AI ALGORITHMS

Study Book

Author

Nelson Bruno Andrés Moreno Cabañas Santiago, Chile 2024

Contents

1	Intr	roduction	3
2	Ma	chine Learning	3
	2.1	Decision Trees	3
	2.2	Random Forest	4
		2.2.1 Ensemble Methods	4
	2.3	Naive Bayes	5
		2.3.1 Gaussian Naive Bayes	6
		2.3.2 Multinomial Naive Bayes	7
	2.4	Support Vector Machines	
		2.4.1 Soft Margin	9
		2.4.2 Kernel Trick	9
		2.4.3 Kernels	
3	Oth		10
	3.1	Performance Metrics	10
4	RE	MOVE	11
	4.1	Pictures	11
	4.2	Citation	11

1 Introduction

Esta es la introducción.

2 Machine Learning

Consideremos un conjunto de datos $X=(x_1,\ldots,x_N)$ donde para cada $i\in 1,\ldots,N,$ $x_i=[x_i^1,\ldots,x_i^M]$ es decir, un conjunto de N datos con M features cada uno. Consideremos además $Y=(y_1,\ldots,y_N)$ las etiquetas o labels cada cada dato. En problemas de clasificación binario, $y_i\in\{0,1\}$ y en problemas de clasificación multiclase, $y_i\in\{1,\ldots L\}$.

2.1 Decision Trees

Un árbol de decisión es un modelo de aprendizaje **supervisado** utilizado para problemas de **regresión** y **clasificación**. El objetivo es aprender simples reglas de decisión a partir de las features.

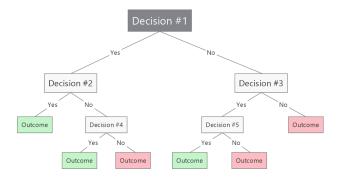


Figure 1: Decision Tree Diagram

En el caso de un problema de clasificación, la variable a escoger y el corte correspondiente se puede elegir como aquel que minimice el desorden de los elementos. Definimos primero la **entropía** según

$$H(p) = -\sum_{j=1}^{L} p_j \log_2 p_j$$

donde p_j es la frecuencia relativa del label j en un grupo. Notar que la entropía es mínima cuando el grupo solo tiene elementos de la clase 0 o de la clase 1 $(p_j = 1)$ y máxima cuando hay la misma cantidad de elementos de cada clase $(p_j = \frac{1}{2})$.

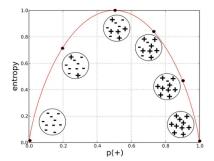


Figure 2: Entropy Diagram

Con la entropía ya definida, definamos la Information Gain como

$$IG(S,D) = H(S) - \sum_{V \in D} \frac{|V|}{|D|} H(V)$$

Donde el primer término es la entropía antes del split y el segundo término es la suma de las entropías después del split. Podemos iterar hasta que la Information Gain no tenga modificaciones (es decir, llegar a los nodos puros) pero esto podría traer problemas de *overfitting*, en general esto se regula con la profundidad del árbol y escogiendo en cada iteración, la división que maximiza el IG.

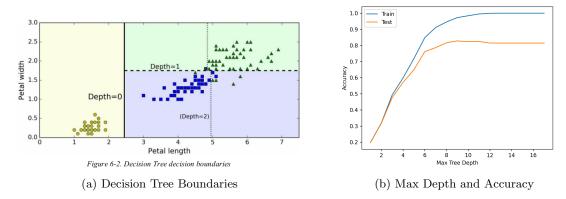


Figure 3: Decision Tree Implementation

En vez de la entropía, es posible usar otro indicador como el **Gini Index** definido como:

$$G(p) = 1 - \sum_{j=1}^{L} p_j^2$$

2.2 Random Forest

2.2.1 Ensemble Methods

Los **métodos de ensamblaje** son aquellos en los que se combinan múltiples estimadores entrenados sobre los datos para generar una predicción más robusta (menor varianza) y generalizada. La predicción

final se puede realizar por Majority Voting, Simple Average o Weighted Average.

Existen 3 estrategias principales en los métodos de ensamblaje:

- 1. **Bagging**: Corresponde a una abreviación de *Bootstrap Aggregating*, esta estrategia entrena cada estimador base con una **muestra con reemplazo** de ejemplos del conjunto de entrenamiento.
- 2. Boosting: Esta estrategia se basa en entrenar secuencialmente estimadores base débiles que aprenden de los errores del anterior para crear un estimador robusto.
- 3. Stacking: Este método combina las predicciones de múltiples estimadores fuertes en una sola.

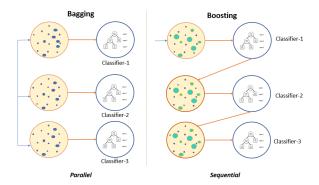


Figure 4: Bagging and Boosting Diagram

El algoritmo de *Random Forest* es un método **supervisado de ensamblaje** basado en *Decision Trees*. Este, utiliza la estrategia de **bagging** para entrenar cada árbol de decisión sobre muestras con reemplazo del conjunto de entrenamiento y además, cada árbol es entrenado sobre un **subconjunto aleatorio de features** para asegurar que no haya similitud entre ellos. Ambas estrategias permiten mejorar la precisión del modelo y controlar el *overfitting*.

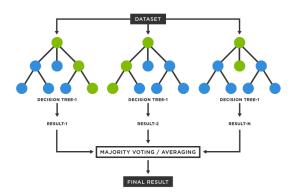


Figure 5: Random Forest Diagram

2.3 Naive Bayes

Este modelo de aprendizaje **supervisado** puede ser utilizado para problemas de clasificación. Este algoritmo es una aplicación del teorema de Bayes en el que se asume (Naive) la independencia condi-

cional entre los pares de features x^j dado el valor del label y

Naive Bayes Classifier | Classifier | P(B|A) · P(A) | P(B) |

Figure 6: Naive Bayes Diagram

La formulación es la siguiente:

$$P(y|x^{1},...,x^{M}) = \frac{P(y)P(x^{1},...,x^{M}|y)}{P(x^{1},...,x^{M})} = \frac{P(y)\prod_{j=1}^{M}P(x^{j}|y)}{P(x^{1},...,x^{M})} \propto P(y)\prod_{j=1}^{M}P(x^{j}|y)$$

y la predicción se realiza según

$$\hat{y} = \operatorname{argmax}_{y} P(y) \prod_{j=1}^{M} P(x^{j}|y)$$

2.3.1 Gaussian Naive Bayes

Aquí consideramos que $x^j|y \sim \mathcal{N}(\mu_j, \sigma_j^2)$, es decir, cada feature sigue una distribución normal según:

$$P(x^{j}|y) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_{j}^{2}}} \exp\left(-\frac{(x^{j} - \mu_{j})^{2}}{2\sigma_{j}^{2}}\right)$$

donde la media y varianza μ_j y σ_j respectivamente, son calculados a través de la máxima verosimilitud, es decir, si $x_i = (x_i^1, x_i^2, \dots x_i^M)$ con $i \in \{1, \dots, N\}$ los datos, entonces $\mu_j = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_i^j$ y $\sigma_j = \frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N (x_i^j - \mu_j)^2$. Notar que esto se debe calcular utilizando los datos de la clase respectiva y.

La definición anterior funciona bien con tipos de data numéricos.

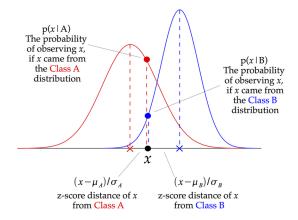


Figure 7: Gaussian Naive Bayes Diagram

2.3.2 Multinomial Naive Bayes

Aquí consideramos que $x^j|y$ sigue una distribución multinomial donde los parámetros $(p_{j_1}, \ldots, p_{j_k})$ de esta distribución son calculados según

$$p_{j_k} = \frac{N_{j_k} + \alpha}{N_j + \alpha}$$

Donde N_{j_k} es la cantidad de veces que la categoría k de la feature j aparece en los datos con clase y del conjunto de entrenamiento y $N_j = \sum_k N_{j_k}$. El parámetro α es un *Smoothing Prior* para estabilidad numérica.

La definición anterior funciona bien con tipos de datos categóricos.

2.4 Support Vector Machines

Las Support Vector Machines o SVM, son modelos de aprendizaje **supervisados** que pueden ser usados para problemas de clasificación y regresión. Se construyen a partir de la búsqueda de un hiper-plano separador y vectores de soporte que maximizan la distancia entre las clases.

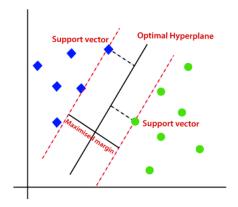


Figure 8: SVM Diagram

Consideremos el caso binario donde $Y \in \{0,1\}^n$ El hiper-plano separador está definido por

$$H = \{ x \in \mathbb{R}^n | w^\top x + b = 0 \}$$

Donde w es el vector perpendicular al hiper-plano y b un offset. De esta forma si $w^{\top}x + b > 0$ quiere decir que x pertenece a la clase 1 y $w^{\top}x + b < 0$ que x pertenece a la clase 0, escrito de otra forma

$$y_i(w^\top x + b) \ge 1 \quad \forall i \in \{1, \dots, N\}$$

En el caso de un problema de clasificación linealmente separable, existen infinitos hiper-planos que satisfacen las condiciones anteriores (basta con rotar ligeramente el hiper-plano) por lo que vamos a exigir además las siguientes condiciones sobre vectores de soporte x_- y x_+ .

$$w^{\top}x_{+} + b = 1$$
$$w^{\top}x_{-} + b = -1$$

Notar entonces que con esta condición, es posible calcular el ancho m de la separación entre el hiperplano y el vector de soporte. Recordemos que la distancia m de un vector x a un hiperplano con vector normal w viene dada por

$$m = \frac{|\langle w, x \rangle|}{||w||}$$

Considerando la definición de los vectores de soporte, se tiene que

$$2m = \frac{|\langle w, x_{+} \rangle|}{||w||} + \frac{|\langle w, x_{-} \rangle|}{||w||} = \frac{|1 - b|}{||w||} + \frac{|-1 - b|}{||w||}$$

Además el offset $b \in [0, 1]$ por la definición anterior, así

$$m = \frac{1}{||w||}$$

Finalmente, el problema de optimización quedaría de la siguiente forma

$$\max_{\omega,b} \quad \frac{1}{||w||}$$

s.t. $y_i(w^\top x_i + b) \ge 1, \forall i \in \{1, \dots N\}$

Equivalente a

$$\min_{\omega,b} \quad \frac{1}{2} ||w||^2$$
 s.t. $y_i(w^\top x_i + b) > 1, \forall i \in \{1, \dots N\}$

Este problema se resuelve utilizando el **dual** (quadratic programming) y es fundamental para la extensión no-lineal de la SVM (Kernel Trick).

2.4.1 Soft Margin

Los datos son usualmente no linealmente separables, por lo que hay que permitir un error en la clasificación de ciertos puntos (soft margin). Este cambio en el problema de optimización se reduce a la siguiente regularización:

$$\min_{\omega, b} \quad \frac{1}{2} ||w||^2 + C \sum_{i=1}^{N} \xi_i$$
 s.t. $y_i(w^\top x_i + b) \ge 1 - \xi_i, \forall i \in \{1, \dots, N\}, \ \xi_i \ge 0$

2.4.2 Kernel Trick

En la formulación del problema dual, la función objetivo requiere el cómputo del producto interno entre todos los puntos del conjunto de entrenamiento. Si buscamos proyectar nuestra data a una dimensión mayor (aplicar algún mapeo ϕ para hacer la separación posible), esto se puede realizar calculando los productos $\langle \phi(x_i), \phi(x_i) \rangle$ para todo i y j.

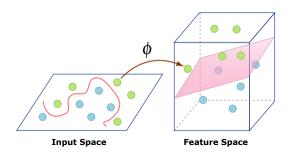


Figure 9: Kernel Trick

El paso fundamental del truco del kernel es que no es necesario conocer el mapeo ϕ explícitamente pues por el teorema de Mercer

$$K(x_i, x_i) = \langle \phi(x_i), \phi(x_i) \rangle$$

donde $K: X \times X \to \mathbb{R}$ es un kernel de *Mercer* en un espacio de *Hilbert* (posiblemente de dimensión infinita), por lo que solo basta que definamos K para tener un posible mapeo de las características.

2.4.3 Kernels

Para que un kernel pueda utilizarse en el contexto de las SVM, es importante que cumpla con las condiciones de Mercer:

- Symmetry: $K(x, y) = K(y, x) \quad \forall x, y$
- Positive Semi-Definiteness: Para cualquier vector $c \in \mathbb{R}^n$, y $x_1, \dots x_n$ una cantidad finita de puntos, se debe satisfacer que

$$\sum_{ij} c_i x_j K(x_i, x_j) \ge 0$$

Algunos ejemplos de kernels que se pueden utilizar son:

1. Linear Kernel: $K(x,y) = \langle x,y \rangle$.

El más útil cuando la data es linealmente separable.

2. Polynomial Kernel: $K(x,y) = (x^{\top}y + c)^d$.

El parámetro d controla el nivel de complejidad del kernel pero valores muy altos podrían llevar a overfitting.

3. Gaussian Radial Basis Function (RBF) Kernel: $K(x,y) = e^{-\gamma ||x-y||^2}$.

Este kernel es el más popular pues **mapea los datos a un espacio de dimensión infinita**. El parámetro γ controla la complejidad de los *decision boundaries* al agregar mayor o menor *spread* al kernel.

4. Sigmoid Kernel: $K(x,y) = \tanh(ax^{\top}y + b)$

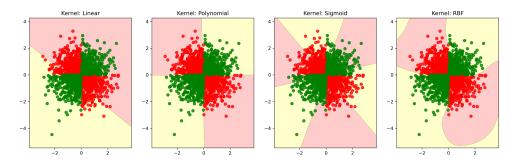


Figure 10: Kernel Decision Boundaries

3 Others

3.1 Performance Metrics

4 REMOVE

Theorem 4.1. This is a theorem.

Proposition 4.2. This is a proposition.

Principle 4.3. This is a principle.

4.1 Pictures

4.2 Citation

This is a citation [1].

References

 $[1]\,$ H. Ren, "Template for math notes," 2021.