AI ALGORITHMS

Study Book

Author
Nelson Bruno Andrés Moreno Cabañas
Santiago, Chile
2024

Contents

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.

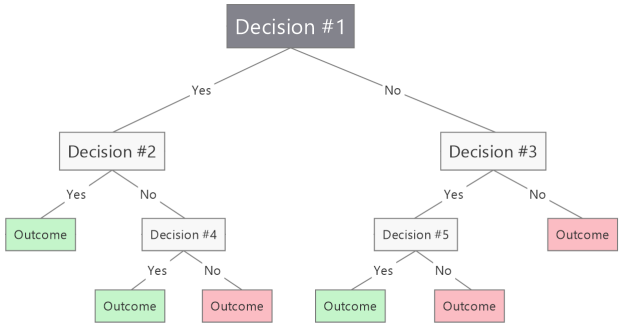


Figure 1: Decision Tree Diagram

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 ($p_j = \frac{1}{2}$).

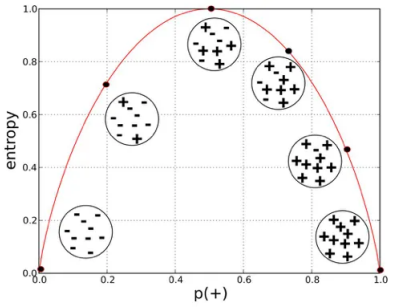
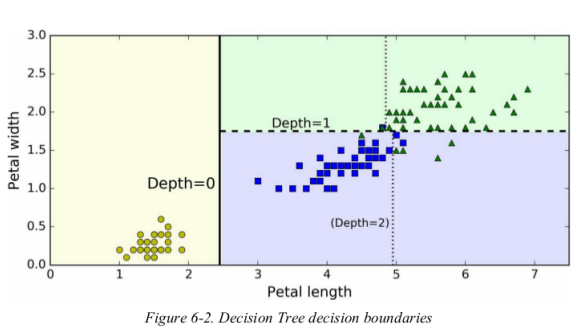


Figure 2: Entropy Diagram

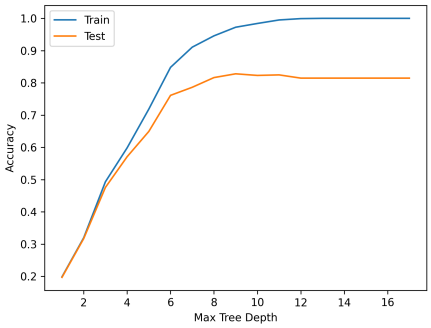
Con la entropía ya definida, definamos la **Information Gain** como

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

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.



(a) Decision Tree Boundaries



(b) Max Depth and Accuracy

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.

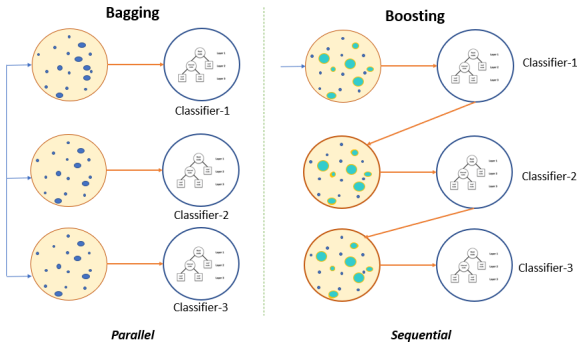


Figure 4: Bagging and Boosting Diagram

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*.

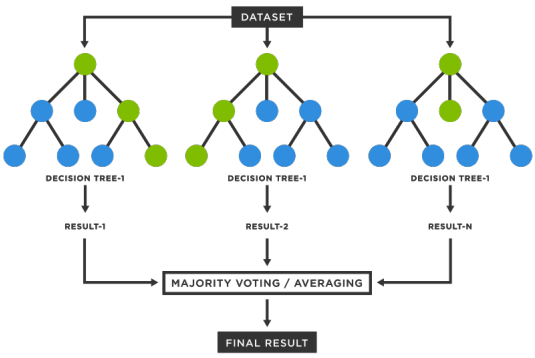


Figure 5: Random Forest Diagram

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

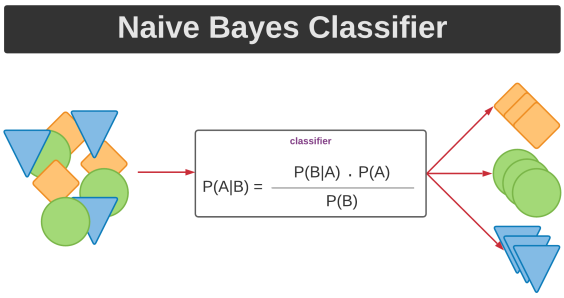


Figure 6: Naive Bayes Diagram

La formulación es la siguiente:

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

y la predicción se realiza según

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

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 $x_i = (x_i^1, x_i^2, \ldots x_i^M)$ con $i \in \{1,\ldots,N\}$ 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.

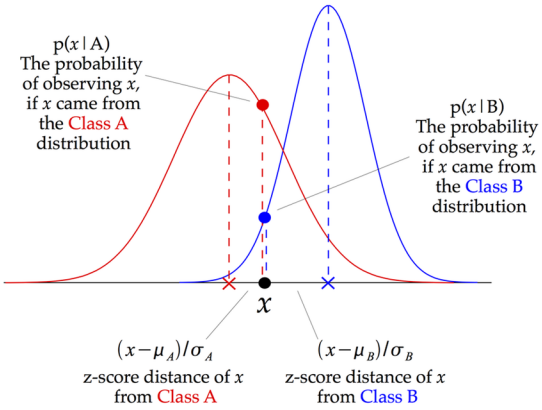


Figure 7: Gaussian Naive Bayes Diagram

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.

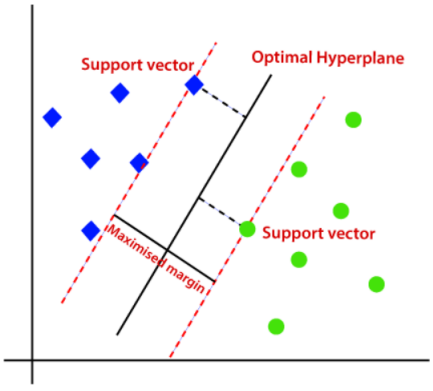


Figure 8: SVM Diagram

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

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

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 hiper-plano 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

$$\max_{\omega, b} \quad \frac{1}{||w||}$$
$$\text{s.t.} \quad y_i(w^\top x_i + b) \geq 1, \forall i \in \{1, \ldots N\}$$

Equivalente a

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

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:

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

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 $\langle \phi(x_i), \phi(x_j) \rangle$ para todo i y j.

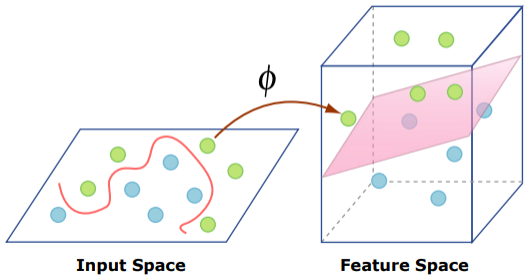


Figure 9: Kernel Trick

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

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

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

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**: $K(x, y) = \tanh(ax^\top y + b)$

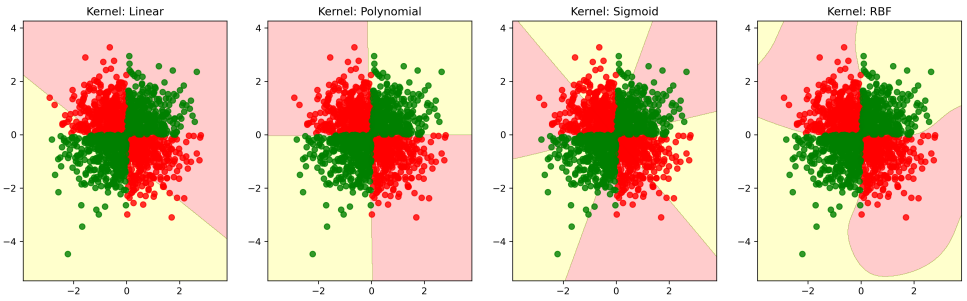


Figure 10: Kernel Decision Boundaries

2.5 ARIMA

Arima es la abreviación de *Auto-Regressive Integrated Moving Average* y es un método estadístico para realizar *forecasting* sobre series de tiempo que integra los siguientes conceptos:

1. Toma en consideración patrones de crecimiento/decrecimiento en la serie de tiempo (*Auto-Regressive*).
2. Estima tasa de crecimiento/decrecimiento (*Integrated*).
3. Controla el ruido entre datos consecutivos en el tiempo (*Moving Average*).

La fórmula general para este tipo de modelos viene dada por

$$Y_t = c + \phi_1 y_{t-1}^d + \cdots + \phi_p y_{t-p}^d + \theta_1 e_{t-1} + \cdots + \theta_q e_{t-q} + e_t$$

Aquí c es una constante y e es un término de error. Los modelos de este tipo son escritos como ARIMA(p, d, q) donde:

- p es la cantidad de tiempos en que la variable es mirada al pasado (*Lag*).

- d es la cantidad de veces que la variable es diferenciada para producir una señal estacionaria. $d = 0$ refiere a que la señal ya es estacionaria, $d = 1$ es que la señal crece/decrece linealmente y $d = 2$ es que la señal crece exponencialmente.
- q representa la cantidad de *lag* para el término de error e, esto captura el *Moving Average*.

En la práctica, es posible determinar el valor de p a través del *Partial Autocorrelation Plot*. Este gráfico muestra la relación de un valor en la serie de tiempo con **un solo lag**

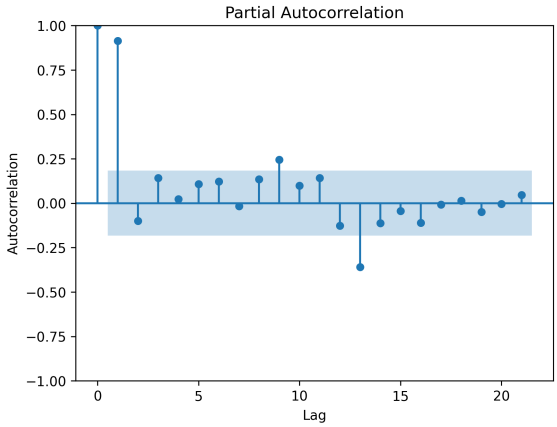


Figure 11: Partial Autocorrelation Plot

El valor óptimo es el último punto después del cual todos los lags están dentro de las bandas azules (intervalos de confianza), en este caso $p = 13$.

El valor de d se puede calcular diferenciando la serie de tiempo hasta encontrar una serie estacionaria. Esto lo podemos medir con un test estadístico de estacionalidad (*Augmented Dickey Fuller Test*).

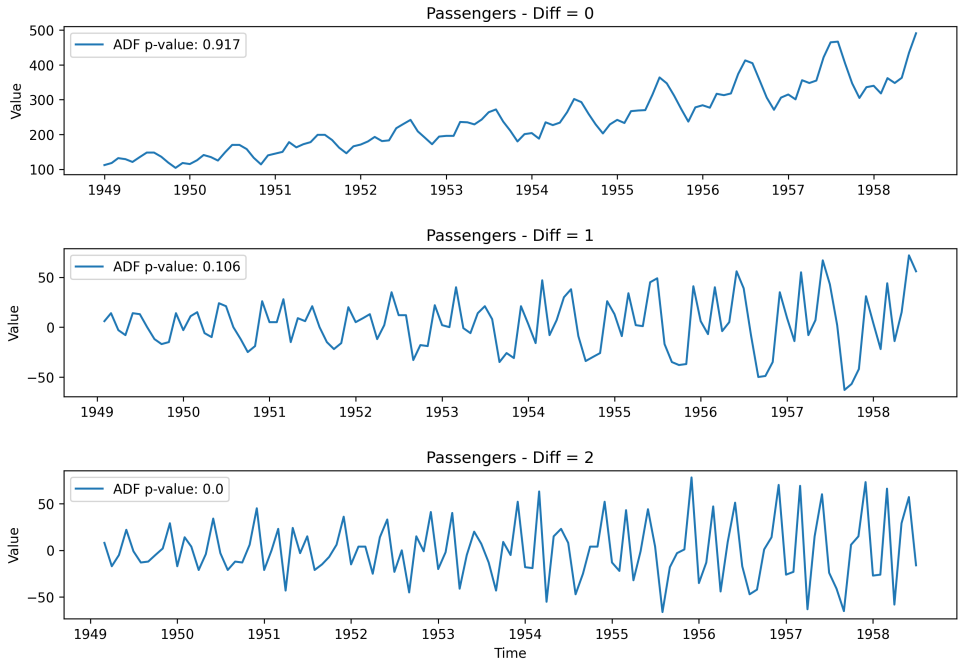


Figure 12: Time Series Differentiation Plot

Vemos que el p-valor en la segunda diferenciación ya es lo suficientemente pequeño para asumir estacionalidad en la serie de tiempo, así $d = 2$.

Finalmente, para determinar el valor q es posible ver el *Autocorrelation Plot* que muestra la relación de un valor en la serie de tiempo con **todos los lags** anteriores.

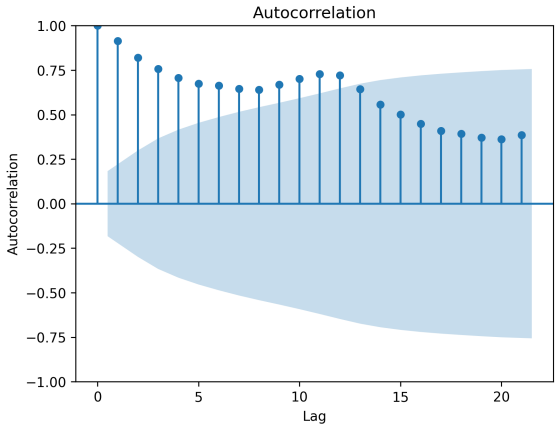


Figure 13: Autocorrelation Plot

En este caso, el último valor anterior a que todos los *Lag* caigan en la zona azul, es $q = 12$.

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.