31	20	85.26%	8.61	10.09
30	74.35%	4.93	6.33	30	85.55%	8.63	10.06
40	74.71%	5.00	6.40	40	85.99%	8.65	10.04

Tabela 4.20: Volume no \mathbb{R}^4 . Taxa da estimativa correta da dimensionalidade(DE) e erro (em graus) da orientação normal, em função do parâmetro σ e do número de vizinhos (viz).