T3.1 Análisis discriminante lineal

Índice

1 Clasificadores generativos vs discriminativos

1.1 Caracterización

Clasificador generativo: expresa **posteriors** en función de **priors** y **densidades condicionales** de las clases, las cuales puede muestrearse para **generar** datos sintéticos

$$p(y=c\mid\boldsymbol{x};\boldsymbol{\theta})=\frac{p(\boldsymbol{x}\mid y=c;\boldsymbol{\theta})\,p(y=c;\boldsymbol{\theta})}{\sum_{c'}p(\boldsymbol{x}\mid y=c';\boldsymbol{\theta})\,p(y=c';\boldsymbol{\theta})}\propto p(\boldsymbol{x}\mid y=c;\boldsymbol{\theta})\,p(y=c;\boldsymbol{\theta})$$

Clasificador discriminativo: modela **posteriors** directamente, sin necesidad de conocer priors y densidades condicionales,

$$p(y=c\mid\boldsymbol{x};\boldsymbol{\theta})=\cdots$$

1.2 Ejemplos

In [1]:

```
import numpy as np
from scipy.stats import multinomial, multivariate_normal
import matplotlib.pyplot as plt
```

1.2.1 Ejemplo de clasificador generativo

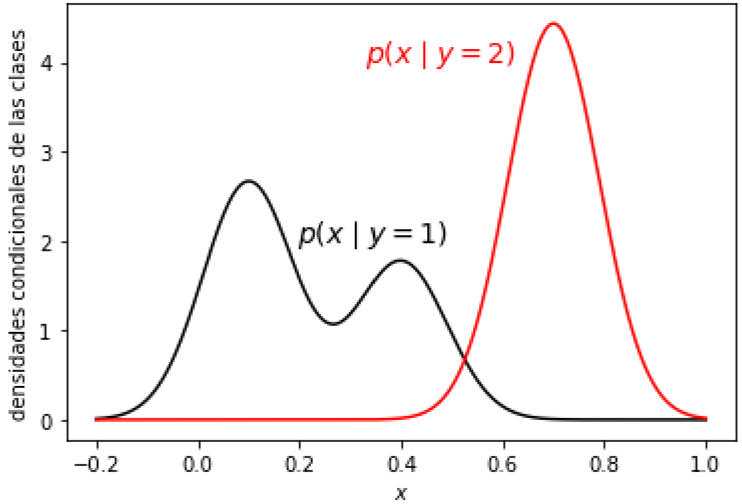
Sean $C=2,\;x\in[0,1]$ y los priors y condicionales siguientes:

$$\begin{aligned}p(y=1)=p(y=2)&=0.5 && \text{(clases equiprobables)}\\ p(x\mid y=1)&=0.6\,\mathcal{N}(\mu=0.1,\sigma=0.09)+0.4\,\mathcal{N}(\mu=0.4,\sigma=0.09) && \text{(mixtura de dos normales)}\\ p(x\mid y=2)&=\mathcal{N}(\mu=0.7,\sigma=0.09) && \text{(normal)}\end{aligned}$$

In [2]:

```
X = np.arange(-0.200, 1.001, 0.001)
def p1(x): return 0.6 * multivariate_normal.pdf(x, 0.1, 0.09**2) + 0.4 * multivariate_normal.pdf(x, 0.4, 0.09**2
def p2(x): return multivariate_normal.pdf(x, 0.7, 0.09**2)
plt.plot(X, p1(X), '-k', X, p2(X), '-r')
plt.xlabel('$x$')
plt.ylabel('densidades condicionales de las clases')
```

```
plt.annotate('$p(x\mid y=1)$', (0.196, 2), fontsize=14)
plt.annotate('$p(x\mid y=2)$', (0.33, 4), fontsize=14, color='red')
plt.show()
```



Generación de datos sintéticos de acuerdo con la distribución conjunta:

$$\begin{aligned}
p(x,y) &= p(y)\,p(x \mid y) && \text{(primero generamos } y \text{ y luego } x \text{ dado } y\text{)} \\
p(y) &= \mathrm{Cat}(0.5, 0.5) && (y \text{ se genera simulando una categórica}) \\
p(x \mid y=2) &= \mathcal{N}(0.7, 0.09^2) && (\text{si } y=2,\ x \text{ es es un número aleatorio normal})
\end{aligned}$$

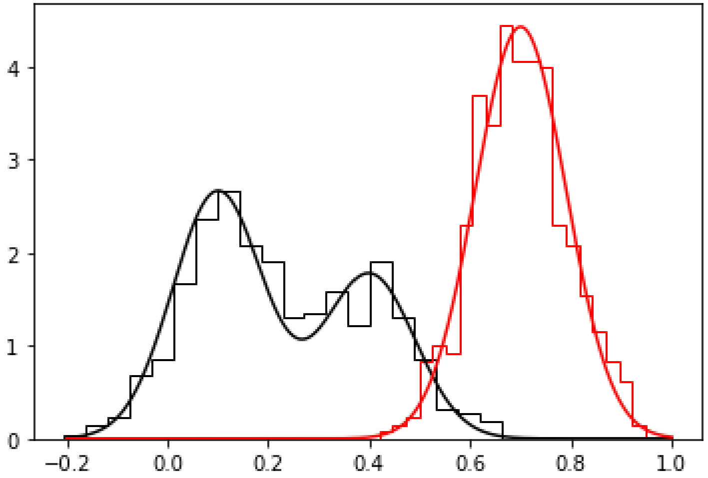
La condicional de la clase 1 puede expresarse en términos de una etiqueta de subclase "perdida", $z \in \{1,2\}$:

$$\begin{aligned}
p(x \mid y=1) &= p(x, z=1 \mid y=1) + p(x, z=2 \mid y=1) \\
&= p(z=1 \mid y=1)\,p(x \mid y=1, z=1) + p(z=2 \mid y=1)\,p(x \mid y=1, z=2) \\
p(z \mid y=1) &= \mathrm{Cat}(0.6, 0.4) \\
p(x \mid y=1, z=1) &= \mathcal{N}(0.1, 0.09^2) \\
p(x \mid y=1, z=2) &= \mathcal{N}(0.4, 0.09^2)
\end{aligned}$$

In [3]:

```
N = 1000
yy = multinomial(1, [0.5, 0.5]).rvs(N)
N1 = yy[yy[:, 0] == 1].shape[0]
zz_y1 = multinomial(1, [0.6, 0.4]).rvs(N1)
N1_y1 = zz_y1[zz_y1[:, 0] == 1].shape[0]
xx_y1_z1 = multivariate_normal(0.1, 0.09**2).rvs(N1_y1)
xx_y1_z2 = multivariate_normal(0.4, 0.09**2).rvs(N1 - N1_y1)
xx_y2 = multivariate_normal(0.7, 0.09**2).rvs(N - N1)
```

```
plt.hist(np.hstack((xx_y1_21, xx_y1_22)), bins=20, density=True, histtype='step', ec='black')
plt.hist(np.hstack((xx_y2)), bins=20, density=True, histtype='step', ec="red")
plt.plot(X, p1(X), '-k', X, p2(X), '-r');
```



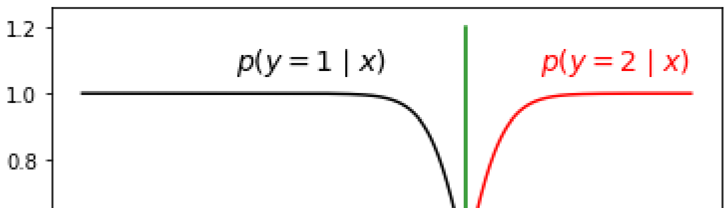
1.2.2 Ejemplo de clasificador discriminativo

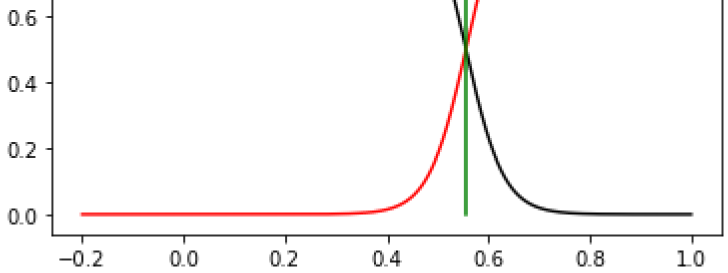
Seguimos con $C = 2$ y $x \in [0, 1]$, pero no conocemos priors ni densidades condicionales; no obstante, tenemos modelos sencillos de posteriors que producen las mismas regiones y frontera que el ejemplo generativo:

$$p(y = 1 \mid \boldsymbol{x}) = \frac{1}{1 + \exp(27x - 15)}$$
$$p(y = 2 \mid \boldsymbol{x}) = \frac{1}{1 + \exp(-27x + 15)}$$

In [4]:

```
def p1(x): return 1/(1 + np.exp((27*x-15)))
def p2(x): return 1/(1 + np.exp((-27*x+15)))
plt.plot(X, p1(X), '-k')
plt.plot(X, p2(X), '-r')
plt.plot([0.556, 0.556], [0, 1.2], '-g')
plt.annotate('$p(y=1\mid x)$', (0.1, 1.07), fontsize=14)
plt.annotate('$p(y=2\mid x)$', (0.7, 1.07), fontsize=14, color='red');
```





1.3 Ventajas de los clasificadores discriminativos

Mejor precisión predictiva: $p(y \mid \boldsymbol{x})$ suele ser más fácil de aprender y no deben "malgastar esfuerzos" modelando densidades condicionales

Facilitan el preproceso de características: Por ejemplo, mediante expansión polinómica del vector de características, cosa complicada de hacer con generativos pues las nuevas características pueden exhibir correlaciones complejas difíciles de modelar

Probabilidades bien calibradas: Algunos generativos, por ejemplo naive Bayes, se basan en asunciones poco realistas que suelen conducir a posteriors extremas; sin embargo, los discriminativos, por ejemplo regresión logística, suelen estar mejor calibrados en términos de estimación de posteriors

1.4 Ventajas de los clasificadores generativos

Fáciles de ajustar: Se suelen ajustarmediante conteo y promediado; en contraste, regresión logística requiere resolver un problema de optimización convexo, y las redes neuronales uno no convexo, lo que se traduce en procesos computacionalmente muy costosos

Facilitan el tratamiento de datos perdidos: Gracias al modelado de condicionales, cosa que en los discriminativos no es posible

Pueden ajustar clases separadamente: Por lo general es así, lo que permite añadir nuevas clases sin reentrenar las demás

Aprovechamiento de datos de entrenamiento no etiquetados: Para aprendizaje semi-supervisado (difícil con discriminativos)

Robustez frente a características espúrias (degeneradas): Gracias a que capturan los mecanismos causales del proceso generativo subyacente

2 Análisis discriminante Gaussiano

2.1 Asunción Gaussiana

Análisis discriminante Gaussiano (GDA): clasificador generativo de densidades condicionales Gaussianas

$$p(y=c\mid\boldsymbol{x},\boldsymbol{\theta})\propto p(y=c,\boldsymbol{\theta})\,p(\boldsymbol{x}\mid y=c,\boldsymbol{\theta})=\pi_c\mathcal{N}_D(\boldsymbol{\mu}_c,\boldsymbol{\Sigma}_c)$$

2.2 Análisis discriminante cuadrático (QDA)

Función discriminante (en GDA): log-posterior de la clase vista como función de la entrada $\boldsymbol{x}$

$$\log p(y=c\mid\boldsymbol{x},\boldsymbol{\theta})\propto\log\pi_c+\log\mathcal{N}_D(\boldsymbol{\mu}_c,\boldsymbol{\Sigma}_c)=\log\pi_c-\frac{D}{2}\log(2\pi)-\frac{1}{2}\log|\boldsymbol{\Sigma}_c|-\frac{1}{2}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu}_c)^t\boldsymbol{\Sigma}_c^{-1}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu}_c)$$

Análisis discriminante cuadrático (QDA): GDA expresado en términos de discriminantes; cuadráticas con $\boldsymbol{x}$

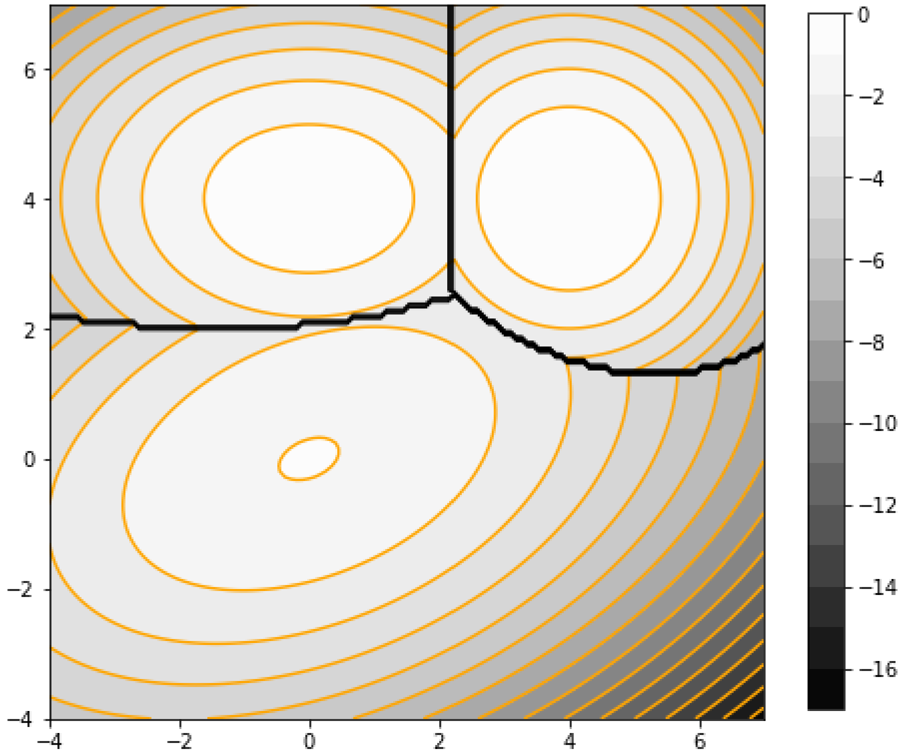
$$\begin{aligned}
\log p(y=c\mid\boldsymbol{x},\boldsymbol{\theta})&\propto\boldsymbol{x}^t\mathbf{A}_c\boldsymbol{x}+\boldsymbol{\beta}_c^t\boldsymbol{x}+\gamma_c+\kappa\\
\mathbf{A}_c&=-\frac{1}{2}\boldsymbol{\Sigma}_c^{-1}\\
\boldsymbol{\beta}_c&=\boldsymbol{\Sigma}_c^{-1}\boldsymbol{\mu}_c\\
\gamma_c&=\log\pi_c-\frac{1}{2}\log|\boldsymbol{\Sigma}_c|-\frac{1}{2}\boldsymbol{\mu}_c^t\boldsymbol{\Sigma}_c^{-1}\boldsymbol{\mu}_c\\
\kappa&=-\frac{D}{2}\log(2\pi)\quad\text{(puede ignorarse porque no depende de }c\text{)}
\end{aligned}$$

Ejemplo: $C=3,\;D=2,\;\pi_1=\pi_2=\pi_3=1/3$ (podemos ignorar $\log\pi_c$ en γ_c)

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{\mu}_1&=(0,0)^t & \boldsymbol{\mu}_2&=(0,4)^t & \boldsymbol{\mu}_3&=(4,4)^t\\
\boldsymbol{\Sigma}_1&=\begin{pmatrix}4&1\\1&2\end{pmatrix} & \boldsymbol{\Sigma}_2&=\begin{pmatrix}2&0\\0&1\end{pmatrix} & \boldsymbol{\Sigma}_3&=\begin{pmatrix}1&0\\0&1\end{pmatrix}\\
\boldsymbol{\Sigma}_1^{-1}&=\begin{pmatrix}2/7&-1/7\\-1/7&4/7\end{pmatrix} & \boldsymbol{\Sigma}_2^{-1}&=\begin{pmatrix}1/2&0\\0&1\end{pmatrix} & \boldsymbol{\Sigma}_3^{-1}&=\begin{pmatrix}1&0\\0&1\end{pmatrix}\\
\mathbf{A}_1&=\begin{pmatrix}-1/7&1/14\\1/14&-2/7\end{pmatrix} & \mathbf{A}_2&=\begin{pmatrix}-1/4&0\\0&-1/2\end{pmatrix} & \mathbf{A}_3&=\begin{pmatrix}-1/2&0\\0&-1/2\end{pmatrix}\\
\boldsymbol{\beta}_1&=(0,0)^t & \boldsymbol{\beta}_2&=(0,4)^t & \boldsymbol{\beta}_3&=(4,4)^t\\
\gamma_1&=-\frac{1}{2}\log 7=-0.973 & \gamma_2&=-\frac{1}{2}\log 2-8=-8.3466 & \gamma_3&=-16
\end{aligned}$$

In [1]:

```
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
A1, b1, c1 = np.array([ [-1/7, 1/14], [1/14,  -2/7] ]), np.array([0, 0]), -0.973
A2, b2, c2 = np.array([ [-1/4,    0], [   0,  -1/2] ]), np.array([0, 4]), -8.3466
A3, b3, c3 = np.array([ [-1/2,    0], [   0,  -1/2] ]), np.array([4, 4]), -16
x1, x2 = np.meshgrid(np.linspace(-4, 7, num=128), np.linspace(-4, 7, num=128))
x = np.c_[np.ravel(x1), np.ravel(x2)]
p1 =  lambda x: x.T @ A1 @ x + b1 @ x + c1
p2 =  lambda x: x.T @ A2 @ x + b2 @ x + c2
p3 =  lambda x: x.T @ A3 @ x + b3 @ x + c3
maxp = lambda x: max(p1(x), p2(x), p3(x))
maxpx = np.apply_along_axis(maxp, 1, x)
amaxp = lambda x: np.argmax([p1(x), p2(x), p3(x)])
amaxpx = np.apply_along_axis(amaxp, 1, x)
fig, ax = plt.subplots(1, 1, figsize=(8, 8))
ax.set(aspect='equal')
ax.contour(x1, x2, maxpx.reshape(x1.shape), 16, colors='orange', linestyles='solid')
cp = ax.contourf(x1, x2, maxpx.reshape(x1.shape), 16, cmap='Greys_r')
ax.contour(x1, x2, amaxpx.reshape(x1.shape), colors='black', linestyles='solid', linewidths=1)
plt.colorbar(cp, ax=ax, shrink=0.8);
```



2.3 Análisis discriminante lineal (LDA)

Análisis discriminante lineal (LDA): GDA con Gaussianas de **matriz de covarianza común,** $\boldsymbol{\Sigma}_c = \boldsymbol{\Sigma}$

$$\log p(y = c \mid \boldsymbol{x}, \boldsymbol{\theta}) \propto \log \pi_c + \log \mathcal{N}_D(\boldsymbol{\mu}_c, \boldsymbol{\Sigma})$$

Discriminantes lineales con $\boldsymbol{x}$: al igual que κ, el término cuadrático puede ignorarse porque no depende de c

$$\begin{aligned}
\log p(y = c \mid \boldsymbol{x}, \boldsymbol{\theta}) &\propto \log \pi_c - \frac{D}{2}\log(2\pi) - \frac{1}{2}\log|\boldsymbol{\Sigma}| - \frac{1}{2}(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{\mu}_c)^t \boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{\mu}_c) \\
&= \boldsymbol{x}^t \mathbf{A} \boldsymbol{x} + \boldsymbol{\beta}_c^t \boldsymbol{x} + \gamma_c + \kappa \\
\mathbf{A} &= -\frac{1}{2}\boldsymbol{\Sigma}^{-1} \\
\boldsymbol{\beta}_c &= \boldsymbol{\Sigma}^{-1}\boldsymbol{\mu}_c \\
\gamma_c &= \log \pi_c - \frac{1}{2}\boldsymbol{\mu}_c^t \boldsymbol{\Sigma}^{-1}\boldsymbol{\mu}_c \\
\kappa &= -\frac{D}{2}\log(2\pi) - \frac{1}{2}\log|\boldsymbol{\Sigma}|
\end{aligned}$$

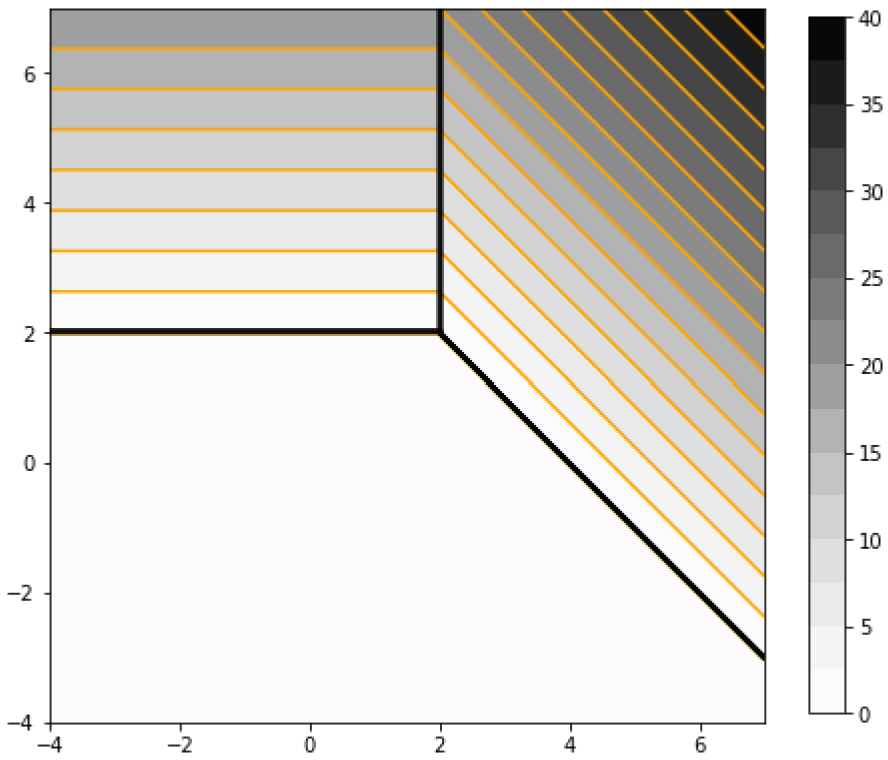
Ejemplo: $C = 3,\ D = 2,\ \pi_1 = \pi_2 = \pi_3 = 1/3$ (podemos ignorar $\log \pi_c$ en γ_c)

$$\begin{array}{lll}
\boldsymbol{\mu}_1 = (0, 0)^t & \boldsymbol{\mu}_2 = (0, 4)^t & \boldsymbol{\mu}_3 = (4, 4)^t \\
\boldsymbol{\Sigma} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} & \boldsymbol{\Sigma}^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} & \\
\boldsymbol{\beta}_1 = (0, 0)^t & \boldsymbol{\beta}_2 = (0, 4)^t & \boldsymbol{\beta}_3 = (4, 4)^t \\
\gamma_1 = 0 & \gamma_2 = -8 & \gamma_3 = -16
\end{array}$$

In [1]:

```
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
b1, c1 = np.array([0, 0]), 0
b2, c2 = np.array([0, 4]), -8
b3, c3 = np.array([4, 4]), -16
x1, x2 = np.meshgrid(np.linspace(-4, 7, num=128), np.linspace(-4, 7, num=128))
x = np.c_[np.ravel(x1), np.ravel(x2)]
p1 =  lambda x: b1 @ x + c1
p2 =  lambda x: b2 @ x + c2
p3 =  lambda x: b3 @ x + c3
maxp = lambda x: max(p1(x), p2(x), p3(x))
maxpx = np.apply_along_axis(maxp, 1, x)
amaxp = lambda x: np.argmax([p1(x), p2(x), p3(x)])
amaxpx = np.apply_along_axis(amaxp, 1, x)
fig, ax = plt.subplots(1, 1, figsize=(8, 8))
ax.set(aspect='equal')
```

```
ax.contour(x1, x2, maxpx.reshape(x1.shape), 16, colors='orange', linestyles='solid')
cp = ax.contourf(x1, x2, maxpx.reshape(x1.shape), 16, cmap='Greys')
ax.contour(x1, x2, amaxpx.reshape(x1.shape), colors='black', linestyles='solid', linewidths=1)
plt.colorbar(cp, ax=ax, shrink=0.8);
```

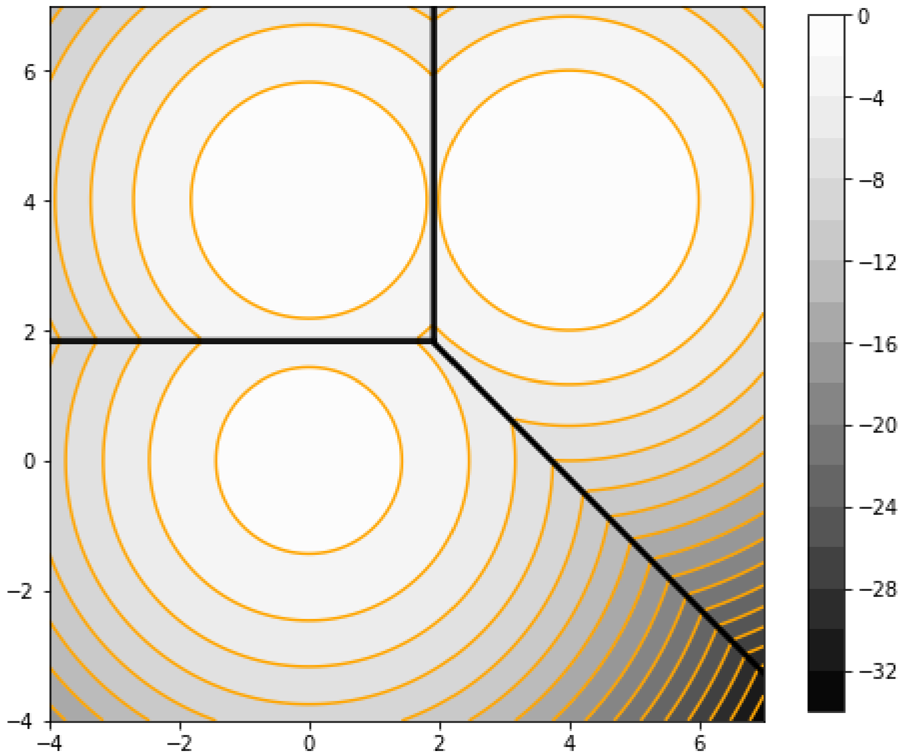


Los conjuntos de nivel típicos de las Gaussianas pueden obtenerse añadiendo el término cuadrático común a las discriminantes, si bien el mismo es irrelevante a efectos de regiones y fronteras de decisión:

In [2]:

```
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
A1, b1, c1 = np.array([ [-1/2,    0], [   0,  -1/2] ]), np.array([0, 0]), -0.973
A2, b2, c2 = np.array([ [-1/2,    0], [   0,  -1/2] ]), np.array([0, 4]), -8.3466
A3, b3, c3 = np.array([ [-1/2,    0], [   0,  -1/2] ]), np.array([4, 4]), -16
x1, x2 = np.meshgrid(np.linspace(-4, 7, num=128), np.linspace(-4, 7, num=128))
x = np.c_[np.ravel(x1), np.ravel(x2)]
p1 =  lambda x: x.T @ A1 @ x + b1 @ x + c1
p2 =  lambda x: x.T @ A2 @ x + b2 @ x + c2
p3 =  lambda x: x.T @ A3 @ x + b3 @ x + c3
maxp = lambda x: max(p1(x), p2(x), p3(x))
maxpx = np.apply_along_axis(maxp, 1, x)
amaxp = lambda x: np.argmax([p1(x), p2(x), p3(x)])
amaxpx = np.apply_along_axis(amaxp, 1, x)
fig, ax = plt.subplots(1, 1, figsize=(8, 8))
```

```
fig, ax = plt.subplots(1, 1, figsize=(8, 8))
ax.set(aspect='equal')
ax.contour(x1, x2, maxpx.reshape(x1.shape), 16, colors='orange', linestyles='solid')
cp = ax.contourf(x1, x2, maxpx.reshape(x1.shape), 16, cmap='Greys_r')
ax.contour(x1, x2, amaxpx.reshape(x1.shape), colors='black', linestyles='solid', linewidths=1)
plt.colorbar(cp, ax=ax, shrink=0.8);
```



2.4 Ajuste del modelo

2.4.1 Ajuste de modelos generativos con la conjunta

Parámetros: $\boldsymbol{\theta}=(\boldsymbol{\pi},\boldsymbol{\theta}'),$ donde $\boldsymbol{\pi}$ son las priors de las clases y $\boldsymbol{\theta}'$ los parámetros que gobiernan las condicionales de las clases

Función de probabilidad a priori de las etiquetas de clase: categórica gobernada por $\boldsymbol{\pi}$

$$p(y\mid\boldsymbol{\pi})=\operatorname{Cat}(y\mid\boldsymbol{\pi})=\prod_c \pi_c^{\mathbb{I}(y=c)}$$

Función de verosimilitud conjunta: de $\boldsymbol{\theta}$ respecto a N datos, $\mathcal{D}=\{(\boldsymbol{x}_n,y_n)\}$

$$p(\mathcal{D}\mid\boldsymbol{\theta})=\prod_n p(\boldsymbol{x}_n,y_n\mid\boldsymbol{\theta})\qquad\text{(muestras i.i.d.)}$$

$$\begin{aligned}
p(\mathcal{D} \mid \boldsymbol{\theta}) &= \prod_n p(\boldsymbol{x}_n, y_n \mid \boldsymbol{\theta}) && \text{(muestras i.i.d.)}\\
&= \prod_n p(y_n \mid \boldsymbol{\pi})\, p(\boldsymbol{x}_n \mid y_n, \boldsymbol{\theta}') && \text{(regla producto)}\\
&= \prod_n \prod_c (p(y_n = c \mid \boldsymbol{\pi})\, p(\boldsymbol{x}_n \mid y_n = c, \boldsymbol{\theta}'))^{\mathbb{I}(y_n=c)} && \text{(explicitando } c\text{)}\\
&= \prod_c \prod_n \pi_c^{\mathbb{I}(y_n=c)} \prod_c \prod_n p(\boldsymbol{x}_n \mid y_n = c, \boldsymbol{\theta}')^{\mathbb{I}(y_n=c)} && \text{(reodenando factores)}
\end{aligned}$$

Función de log-verosimilitud conjunta: sea $N_c = \sum_n \mathbb{I}(y_n = c)$

$$\begin{aligned}
\log p(\mathcal{D} \mid \boldsymbol{\theta}) &= \left[\sum_c \sum_n \mathbb{I}(y_n = c) \log \pi_c\right] + \left[\sum_c \sum_n \mathbb{I}(y_n = c) \log p(\boldsymbol{x}_n \mid y_n = c, \boldsymbol{\theta}')\right]\\
&= \sum_c N_c \log \pi_c + \sum_c \sum_{n:y_n=c} \log p(\boldsymbol{x}_n \mid y_n = c, \boldsymbol{\theta}')
\end{aligned}$$

Maximización: el MLE de la conjunta, $\hat{\boldsymbol{\theta}} = (\hat{\boldsymbol{\pi}}, \hat{\boldsymbol{\theta}}')$, puede hallarse mediante maximización separada en $\boldsymbol{\pi}$ y $\boldsymbol{\theta}'$ (con restricciones)

$$\hat{\boldsymbol{\theta}} = \operatorname*{argmax}_{\boldsymbol{\theta}} \; \log p(\mathcal{D} \mid \boldsymbol{\theta}) \quad \Leftrightarrow \quad \hat{\boldsymbol{\pi}} = \operatorname*{argmax}_{\boldsymbol{\pi} \in \mathcal{C}_{\boldsymbol{\pi}}} \sum_c N_c \log \pi_c \quad \text{y} \quad \hat{\boldsymbol{\theta}}' = \operatorname*{argmax}_{\boldsymbol{\theta}' \in \mathcal{C}_{\boldsymbol{\theta}'}} \sum_c \sum_{n:y_n=c} \log p(\boldsymbol{x}_n \mid y_n = c, \boldsymbol{\theta}')$$

Maximización en $\boldsymbol{\pi}$: sujeta a las restricciones de probabilidad; introducimos un multiplicador de Lagrange para la de igualdad (suma 1)

$$\hat{\boldsymbol{\pi}} = \operatorname*{argmax}_{\boldsymbol{\pi}} \; \max_{\lambda} \; \sum_c N_c \log \pi_c + \lambda \left(\left(\sum_c \pi_c \right) - 1 \right) \quad \Rightarrow \quad \hat{\pi}_c = \frac{N_c}{N}$$

2.4.2 Análisis discriminante cuadrático (QDA)

Log-verosimilitud conjunta: $\boldsymbol{\theta}' = \{\boldsymbol{\theta}_c\}$, $\boldsymbol{\theta}_c = (\boldsymbol{\mu}_c^t, \operatorname{vec}(\boldsymbol{\Sigma}_c))^t$

$$\log p(\mathcal{D} \mid \boldsymbol{\theta}) = \sum_c N_c \log \pi_c + \sum_c \sum_{n:y_n=c} \log \mathcal{N}(\boldsymbol{x}_n \mid \boldsymbol{\mu}_c, \boldsymbol{\Sigma}_c)$$

Maximización en $\boldsymbol{\theta}'$: $\hat{\boldsymbol{\theta}}'$ puede hallarse mediante maximización separada en cada $\boldsymbol{\theta}_c$ (con restricciones)

$$\hat{\boldsymbol{\theta}}' = \operatorname*{argmax}_{\boldsymbol{\theta}' \in \mathcal{C}_{\boldsymbol{\theta}'}} \sum_c \sum_{n:y_n=c} \log \mathcal{N}(\boldsymbol{x}_n \mid \boldsymbol{\mu}_c, \boldsymbol{\Sigma}_c) \quad \Leftrightarrow \quad \hat{\boldsymbol{\theta}}_c = \operatorname*{argmax}_{\boldsymbol{\theta}_c \in \mathcal{C}_{\boldsymbol{\theta}_c}} \sum_{n:y_n=c} \log \mathcal{N}(\boldsymbol{x}_n \mid \boldsymbol{\mu}_c, \boldsymbol{\Sigma}_c) \quad \text{para todo } c$$

Maximización en $\boldsymbol{\theta}_c'$: $\hat{\boldsymbol{\mu}}_c$ y $\hat{\boldsymbol{\Sigma}}_c$ se hallan a partir de los datos de la clase c como si se tratara del MLE de una única Gaussiana

$$\hat{\boldsymbol{\mu}}_c = \frac{1}{N_c} \sum_{n:y_n=c} \boldsymbol{x}_n$$

$$\hat{\boldsymbol{\Sigma}}_c = \frac{1}{N_c} \sum_{n:y_n=c} (\boldsymbol{x}_n - \hat{\boldsymbol{\mu}}_c)(\boldsymbol{x}_n - \hat{\boldsymbol{\mu}}_c)^t$$

Ejemplo: $C = 3,\ D = 2,\ \pi_1 = \pi_2 = \pi_3 = 1/3$

$$\boldsymbol{\mu}_1 = (0,0)^t \qquad \boldsymbol{\mu}_2 = (0,4)^t \qquad \boldsymbol{\mu}_3 = (4,4)^t$$
$$\boldsymbol{\Sigma}_1 = \begin{pmatrix} 4 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix} \qquad \boldsymbol{\Sigma}_2 = \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \qquad \boldsymbol{\Sigma}_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

In [1]:

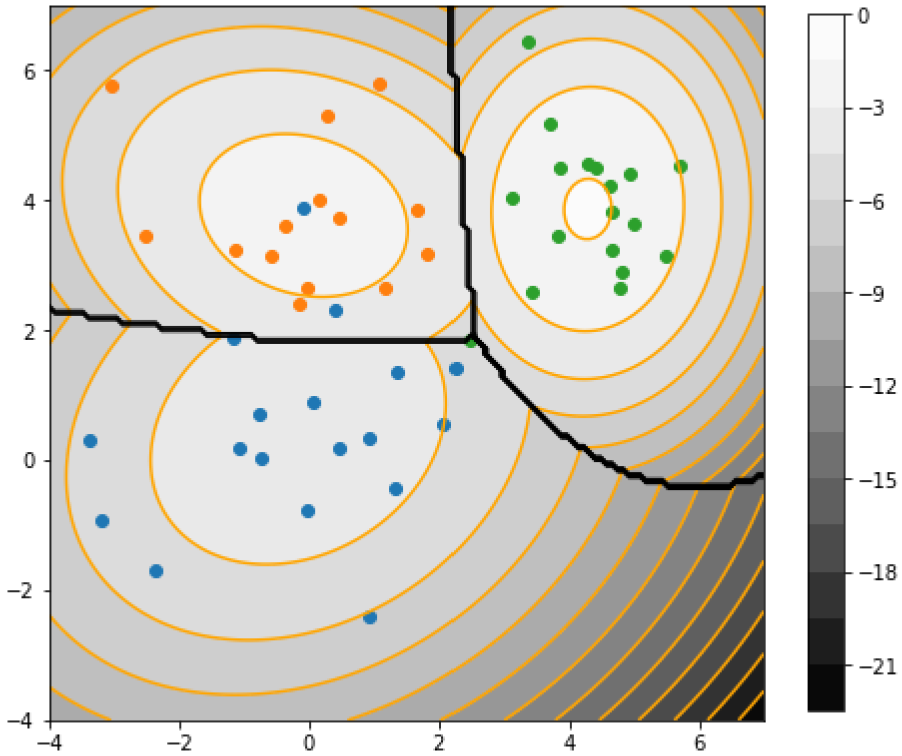
```
import numpy as np
from scipy.stats import multinomial, multivariate_normal
import matplotlib.pyplot as plt
N = 50 # >=3 para tener al menos un dato por clase; >>3 para evitar matrices singulares
pi1 = pi2 = pi3 = 1/3
yy = multinomial(1, [pi1, pi2, pi3]).rvs(N - 3)
N1 = yy[yy[:, 0] == 1].shape[0] + 1
N2 = yy[yy[:, 1] == 1].shape[0] + 1
N3 = N - N1 - N2
hpi1 = N1/N; hpi2 = N2/N; hpi3 = N3/N
xxy1 = multivariate_normal([0, 0], [[4, 1], [1, 2]]).rvs(N1)
m1 = xxy1.mean(axis=0); S1 = np.cov(xxy1, rowvar=False, bias=True); iS1 = np.linalg.inv(S1)
xxy2 = multivariate_normal([0, 4], [[2, 0], [0, 1]]).rvs(N2)
m2 = xxy2.mean(axis=0); S2 = np.cov(xxy2, rowvar=False, bias=True); iS2 = np.linalg.inv(S2)
xxy3 = multivariate_normal([4, 4], np.eye(2)).rvs(N3)
m3 = xxy3.mean(axis=0); S3 = np.cov(xxy3, rowvar=False, bias=True); iS3 = np.linalg.inv(S3)
print("Medias: ", m1, m2, m3, "\nSigmas:\n", S1, "\n", S2, "\n", S3)
```

```
Medias:  [-0.16352967  0.43030524] [-0.08028066  3.7620914 ] [4.28623431 3.86015475]
Sigmas:
 [[2.53607629 0.48662071]
 [0.48662071 2.03151431]]
 [[ 1.87691974 -0.25945071]
 [-0.25945071  1.14489211]]
 [[0.6879304  0.02505737]
 [0.02505737 1.10500998]]
```

In [2]:

```
A1, b1, c1 = -0.5 * iS1, iS1 @ m1, np.log(hpi1) - 0.5 * np.linalg.det(S1) - 0.5 * m1.T @ iS1 @ m1
A2, b2, c2 = -0.5 * iS2, iS2 @ m2, np.log(hpi2) - 0.5 * np.linalg.det(S2) - 0.5 * m2.T @ iS2 @ m2
A3, b3, c3 = -0.5 * iS3, iS3 @ m3, np.log(hpi3) - 0.5 * np.linalg.det(S3) - 0.5 * m3.T @ iS3 @ m3
x1, x2 = np.meshgrid(np.linspace(-4, 7, num=128), np.linspace(-4, 7, num=128))
x = np.c_[np.ravel(x1), np.ravel(x2)]
```

```
p1 =  lambda x: x.T @ A1 @ x + b1 @ x + c1
p2 =  lambda x: x.T @ A2 @ x + b2 @ x + c2
p3 =  lambda x: x.T @ A3 @ x + b3 @ x + c3
maxp = lambda x: max(p1(x), p2(x), p3(x))
maxpx = np.apply_along_axis(maxp, 1, x)
amaxp = lambda x: np.argmax([p1(x), p2(x), p3(x)])
amaxpx = np.apply_along_axis(amaxp, 1, x)
fig, ax = plt.subplots(1, 1, figsize=(8, 8))
ax.set(aspect='equal')
ax.contour(x1, x2, maxpx.reshape(x1.shape), 16, colors='orange', linestyles='solid')
cp = ax.contourf(x1, x2, maxpx.reshape(x1.shape), 16, cmap='Greys_r')
ax.contour(x1, x2, amaxpx.reshape(x1.shape), colors='black', linestyles='solid', linewidths=1)
plt.colorbar(cp, ax=ax, shrink=0.8)
ax.set_xlim(-4, 7); ax.set_ylim(-4, 7)
plt.scatter(xxy1[:, 0], xxy1[:, 1])
plt.scatter(xxy2[:, 0], xxy2[:, 1])
plt.scatter(xxy3[:, 0], xxy3[:, 1]);
```



2.4.3 Análisis discriminante lineal (LDA)

Log-verosimilitud conjunta: $\boldsymbol{\theta}' = (\boldsymbol{\mu}_1^t, \dots, \boldsymbol{\mu}_C^t, \operatorname{vec}(\boldsymbol{\Sigma}))^t$

$$\log p(\mathcal{D} \mid \boldsymbol{\theta}) = \sum N_c \log \pi_c + \sum \sum \log \mathcal{N}(\boldsymbol{x}_n \mid \boldsymbol{\mu}_c, \boldsymbol{\Sigma})$$

$$\log p(\mathcal{D} \mid \boldsymbol{\theta}) = \sum_c N_c \log \pi_c + \sum_c \sum_{n:y_n=c} \log \mathcal{N}(\boldsymbol{x}_n \mid \boldsymbol{\mu}_c, \boldsymbol{\Sigma})$$

Maximización en $\boldsymbol{\theta}'$: no puede hacerse clase a clase, separadamente, porque las condicionales comparten una misma $\boldsymbol{\Sigma}$

$$\hat{\boldsymbol{\theta}}' = \operatorname*{argmax}_{\boldsymbol{\theta}' \in \mathcal{C}_{\boldsymbol{\theta}'}} \sum_c \sum_{n:y_n=c} \log \mathcal{N}(\boldsymbol{x}_n \mid \boldsymbol{\mu}_c, \boldsymbol{\Sigma})$$

No obstante, la única diferencia respecto a QDA es que $\hat{\boldsymbol{\Sigma}}$ se obtiene con todos los datos:

$$\hat{\boldsymbol{\mu}}_c = \frac{1}{N_c} \sum_{n:y_n=c} \boldsymbol{x}_n$$

$$\hat{\boldsymbol{\Sigma}} = \frac{1}{N} \sum_c \sum_{n:y_n=c} (\boldsymbol{x}_n - \hat{\boldsymbol{\mu}}_c)(\boldsymbol{x}_n - \hat{\boldsymbol{\mu}}_c)^t$$

Ejemplo: $C = 3,\; D = 2,\; \pi_1 = \pi_2 = \pi_3 = 1/3$

$$\boldsymbol{\mu}_1 = (0,0)^t \qquad \boldsymbol{\mu}_2 = (0,4)^t \qquad \boldsymbol{\mu}_3 = (4,4)^t$$

$$\boldsymbol{\Sigma} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \qquad \boldsymbol{\Sigma}^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

In [3]:

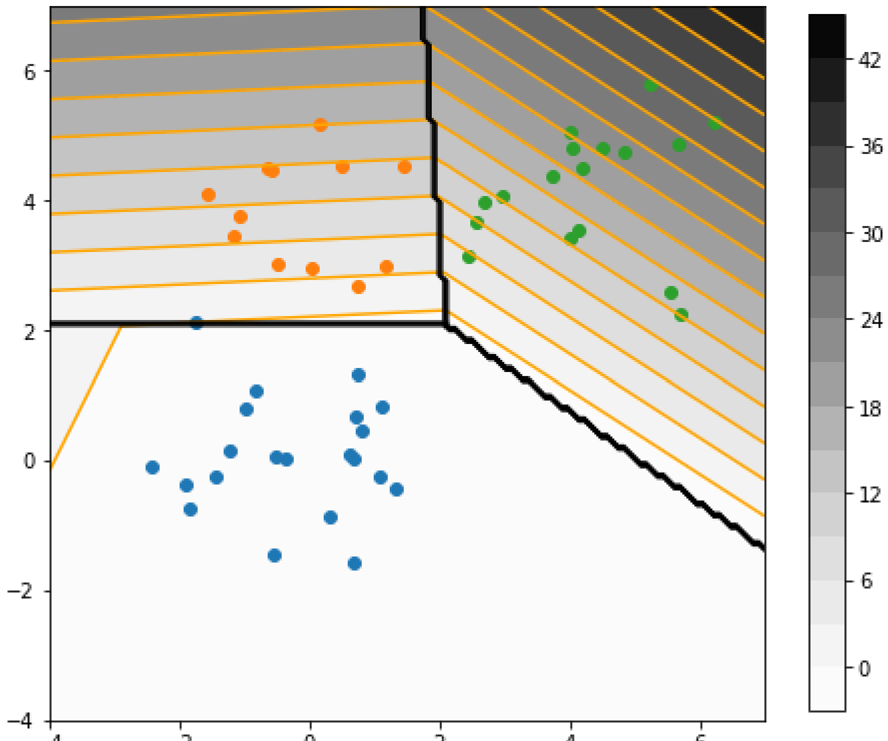
```
import numpy as np
from scipy.stats import multinomial, multivariate_normal
import matplotlib.pyplot as plt
N = 50 # >=3 para tener al menos un dato por clase; >>3 para evitar matrices singulares
pi1 = pi2 = pi3 = 1/3
yy = multinomial(1, [pi1, pi2, pi3]).rvs(N - 3)
N1 = yy[yy[:, 0] == 1].shape[0] + 1
N2 = yy[yy[:, 1] == 1].shape[0] + 1
N3 = N - N1 - N2
hpi1 = N1/N; hpi2 = N2/N; hpi3 = N3/N
xxy1 = multivariate_normal([0, 0], np.eye(2)).rvs(N1)
m1 = xxy1.mean(axis=0); S1 = np.cov(xxy1, rowvar=False, bias=True)
xxy2 = multivariate_normal([0, 4], np.eye(2)).rvs(N2)
m2 = xxy2.mean(axis=0); S2 = np.cov(xxy2, rowvar=False, bias=True)
xxy3 = multivariate_normal([4, 4], np.eye(2)).rvs(N3)
m3 = xxy3.mean(axis=0); S3 = np.cov(xxy3, rowvar=False, bias=True)
S = hpi1 * S1 + hpi2 * S2 + hpi3 * S3; iS = np.linalg.inv(S)
print("Medias: ", m1, m2, m3, "\nSigma:\n", S)
```

```
Medias:  [-0.26955704  0.0793533 ] [-0.12012179  3.84454666] [4.26426695 4.16074616]
Sigma:
 [[1.18562159 0.03215417]
```

```
[0.03215417 0.75699928]]
```

In [4]:

```
b1, c1 = iS @ m1, np.log(hpi1) - 0.5 * m1.T @ iS @ m1
b2, c2 = iS @ m2, np.log(hpi2) - 0.5 * m2.T @ iS @ m2
b3, c3 = iS @ m3, np.log(hpi3) - 0.5 * m3.T @ iS @ m3
x1, x2 = np.meshgrid(np.linspace(-4, 7, num=128), np.linspace(-4, 7, num=128))
x = np.c_[np.ravel(x1), np.ravel(x2)]
p1 =  lambda x: b1 @ x + c1
p2 =  lambda x: b2 @ x + c2
p3 =  lambda x: b3 @ x + c3
maxp = lambda x: max(p1(x), p2(x), p3(x))
maxpx = np.apply_along_axis(maxp, 1, x)
amaxp = lambda x: np.argmax([p1(x), p2(x), p3(x)])
amaxpx = np.apply_along_axis(amaxp, 1, x)
fig, ax = plt.subplots(1, 1, figsize=(8, 8))
ax.set(aspect='equal')
ax.contour(x1, x2, maxpx.reshape(x1.shape), 16, colors='orange', linestyles='solid')
cp = ax.contourf(x1, x2, maxpx.reshape(x1.shape), 16, cmap='Greys')
ax.contour(x1, x2, amaxpx.reshape(x1.shape), colors='black', linestyles='solid', linewidths=1)
plt.colorbar(cp, ax=ax, shrink=0.8)
ax.set_xlim(-4, 7); ax.set_ylim(-4, 7)
plt.scatter(xxy1[:, 0], xxy1[:, 1])
plt.scatter(xxy2[:, 0], xxy2[:, 1])
plt.scatter(xxy3[:, 0], xxy3[:, 1]);
```



2.4.4 Matrices de covarianzas diagonales

Motivación: aunque perdemos capacidad para capturar correlaciones entre variables, el número de parámetros pasa de cuadrático a lineal con D, cosa muy conveniente en la práctica cuando D es grande

QDA diagonal: reduce el número de parámetros de $O(CD^2)$ a $O(CD)$

LDA diagonal: reduce el número de parámetros de $O(CD + D^2)$ a $O(CD)$

2.4.5 Análisis discriminante regularizado

Análisis discriminante regularizado (RDA): introduce un hiperparámetro de regularización $\lambda \in [0, 1]$ con el fin de hallar un compromiso (no necesariamente extremo) entre una matriz de covarianzas completa y su diagonal,

$$\hat{\mathbf{\Sigma}}_{\text{rda}} = \lambda \operatorname{diag}(\hat{\mathbf{\Sigma}}_{\text{mle}}) + (1 - \lambda)\hat{\mathbf{\Sigma}}_{\text{mle}}$$

2.5 Clasificador por el centroide más próximo

Clasificador por el centroide más próximo (NCM): regla de decisión MAP para LDA con priors idénticos,

$$\begin{aligned}
\hat{y}(\boldsymbol{x}) &= \operatorname*{argmax}_c \ \log p(y = c \mid \boldsymbol{x}, \boldsymbol{\theta}) \\
&= \operatorname*{argmax}_c \ \log p(\boldsymbol{x} \mid y = c, \boldsymbol{\theta}) && \text{(asumiendo priors idénticos)} \\
&= \operatorname*{argmax}_c \ -\frac{1}{2}(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{\mu}_c)^t \mathbf{\Sigma}^{-1} (\boldsymbol{x} - \boldsymbol{\mu}_c) \\
&= \operatorname*{argmin}_c \ (\boldsymbol{x} - \boldsymbol{\mu}_c)^t \mathbf{\Sigma}^{-1} (\boldsymbol{x} - \boldsymbol{\mu}_c) \\
&= \operatorname*{argmin}_c \ \|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{\mu}_c\|_{\mathbf{W}}^2 && (\text{con } \mathbf{\Sigma}^{-1} = \mathbf{W}^t\mathbf{W}, \ \|\boldsymbol{z}\|_{\mathbf{W}}^2 = \boldsymbol{z}^t\mathbf{W}^t\mathbf{W}\boldsymbol{z})
\end{aligned}$$

Motivación: aparte de su sencillez y reducido coste computacional, puede usarse en **one-shot learning** de nuevas clases ya que basta añadir un prototipo etiquetado $\boldsymbol{\mu}_c$ por cada clase c nueva que se quiera incluir

Aprendizaje de la métrica: $\mathbf{W}$ puede ser una raíz de $\mathbf{\Sigma}^{-1}$ o aprenderse con algún criterio discriminativo

3 Clasificadores naive Bayes

3.1 Asunción y clasificador naive Bayes

Asunción naive Bayes: $\boldsymbol{\theta}_c = (\boldsymbol{\theta}_{c1}, \dots, \boldsymbol{\theta}_{cD}),\ \boldsymbol{\theta}_{cd}$ gobierna la distribución de la característica **independiente** d en la clase c

$$p(\boldsymbol{x} \mid y = c, \boldsymbol{\theta}_c) = \prod_{d=1}^{D} p(x_d \mid y = c, \boldsymbol{\theta}_{cd})$$

Clasificador naive Bayes (NBC): modelo generativo basado en la asunción naive Bayes

$$p(y = c \mid \boldsymbol{x}, \boldsymbol{\theta}) = \frac{\pi_c\, p(\boldsymbol{x} \mid y = c, \boldsymbol{\theta}_c)}{\sum_{c'} \pi_{c'}\, p(\boldsymbol{x} \mid y = c', \boldsymbol{\theta}_{c'})} \propto \pi_c\, p(\boldsymbol{x} \mid y = c, \boldsymbol{\theta}_c)$$

Motivación: aunque se llama "naive" porque es de ingenuos creer que esta asunción se cumple en la práctica, facilita el desarrollo de modelos sencillos, fáciles de entrenar y sorprendentemente precisos (en algunas tareas)

3.2 Modelos ejemplo

3.2.1 Naive Bayes Bernoulli

Para características binarias, $x_d \in \{0, 1\}$; $\boldsymbol{\theta}_c = (\theta_{c1}, \dots, \theta_{cD})^t$ y θ_{cd} es la probabilidad de que $x_d = 1$ en la clase c

$$p(\boldsymbol{x} \mid y = c, \boldsymbol{\theta}_c) = \prod_{d=1}^{D} \operatorname{Ber}(x_d \mid \theta_{cd})$$

Ejemplo: $C = 2,\ \pi_1 = \pi_2 = 0.5,\ D = 2,\ \boldsymbol{\theta}_1 = (0.7, 0.3)^t,\ \boldsymbol{\theta}_2 = (0.2, 0.8)^t,\ \boldsymbol{x} = (1, 0)^t$

$$\begin{aligned}
p(\boldsymbol{x} \mid y = 1, \boldsymbol{\theta}_1) &= \operatorname{Ber}(x_1 \mid 0.7)\ \operatorname{Ber}(x_2 \mid 0.3) = 0.7 \cdot 0.7 = 0.49 \\
p(\boldsymbol{x} \mid y = 2, \boldsymbol{\theta}_2) &= \operatorname{Ber}(x_1 \mid 0.2)\ \operatorname{Ber}(x_2 \mid 0.8) = 0.2 \cdot 0.2 = 0.04 \\
p(y = 1 \mid \boldsymbol{x}, \boldsymbol{\theta}) &= \frac{p(\boldsymbol{x} \mid y = 1, \boldsymbol{\theta}_1)}{p(\boldsymbol{x} \mid y = 1, \boldsymbol{\theta}_1) + p(\boldsymbol{x} \mid y = 2, \boldsymbol{\theta}_2)} \qquad \text{(priors equiprobables)} \\
&= \frac{0.49}{0.49 + 0.04} = 0.92
\end{aligned}$$

3.2.2 Naive Bayes categórico

Para características categóricas, $x_d \in \{1, \dots, K_d\}$; $\boldsymbol{\theta}_c = (\boldsymbol{\theta}_{c1}, \dots, \boldsymbol{\theta}_{cD})$, $\boldsymbol{\theta}_{cd} \in [0,1]^{K_d}$ y θ_{cdk} es la probabilidad de que $x_d = k$ en la clase c

$$p(\boldsymbol{x} \mid y=c, \boldsymbol{\theta}_c) = \prod_{d=1}^{D} \operatorname{Cat}(x_d \mid \boldsymbol{\theta}_{cd})$$

Ejemplo: $C=2,\; \pi_1=\pi_2=0.5,\; D=2,\; K_1=K_2=3,\; \boldsymbol{x}=(1,2)^t$

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\theta}_{11} &= (0.6, 0.2, 0.2)^t & \boldsymbol{\theta}_{12} &= (0.1, 0.3, 0.6)^t \\ \boldsymbol{\theta}_{21} &= (0.3, 0.4, 0.3)^t & \boldsymbol{\theta}_{22} &= (0.3, 0.2, 0.5)^t \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} p(\boldsymbol{x} \mid y=1, \boldsymbol{\theta}_1) &= \operatorname{Cat}(x_1 \mid \boldsymbol{\theta}_{11})\ \operatorname{Cat}(x_2 \mid \boldsymbol{\theta}_{12}) = 0.6 \cdot 0.3 = 0.18 \\ p(\boldsymbol{x} \mid y=2, \boldsymbol{\theta}_2) &= \operatorname{Cat}(x_1 \mid \boldsymbol{\theta}_{21})\ \operatorname{Cat}(x_2 \mid \boldsymbol{\theta}_{22}) = 0.3 \cdot 0.2 = 0.06 \\ p(y=1 \mid \boldsymbol{x}, \boldsymbol{\theta}) &= \frac{0.18}{0.18+0.06} = 0.75 \qquad \text{(priors equiprobables)} \end{aligned}$$

3.2.3 Naive Bayes Gaussiano

Para características reales, $x_d \in \mathbb{R}$; $\boldsymbol{\theta}_c = (\boldsymbol{\theta}_{c1}, \dots, \boldsymbol{\theta}_{cD})^t$, $\boldsymbol{\theta}_{cd} = (\mu_{cd}, \sigma^2_{cd})$, media y varianza de la característica d en c

$$p(\boldsymbol{x} \mid y=c, \boldsymbol{\theta}_c) = \prod_{d=1}^{D} \mathcal{N}(x_d \mid \mu_{cd}, \sigma^2_{cd})$$

Ejemplo: $C=2,\; \pi_1=\pi_2=0.5,\; D=2,\; \boldsymbol{x}=(0,1)^t$

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\theta}_1 &= (\boldsymbol{\mu}_1, \boldsymbol{\sigma}^2_1)^t & \boldsymbol{\mu}_1 &= (\mu_{11}, \mu_{12})^t = (-2, 0)^t & \boldsymbol{\sigma}^2_1 &= (\sigma^2_{11}, \sigma^2_{12})^t = \mathbf{1} \\ \boldsymbol{\theta}_2 &= (\boldsymbol{\mu}_2, \boldsymbol{\sigma}^2_2)^t & \boldsymbol{\mu}_2 &= (\mu_{21}, \mu_{22})^t = (2, 0)^t & \boldsymbol{\sigma}^2_2 &= (\sigma^2_{21}, \sigma^2_{22})^t = \mathbf{1} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} p(\boldsymbol{x} \mid y=1, \boldsymbol{\theta}_1) &= \mathcal{N}(x_1 \mid \mu_{11}, \sigma^2_{11})\, \mathcal{N}(x_2 \mid \mu_{12}, \sigma^2_{12}) = \mathcal{N}(\boldsymbol{x} \mid \boldsymbol{\mu}_1, \boldsymbol{\Sigma}_1),\;\; \boldsymbol{\Sigma}_1 = \operatorname{diag}(\boldsymbol{\sigma}^2_1) \\ p(\boldsymbol{x} \mid y=2, \boldsymbol{\theta}_2) &= \mathcal{N}(x_1 \mid \mu_{21}, \sigma^2_{21})\, \mathcal{N}(x_2 \mid \mu_{22}, \sigma^2_{22}) = \mathcal{N}(\boldsymbol{x} \mid \boldsymbol{\mu}_2, \boldsymbol{\Sigma}_2),\;\; \boldsymbol{\Sigma}_2 = \operatorname{diag}(\boldsymbol{\sigma}^2_2) \\ p(y=1 \mid \boldsymbol{x}, \boldsymbol{\theta}) &= \frac{p(\boldsymbol{x} \mid y=1, \boldsymbol{\theta}_1)}{p(\boldsymbol{x} \mid y=1, \boldsymbol{\theta}_1) + p(\boldsymbol{x} \mid y=2, \boldsymbol{\theta}_2)} \qquad \text{(priors equiprobables)} \end{aligned}$$

In [1]:

```
import numpy as np; from scipy.stats import multivariate_normal
mu1 = np.array([-2, 0]); mu2 = np.array([2, 0]);  Sigma1 = Sigma2 = np.eye(2); x = np.array([0, 1])
pxy1 = multivariate_normal.pdf(x, mu1, Sigma1); pxy2 = multivariate_normal.pdf(x, mu2, Sigma2)
py1x = pxy1 / (pxy1 + pxy2); print(py1x)
```

0.5