

# Clasificación

**Taller de Procesamiento de Señales / Introducción a la Inteligencia Artificial**

# Agenda

- 1 Introducción al problema de clasificación
- 2 Regresión Logística Binaria
- 3 Regresión Logística Categórica
- 4 Linear Discriminant Analysis
- 5 K-Vecinos más cercanos
- 6 Support Vector Machines
- 7 Árboles de decisión

# Teoría de Clasificación

## Bases

**Objetivo:** Clasificar  $Y$  (con  $|\mathcal{Y}|$  finito) a partir del valor de  $X$ :  $\hat{Y} = \varphi(X)$

**Función costo:** Hard  $\rightarrow \ell(x, y) = \mathbb{1}\{y \neq \varphi(x)\}$

**Riesgo Esperado:** Probabilidad de error  $\rightarrow \mathbb{P}(Y \neq \varphi(X))$

# Teoría de Clasificación

## Bases

**Objetivo:** Clasificar  $Y$  (con  $|\mathcal{Y}|$  finito) a partir del valor de  $X$ :  $\hat{Y} = \varphi(X)$

**Función costo:** Hard  $\rightarrow \ell(x, y) = \mathbb{1}\{y \neq \varphi(x)\}$

**Riesgo Esperado:** Probabilidad de error  $\rightarrow \mathbb{P}(Y \neq \varphi(X))$

## Optimalidad

$$\mathbb{P}(Y \neq \varphi(X)) \geq 1 - \mathbb{E} \left[ \max_y P_{Y|X}(y|X) \right]$$

con igualdad si y solo si  $\varphi(x) = \arg \max_y P_{Y|X}(y|x)$ .

**Clasificador Bayesiano:**  $\varphi(x) = \arg \max_y P_{Y|X}(y|x)$

**Error Bayesiano:**  $1 - \mathbb{E} \left[ \max_y P_{Y|X}(y|X) \right]$

# Clasificadores extremos

## Clasificador bayesiano

El mejor clasificador (en términos de la probabilidad de error) es:

$$\mathbb{P}(Y \neq \varphi(X)) \geq 1 - \mathbb{E} \left[ \max_y P_{Y|X}(y|X) \right]$$

## Clasificador al azar para $k$ clases

Cualquier clasificador razonable debe ganarle a la decisión al azar:

$$\mathbb{P}(Y \neq \varphi(X)) \leq 1 - \frac{1}{k}$$

## Clasificador dummy

Otro clasificador muy precario (pero mejor que el azaroso) es elegir siempre la clase más probable. La probabilidad de error del dummy es:

$$\mathbb{P}(Y \neq \varphi(X)) \leq 1 - \max_y P_Y(y)$$

# Clasificador bayesiano

## Interpretación Gráfica

$$1 - \mathbb{E} \left[ \max_y P_{Y|X}(y|X) \right] = \sum_{y \in \mathcal{Y}} P_Y(y) \mathbb{P}(X \notin \mathcal{R}_y | Y = y)$$

donde  $\mathcal{R}_y$  es el conjunto de  $x \in \mathcal{X}$  donde  $y$  es el máximo de  $P_{Y|X=x}(y)$ :

$$\mathcal{R}_y = \left\{ x \in \mathcal{X} : P_{Y|X=x}(y) = \max_{y' \in \mathcal{Y}} P_{Y|X=x}(y') \right\}$$

---

Para los  $x \in \mathcal{X}$  donde haya dos o más máximos de  $P_{Y|X=x}(y)$ , se asigna dicho  $x$  a solo una de dichas  $\mathcal{R}_y$  elegida arbitrariamente.

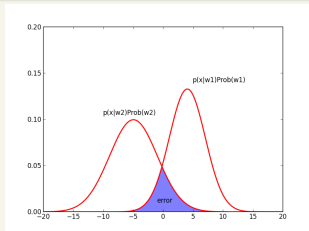
# Clasificador bayesiano

## Interpretación Gráfica

$$1 - \mathbb{E} \left[ \max_y P_{Y|X}(y|X) \right] = \sum_{y \in \mathcal{Y}} P_Y(y) \mathbb{P}(X \notin \mathcal{R}_y | Y = y)$$

donde  $\mathcal{R}_y$  es el conjunto de  $x \in \mathcal{X}$  donde  $y$  es el máximo de  $P_{Y|X=x}(y)$ :

$$\mathcal{R}_y = \left\{ x \in \mathcal{X} : P_{Y|X=x}(y) = \max_{y' \in \mathcal{Y}} P_{Y|X=x}(y') \right\}$$



Para los  $x \in \mathcal{X}$  donde haya dos o más máximos de  $P_{Y|X=x}(y)$ , se asigna dicho  $x$  a solo una de dichas  $\mathcal{R}_y$  elegida arbitrariamente.

# Clasificador bayesiano

## Objetivo

Quiero buscar  $\varphi(\cdot)$  que minimice  $\mathbb{P}(Y \neq \varphi(X))$ . Es decir aprender el “clasificador bayesiano”:  $\varphi(x) = \arg \max_y P_{Y|X}(y|x)$ .



# Clasificador bayesiano

## Objetivo

Quiero buscar  $\varphi(\cdot)$  que minimice  $\mathbb{P}(Y \neq \varphi(X))$ . Es decir aprender el “clasificador bayesiano”:  $\varphi(x) = \arg \max_y P_{Y|X}(y|x)$ .

## Problemas numéricos

La propuesta de buscar  $\varphi(\cdot)$  que minimice el riesgo empírico:  $\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \mathbb{1}\{Y_i \neq \varphi(X_i)\}$  suele tener problemas numéricos (no derivable).

# Clasificador bayesiano

## Objetivo

Quiero buscar  $\varphi(\cdot)$  que minimice  $\mathbb{P}(Y \neq \varphi(X))$ . Es decir aprender el “clasificador bayesiano”:  $\varphi(x) = \arg \max_y P_{Y|X}(y|x)$ .

## Problemas numéricos

La propuesta de buscar  $\varphi(\cdot)$  que minimice el riesgo empírico:  $\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \mathbb{1}\{Y_i \neq \varphi(X_i)\}$  suele tener problemas numéricos (no derivable).

## Posible solución

El clasificador bayesiano se aprenderá en dos etapas:

- Aprender toda  $P_{Y|X}(y|x)$ .
- Quedarse con el máximo.

# Elementos de Teoría de Información

- $H(X) = \mathbb{E}[-\log P_X(X)]$  Entropía
- $h(X) = \mathbb{E}[-\log p_X(X)]$  Entropía diferencial
- $H(Y|X) = \mathbb{E}[-\log P_{Y|X}(Y|X)]$  Entropía condicional
- $h(Y|X) = \mathbb{E}[-\log p_{Y|X}(Y|X)]$  Entropía diferencial condicional
- $\text{KL}(p_X \| q_X) = \mathbb{E}_{p_X} \left[ \log \left( \frac{p_X(X)}{q_X(X)} \right) \right]$  Divergencia de Kullback Leibler
- $I(X; Y) = \text{KL}(p_{XY} \| p_X p_Y)$  Información Mutua

# Elementos de Teoría de Información

- $H(X) = \mathbb{E}[-\log P_X(X)]$  Entropía
- $h(X) = \mathbb{E}[-\log p_X(X)]$  Entropía diferencial
- $H(Y|X) = \mathbb{E}[-\log P_{Y|X}(Y|X)]$  Entropía condicional
- $h(Y|X) = \mathbb{E}[-\log p_{Y|X}(Y|X)]$  Entropía diferencial condicional
- $\text{KL}(p_X \| q_X) = \mathbb{E}_{p_X} \left[ \log \left( \frac{p_X(X)}{q_X(X)} \right) \right]$  Divergencia de Kullback Leibler
- $I(X; Y) = \text{KL}(p_{XY} \| p_X p_Y)$  Información Mutua

## Teorema

$$\text{KL}(P \| Q) \geq 0$$

con igualdad si y solo si  $P(y) = Q(y)$  para todo  $y \in \mathcal{Y}$ .

(Hint:  $\log(x) \leq x - 1$ ).

# Divergencia de Kullback Leibler

## Propuesta inicial

Busco  $\hat{P}(y|x)$  que minimice:

$$\underbrace{\mathbb{E} \left[ KL \left( P_{Y|X}(\cdot|X) \parallel \hat{P}(\cdot|X) \right) \right]}_{\text{Kullback Leibler}} = \underbrace{\mathbb{E} \left[ -\log \hat{P}(Y|X) \right]}_{\text{Cross-entropy}} - \underbrace{H(Y|X)}_{\text{Entropía condicional}}$$

# Divergencia de Kullback Leibler

## Propuesta inicial

Busco  $\hat{P}(y|x)$  que minimice:

$$\underbrace{\mathbb{E} \left[ KL \left( P_{Y|X}(\cdot|X) \parallel \hat{P}(\cdot|X) \right) \right]}_{\text{Kullback Leibler}} = \underbrace{\mathbb{E} \left[ -\log \hat{P}(Y|X) \right]}_{\text{Cross-entropy}} - \underbrace{H(Y|X)}_{\text{Entropía condicional}}$$

Optimalidad para  $\ell(x, y) = -\log \hat{P}(y|x)$

$$\mathbb{E} \left[ -\log \hat{P}(Y|X) \right] \geq H(Y|X)$$

son igualdad si y solo si  $\hat{P}(y|x) = P_{Y|X}(y|x)$  para todo  $(x, y)$ .

# Divergencia de Kullback Leibler

## Propuesta inicial

Busco  $\hat{P}(y|x)$  que minimice:

$$\underbrace{\mathbb{E} \left[ KL \left( P_{Y|X}(\cdot|X) \parallel \hat{P}(\cdot|X) \right) \right]}_{\text{Kullback Leibler}} = \underbrace{\mathbb{E} \left[ -\log \hat{P}(Y|X) \right]}_{\text{Cross-entropy}} - \underbrace{H(Y|X)}_{\text{Entropía condicional}}$$

Optimalidad para  $\ell(x, y) = -\log \hat{P}(y|x)$

$$\mathbb{E} \left[ -\log \hat{P}(Y|X) \right] \geq H(Y|X)$$

son igualdad si y solo si  $\hat{P}(y|x) = P_{Y|X}(y|x)$  para todo  $(x, y)$ .

## Mismatch de métricas

El mínimo de la cross entropy no tiene por que coincidir exactamente con el mínimo de la probabilidad de error. En general se mira la cross entropy para reducir el bias y la probabilidad de error para prevenir el overfitting.

# Hard/Soft Decision

## Decisión Suave

Sea  $x \in \mathbb{R}^d$ , llamamos predicción *soft* de un algoritmo a la predicción de las probabilidades estimadas  $\hat{P}(\cdot|x)$ . Esta estimación es un vector de probabilidades de todas las clases posibles (no negativas y suman 1). Su desempeño se suele medir con la entropía cruzada  $\mathbb{E}[-\log \hat{P}(Y|X)]$ .

## Decisión Dura

Sea  $x \in \mathbb{R}^d$ , llamamos predicción *hard* de un algoritmo a la predicción final de la clase estimada  $\varphi(x)$ . Es decir, es una estimación del valor de  $Y$ . Generalmente se la suele definir a partir de la predicción *soft* como:

$$\varphi(x) = \arg \max_{y \in \mathcal{Y}} \hat{P}(y|x)$$

Se desempeño se suele medir con la probabilidad de acierto  $\mathbb{P}(Y = \varphi(X))$ .



# Outline

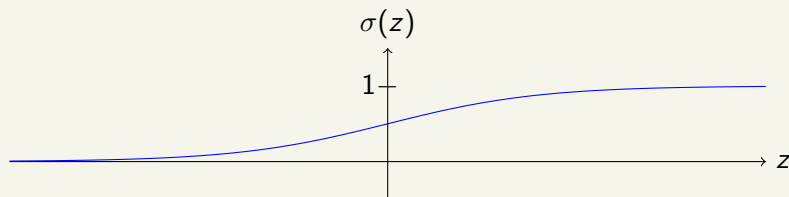
- 1 Introducción al problema de clasificación
- 2 Regresión Logística Binaria**
- 3 Regresión Logística Categórica
- 4 Linear Discriminant Analysis
- 5 K-Vecinos más cercanos
- 6 Support Vector Machines
- 7 Árboles de decisión

# Regresión Logística Binaria

## Función Sigmoide

$$\sigma(z) = \frac{1}{1 + e^{-z}}$$

- $\sigma(z)$  representa probabilidades.
- $z$  recibe el nombre de *logit*.

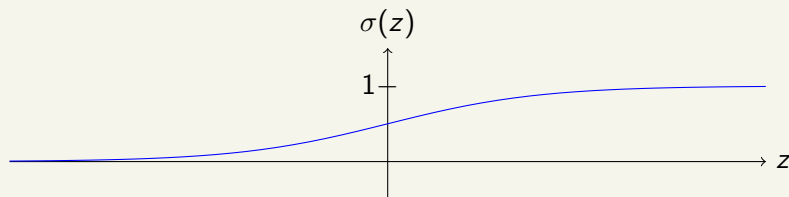


# Regresión Logística Binaria

## Función Sigmoide

$$\sigma(z) = \frac{1}{1 + e^{-z}}$$

- $\sigma(z)$  representa probabilidades.
- $z$  recibe el nombre de *logit*.



## Propuesta

$$\begin{aligned}\hat{P}(1|x) &= \sigma(w^T x + b) \\ \hat{P}(0|x) &= 1 - \sigma(w^T x + b)\end{aligned}$$

# Regresión Logística Binaria

## Riesgo empírico

$$\begin{aligned} \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \ell(X_i, Y_i) = \\ - \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n Y_i \log \left( \sigma(w^T X_i + b) \right) + (1 - Y_i) \log \left( 1 - \sigma(w^T X_i + b) \right) \end{aligned}$$

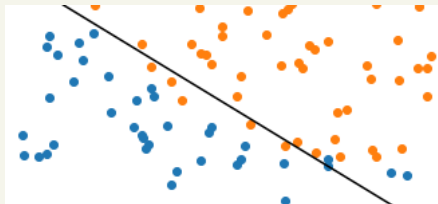
# Regresión Logística Binaria

## Riesgo empírico

$$\begin{aligned} \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \ell(X_i, Y_i) = \\ - \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n Y_i \log \left( \sigma(w^T X_i + b) \right) + (1 - Y_i) \log \left( 1 - \sigma(w^T X_i + b) \right) \end{aligned}$$

## Elección del máximo

$$\hat{P}(1|x) \leq \hat{P}(0|x) \quad \Leftrightarrow \quad w^T x + b \leq 0$$



# Curvas ROC

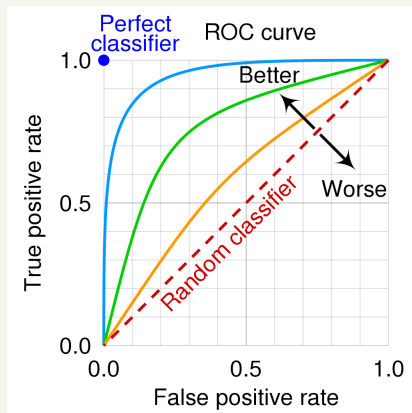
## Agregar un umbral

Puedo darle más peso a una clase:

$$w^T x + b \leq t$$

$$\text{TPR} = \mathbb{P}(Y = \phi(X) | Y = 1)$$

$$\text{FPR} = \mathbb{P}(Y \neq \phi(X) | Y = 0)$$



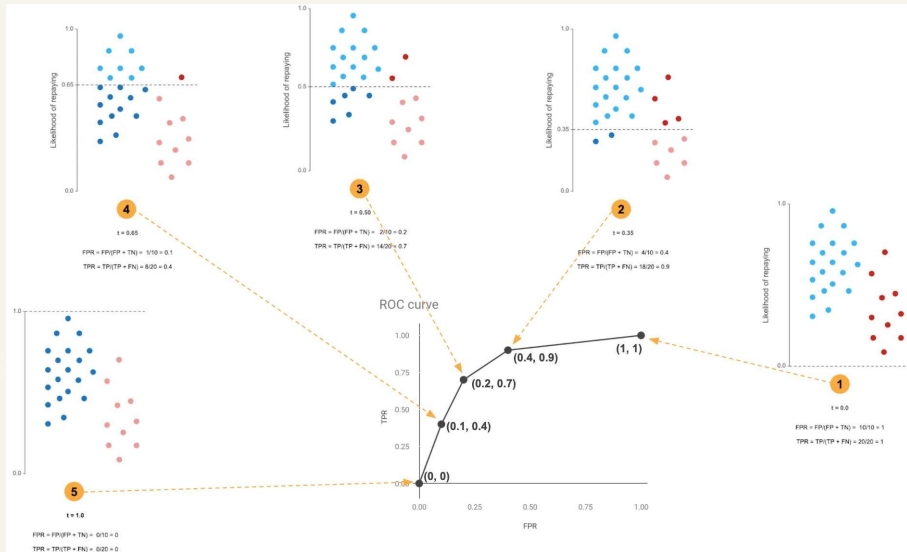
## Area Under the Curve (AUC)

El AUC es el área bajo la curva ROC.

## Equal Error Rate (EER)

El EER es el error para el cuál los errores  $\text{FPR} = 1 - \text{TPR}$ .

# Curvas ROC



# Métricas para clases desbalanceadas

## Precision-Recall

Cuando el costo de las clases está desbalanceado se utilizan las métricas *Precision* y *Recall*.

- $\text{Precision} = \mathbb{P}(Y = \phi(X) | \phi(X) = 1)$ . *Precision* se utiliza cuando los falsos positivos tiene consecuencias graves. Por ejemplo, diagnosticar erróneamente una enfermedad a una persona sana
- $\text{Recall (TPR)} = \mathbb{P}(Y = \phi(X) | Y = 1)$ . *Recall* se utiliza cuando cuando los falsos negativos tiene consecuencias graves. Por ejemplo, en la detección de fraudes, no detectar una transacción fraudulenta.



# Métricas para clases desbalanceadas

## Precision-Recall

Cuando el costo de las clases está desbalanceado se utilizan las métricas *Precision* y *Recall*.

- $\text{Precision} = \mathbb{P}(Y = \phi(X) | \phi(X) = 1)$ . *Precision* se utiliza cuando los falsos positivos tiene consecuencias graves. Por ejemplo, diagnosticar erróneamente una enfermedad a una persona sana
- $\text{Recall (TPR)} = \mathbb{P}(Y = \phi(X) | Y = 1)$ . *Recall* se utiliza cuando cuando los falsos negativos tiene consecuencias graves. Por ejemplo, en la detección de fraudes, no detectar una transacción fraudulenta.

## F1-score

Cuando la proporción de las clases está desbalanceada se utiliza la métrica F1:

$$F_1 = 2 \frac{\text{Precision} \cdot \text{Recall}}{\text{Precision} + \text{Recall}}$$

# Outline

- 1 Introducción al problema de clasificación
- 2 Regresión Logística Binaria
- 3 Regresión Logística Categórica**
- 4 Linear Discriminant Analysis
- 5 K-Vecinos más cercanos
- 6 Support Vector Machines
- 7 Árboles de decisión

# Regresión Logística Categórica ( $k$ clases)

## Regresión logística clásica

$$\hat{P}(y|x) = \begin{cases} \frac{e^{w_y^T x + b_y}}{1 + \sum_{j=1}^{k-1} e^{w_j^T x + b_j}} & y \in \{1, \dots, k-1\} \\ \frac{1}{1 + \sum_{j=1}^{k-1} e^{w_j^T x + b_j}} & y = k \end{cases}$$

# Regresión Logística Categórica ( $k$ clases)

## Regresión logística clásica

$$\hat{P}(y|x) = \begin{cases} \frac{e^{w_y^T x + b_y}}{1 + \sum_{j=1}^{k-1} e^{w_j^T x + b_j}} & y \in \{1, \dots, k-1\} \\ \frac{1}{1 + \sum_{j=1}^{k-1} e^{w_j^T x + b_j}} & y = k \end{cases}$$

## Softmax

$$\hat{P}(y|x) = \frac{e^{w_y^T x + b_y}}{\sum_{j=1}^k e^{w_j^T x + b_j}}, \quad y \in \{1, \dots, k\}$$

# Regresión Logística Categórica ( $k$ clases)

## Regresión logística clásica

$$\hat{P}(y|x) = \begin{cases} \frac{e^{w_y^T x + b_y}}{1 + \sum_{j=1}^{k-1} e^{w_j^T x + b_j}} & y \in \{1, \dots, k-1\} \\ \frac{1}{1 + \sum_{j=1}^{k-1} e^{w_j^T x + b_j}} & y = k \end{cases}$$

## Softmax

$$\hat{P}(y|x) = \frac{e^{w_y^T x + b_y}}{\sum_{j=1}^k e^{w_j^T x + b_j}}, \quad y \in \{1, \dots, k\}$$

## Riesgo empírico

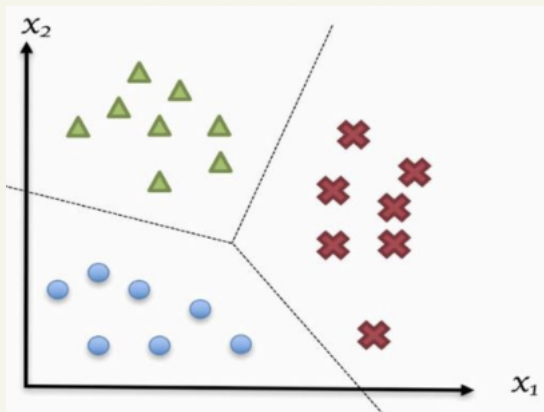
$$\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \ell(X_i, Y_i) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \left[ \log \left( \sum_{j=1}^k e^{w_j^T X_i + b_j} \right) - (w_{Y_i}^T X_i + b_{Y_i}) \right]$$

# Regresión Softmax

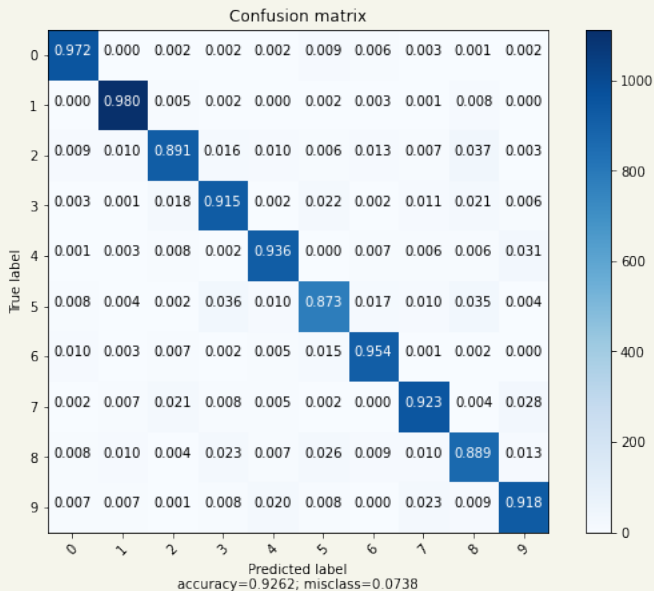
## Elección del máximo

$$\arg \max_y \hat{P}(y|x) = \arg \max_y w_y^T x + b_y$$







Se separa con hiperplanos!



# Confusion Matrix












# Generalización del F1 score

		Predicted		
		 Airplane	 Boat	 Car
Actual	 Airplane	2	1	0
	 Boat	0	1	0
	 Car	1	2	3












# Generalización del F1 score

		Predicted		
		 Airplane	 Boat	 Car
Actual	 Airplane	2	1	0
	 Boat	0	1	0
	 Car	1	2	3

Label	True Positive (TP)	False Positive (FP)	False Negative (FN)	Precision	Recall	F1 Score
 Airplane	2	1	1	0.67	0.67	$2 * (0.67 * 0.67) / (0.67 + 0.67)$ <b>= 0.67</b>
 Boat	1	3	0	0.25	1.00	$2 * (0.25 * 1.00) / (0.25 + 1.00)$ <b>= 0.40</b>
 Car	3	0	3	1.00	0.50	$2 * (1.00 * 0.50) / (1.00 + 0.50)$ <b>= 0.67</b>

# Generalización del F1 score

		Predicted		
		 Airplane	 Boat	 Car
Actual	 Airplane	2	1	0
	 Boat	0	1	0
	 Car	1	2	3

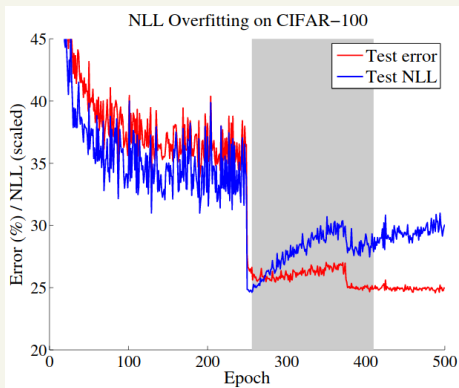
Label	True Positive (TP)	False Positive (FP)	False Negative (FN)	Precision	Recall	F1 Score
 Airplane	2	1	1	0.67	0.67	$2 * (0.67 * 0.67) / (0.67 + 0.67)$ <b>= 0.67</b>
 Boat	1	3	0	0.25	1.00	$2 * (0.25 * 1.00) / (0.25 + 1.00)$ <b>= 0.40</b>
 Car	3	0	3	1.00	0.50	$2 * (1.00 * 0.50) / (1.00 + 0.50)$ <b>= 0.67</b>

$$\text{Macro-}F_1 = \frac{0.67 + 0.40 + 0.67}{3} = 0.58$$

# Calibración

**Si valido hiperparámetros con respecto a la probabilidad de error, ¿la salida siguen siendo probabilidades?**

La concentración de probabilidades natural del softmax es buena para acercarme al clasificador bayesiano, pero puede descalibrar la interpretación probabilística de  $\hat{P}$ .



*Guo et al. 2017: "On Calibration of Modern Neural Networks".*

# Calibración

## Temperature Scaling

Se soluciona con la inclusión de un nuevo parámetro (o hiper)  $T > 0$ :

$$\hat{P}(y|x) = \frac{e^{(z(x))_y / T}}{\mathbf{1}^T \cdot e^{z(x)/T}}$$

Es importante mirar la cross-entropy en la etapa de validación!

Dataset	Model	Uncalibrated	Temp. Scaling
Birds	ResNet 50	0.9786	<b>0.8792</b>
Cars	ResNet 50	0.5488	0.5311
CIFAR-10	ResNet 110	0.3285	0.2102
CIFAR-10	ResNet 110 (SD)	0.2959	0.1718
CIFAR-10	Wide ResNet 32	0.3293	0.2283
CIFAR-10	DenseNet 40	0.2228	<b>0.1750</b>
CIFAR-10	LeNet 5	0.4688	0.459
CIFAR-100	ResNet 110	1.4978	<b>1.0442</b>
CIFAR-100	ResNet 110 (SD)	1.1157	<b>0.8613</b>
CIFAR-100	Wide ResNet 32	1.3434	<b>1.0565</b>
CIFAR-100	DenseNet 40	1.0134	0.9026
CIFAR-100	LeNet 5	1.6639	<b>1.6560</b>
ImageNet	DenseNet 161	0.9338	0.8885
ImageNet	ResNet 152	0.8961	<b>0.8657</b>
SVHN	ResNet 152 (SD)	0.0842	<b>0.0821</b>
20 News	DAN 3	0.7949	0.7387
Reuters	DAN 3	0.102	0.0994
SST Binary	TreeLSTM	0.3367	<b>0.2739</b>
SST Fine Grained	TreeLSTM	1.1475	1.1168

Guo et al. 2017: "On Calibration of Modern Neural Networks".

# Outline

- 1 Introducción al problema de clasificación
- 2 Regresión Logística Binaria
- 3 Regresión Logística Categórica
- 4 Linear Discriminant Analysis**
- 5 K-Vecinos más cercanos
- 6 Support Vector Machines
- 7 Árboles de decisión

# Modelos Discriminativos y Generativos

## Clasificación de Algoritmos

- **Modelos Discriminativos:** Modelan la dist. condicional  $\hat{P}(y|x)$ .
- **Modelos Generativos:** Modelan la dist. conjunta  $\hat{P}(x, y)$ .

Los modelos generativos permiten generar datos sintéticos!

# Modelos Discriminativos y Generativos

## Clasificación de Algoritmos

- **Modelos Discriminativos:** Modelan la dist. condicional  $\hat{P}(y|x)$ .
- **Modelos Generativos:** Modelan la dist. conjunta  $\hat{P}(x, y)$ .

Los modelos generativos permiten generar datos sintéticos!

## Linear Discriminant Analysis (LDA)

$$Y \sim \text{Cat}(\{c_1, \dots, c_K\}), \quad X|Y = k \sim \mathcal{N}(\mu_k, \Sigma)$$



# Linear Discriminant Analysis

## Expresiones Matemáticas

$$\hat{p}(x) = \sum_{k=1}^K c_k \frac{e^{-\frac{1}{2}(x-\mu_k)^T \Sigma^{-1}(x-\mu_k)}}{(2\pi)^{d_x/2} |\Sigma|^{1/2}}$$
$$\hat{P}(y|x) = \frac{e^{\mu_y^T \Sigma^{-1} x - \frac{1}{2} \mu_y^T \Sigma^{-1} \mu_y + \log(c_y)}}{\sum_{k=1}^K e^{\mu_k^T \Sigma^{-1} x - \frac{1}{2} \mu_k^T \Sigma^{-1} \mu_k + \log(c_k)}}$$

## Relación con Regresión Logística

Si  $w_y = \Sigma^{-1} \mu_y$  y  $b_y = -\frac{1}{2} \mu_y^T \Sigma^{-1} \mu_y + \log(c_y)$ ,  $\hat{P}(y|x)$  es el softmax. LDA utiliza hipótesis más fuertes ya que no solo asume  $\hat{P}(y|x)$  softmax, sino también  $\hat{p}(x)$  mezcla de gaussianas.

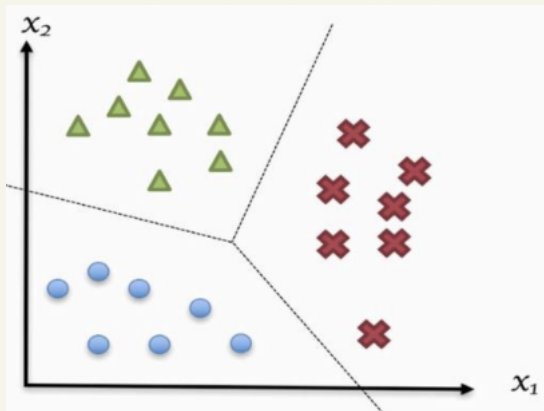


# Regresión Softmax

## Elección del máximo

$$\arg \max_y \hat{P}(y|x) = \arg \max_y w_y^T x + b_y$$

Se separa con hiperplanos!



# Estimación Insegada de Parámetros

## Estimadores

$$\mathcal{D}_k = \{x_i : 1 \leq i \leq n \wedge y_i = k\}$$

$$c_k = \frac{\#(\mathcal{D}_k)}{n}$$

$$\mu_k = \frac{1}{\#(\mathcal{D}_k)} \sum_{x \in \mathcal{D}_k} x$$

$$\Sigma_k = \frac{1}{\#(\mathcal{D}_k) - 1} \sum_{x \in \mathcal{D}_k} (x - \mu_k)(x - \mu_k)^T$$

$$\Sigma = \frac{1}{n - K} \sum_{k=1}^K (\#(\mathcal{D}_k) - 1) \Sigma_k$$

# Quadratic Discriminant Analysis

## Quadratic Discriminant Analysis (QDA)

$$Y \sim \text{Cat}(\{c_1, \dots, c_K\}), \quad X|Y = k \sim \mathcal{N}(\mu_k, \Sigma_k)$$

# Quadratic Discriminant Analysis

## Quadratic Discriminant Analysis (QDA)

$$Y \sim \text{Cat}(\{c_1, \dots, c_K\}), \quad X|Y = k \sim \mathcal{N}(\mu_k, \Sigma_k)$$

## Expresiones Matemáticas

$$\hat{p}(x) = \sum_{k=1}^K c_k \frac{e^{-\frac{1}{2}(x-\mu_k)^T \Sigma_k^{-1}(x-\mu_k)}}{(2\pi)^{d_x/2} |\Sigma_k|^{1/2}}$$

$$\hat{P}(y|x) = \frac{e^{-\frac{1}{2}(x-\mu_y)^T \Sigma_y^{-1}(x-\mu_y) + \log(c_y) - \frac{\log |\Sigma_y|}{2}}}{\sum_{k=1}^K e^{-\frac{1}{2}(x-\mu_k)^T \Sigma_k^{-1}(x-\mu_k) + \log(c_k) - \frac{\log |\Sigma_k|}{2}}}$$

# Quadratic Discriminant Analysis

## Quadratic Discriminant Analysis (QDA)

$$Y \sim \text{Cat}(\{c_1, \dots, c_K\}), \quad X|Y = k \sim \mathcal{N}(\mu_k, \Sigma_k)$$

### Expresiones Matemáticas

$$\hat{p}(x) = \sum_{k=1}^K c_k \frac{e^{-\frac{1}{2}(x-\mu_k)^T \Sigma_k^{-1}(x-\mu_k)}}{(2\pi)^{d_x/2} |\Sigma_k|^{1/2}}$$

$$\hat{P}(y|x) = \frac{e^{-\frac{1}{2}(x-\mu_y)^T \Sigma_y^{-1}(x-\mu_y) + \log(c_y) - \frac{\log |\Sigma_y|}{2}}}{\sum_{k=1}^K e^{-\frac{1}{2}(x-\mu_k)^T \Sigma_k^{-1}(x-\mu_k) + \log(c_k) - \frac{\log |\Sigma_k|}{2}}}$$

Elección del máximo: NO ES LINEAL, ES CUADRÁTICO

$$\arg \max_y -\frac{1}{2}(x - \mu_y)^T \Sigma_y^{-1}(x - \mu_y) + \log(c_y) - \frac{\log |\Sigma_y|}{2}$$

# Outline

- 1 Introducción al problema de clasificación
- 2 Regresión Logística Binaria
- 3 Regresión Logística Categórica
- 4 Linear Discriminant Analysis
- 5 K-Vecinos más cercanos**
- 6 Support Vector Machines
- 7 Árboles de decisión

# Modelos Paramétricos y No Paramétricos

## Clasificación de Algoritmos

- **Modelos Paramétricos:** Asumen conocimiento parcial sobre la distribución, indexándola por parámetros.
- **Modelos No Paramétricos:** No se asume una estructura a priori para la distribución.

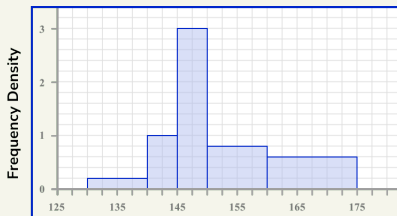
# Modelos Paramétricos y No Paramétricos

## Clasificación de Algoritmos

- **Modelos Paramétricos:** Asumen conocimiento parcial sobre la distribución, indexándola por parámetros.
- **Modelos No Paramétricos:** No se asume una estructura a priori para la distribución.

## Histograma

El histograma asume una densidad constante por regiones. En cada región asigna  $\hat{p}(x) = \frac{K}{n \cdot V}$  donde  $n$  es la cantidad de muestras totales,  $K$  la cantidad de muestras en dicha región y  $V$  el volumen de la región.





## K-Vecinos más cercanos (KNN)

### Adaptando el concepto a aprendizaje supervisado

Asumiendo que  $\hat{P}(y) = \frac{N_y}{n}$  con  $N_y$  el número de muestras de la clase  $y$ , y que (en cada región)  $\hat{p}(x|y) = \frac{K_y}{N_y \cdot V}$  con  $K_y$  la cantidad de muestras que caen en la región de la clase  $y$ , se obtiene:

$$\hat{P}(y|x) = \frac{\hat{p}(x|y)\hat{P}(y)}{\sum_{i=1}^K \hat{p}(x|i)\hat{P}(i)} = \frac{K_y}{K}$$

Es decir, la proporción de muestras de la clase  $y$  en la región.

# K-Vecinos más cercanos (KNN)

## Adaptando el concepto a aprendizaje supervisado

Asumiendo que  $\hat{P}(y) = \frac{N_y}{n}$  con  $N_y$  el número de muestras de la clase  $y$ , y que (en cada región)  $\hat{p}(x|y) = \frac{K_y}{N_y \cdot V}$  con  $K_y$  la cantidad de muestras que caen en la región de la clase  $y$ , se obtiene:

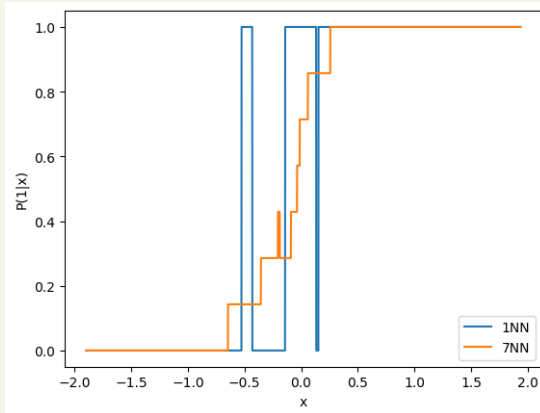
$$\hat{P}(y|x) = \frac{\hat{p}(x|y)\hat{P}(y)}{\sum_{i=1}^K \hat{p}(x|i)\hat{P}(i)} = \frac{K_y}{K}$$

Es decir, la proporción de muestras de la clase  $y$  en la región.

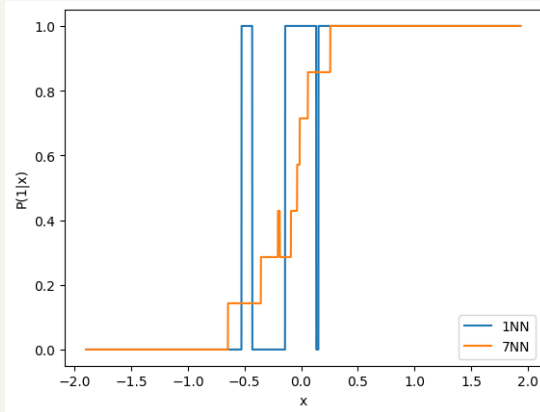
## K-Vecinos más cercanos

KNN fija el valor de vecinos  $K$  y en base a esto define las regiones. Por ejemplo, la región utilizada para computar un *feature*  $x$  es la región centrada en  $x$  que posee  $K$  muestras (las  $K$  más cercanas a  $x$ ).

# K-Vecinos más cercanos (KNN)



## K-Vecinos más cercanos (KNN)



### Elección del máximo

Notar que para quedarse con el máximo de  $\hat{P}(y|x)$  no hace falta computarla. Simplemente se clasifica según sus  $K$  vecinos más cercanos, por mayoría.

# Outline

- 1 Introducción al problema de clasificación
- 2 Regresión Logística Binaria
- 3 Regresión Logística Categórica
- 4 Linear Discriminant Analysis
- 5 K-Vecinos más cercanos
- 6 Support Vector Machines**
- 7 Árboles de decisión

# Support Vector Machines

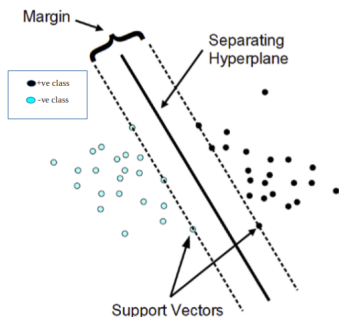
## Clases linealmente separables

Sea la clasificación binaria  $y \in \{-1, 1\}$  y  $z(x) = w^T \cdot x + b = 0$  su frontera de decisión. Decimos que las clases son linealmente separables, si existen  $w$  y  $b$  tales que  $y \cdot z(x) > 0$  para todo  $(x, y) \in \mathcal{D}_n$  (set de entrenamiento). Llamamos  $f_i(w, b) = y_i z(x_i) > 0$  con  $1 \leq i \leq n$ .

# Support Vector Machines

## Clases linealmente separables

Sea la clasificación binaria  $y \in \{-1, 1\}$  y  $z(x) = w^T \cdot x + b = 0$  su frontera de decisión. Decimos que las clases son linealmente separables, si existen  $w$  y  $b$  tales que  $y \cdot z(x) > 0$  para todo  $(x, y) \in \mathcal{D}_n$  (set de entrenamiento). Llamamos  $f_i(w, b) = y_i z(x_i) > 0$  con  $1 \leq i \leq n$ .



- $w$  es ortogonal a la frontera y por lo tanto  $w \parallel (x - x_*)$  con  $x_*$  la proyección ortogonal de  $x$  sobre la frontera.

$$|w^T(x - x_*)| = \|w\| \|x - x_*\|$$

- Dado que  $x_*$  está sobre la frontera,  $w^T(x - x_*) = z(x)$  y por lo tanto:

$$d(x_i) = \|x_i - x_*\| = \frac{|z(x_i)|}{\|w\|} = \frac{y_i \cdot z(x_i)}{\|w\|}$$

# Support Vector Machines

## Margen

Se define el margen unilateral como criterio de peor caso:

$$m(w, b) = \min_{1 \leq i \leq n} \frac{y_i(w^T \cdot x_i + b)}{\|w\|} = \frac{1}{\|w\|} \min_{1 \leq i \leq n} f_i(w, b) = \frac{f_k(w, b)}{\|w\|}$$

con  $k$  un índice óptimo (función de  $w$  y  $b$ ). Por lo tanto, el problema a resolver es maximizar el margen:  $\max_{w, b} m(w, b)$  st.  $f_i(w, b) > 0$  para  $i = 1, \dots, n$ .



# Support Vector Machines

## Margen

Se define el margen unilateral como criterio de peor caso:

$$m(w, b) = \min_{1 \leq i \leq n} \frac{y_i(w^T \cdot x_i + b)}{\|w\|} = \frac{1}{\|w\|} \min_{1 \leq i \leq n} f_i(w, b) = \frac{f_k(w, b)}{\|w\|}$$

con  $k$  un índice óptimo (función de  $w$  y  $b$ ). Por lo tanto, el problema a resolver es maximizar el margen:  $\max_{w, b} m(w, b)$  st.  $f_i(w, b) > 0$  para  $i = 1, \dots, n$ .

## Escala

Sea  $\alpha > 0$ , está claro la decisión  $z(x) \geq 0$  no se ve afectada si reescalamos los parámetros  $w \leftarrow \alpha w$  y  $b \leftarrow \alpha b$ . Esto mismo ocurre con el margen  $m(\alpha w, \alpha b) = m(w, b)$ . Con lo cual no se pierde generalidad al asumir  $f_k(w, b) = 1$ . Luego  $m(w, b) = \frac{1}{\|w\|}$  y  $f_i(w, b) \geq 1$  para todo  $1 \leq i \leq n$ .

Las muestras en las que  $f_i(w, b) = 1$  se denominan vectores soporte.

# Support Vector Machines

## Problema de optimización primal

$$\min_{w,b} \frac{1}{2} \|w\|^2 \quad \text{s.t.} \quad y_i(w^T x_i + b) \geq 1 \quad (\forall 1 \leq i \leq n)$$

# Support Vector Machines

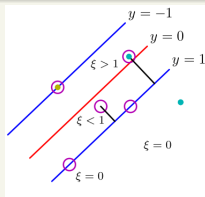
## Problema de optimización primal

$$\min_{w,b} \frac{1}{2} \|w\|^2 \quad \text{s.t.} \quad y_i(w^T x_i + b) \geq 1 \quad (\forall 1 \leq i \leq n)$$

## Relajando los márgenes

Mitigar problemas con outliers. Sea  $C \geq 0$ ,

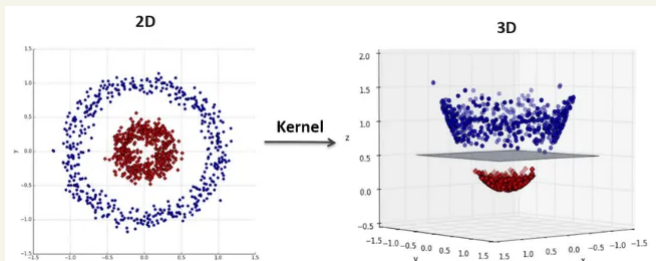
$$\min_{w,b,\xi} \frac{1}{2} \|w\|^2 + C \sum_{i=1}^n \xi_i \quad \text{s.t.} \quad \begin{cases} y_i(w^T x_i + b) \geq 1 - \xi_i \\ \xi_i \geq 0 \end{cases} \quad (\forall 1 \leq i \leq n)$$



# Support Vector Machines

## Generalización a fronteras no lineales

Este método es adaptable a diferentes fronteras  $z(x) = w^T \phi(x) + b$ . Se puede demostrar, que el resultado final del entrenamiento depende de los predictores a través de  $k(x_1, x_2) = \phi^T(x_1)\phi(x_2)$ , función que recibe el nombre de kernel. Es por este motivo que se elige el kernel en lugar de  $\phi(\cdot)$ , siendo el más utilizado en SVM el denominado gaussiano o rbf:  $k(x_1, x_2) = e^{-\gamma \|x_1 - x_2\|^2}$ .



# Support Vector Machines

## Generalización a $K$ -clases

- *one-vs-one*: Se toman todas las combinaciones de pares de clases (son  $\frac{K(K-1)}{2}$ ) y se entrenan clasificadores binarios. Se clasifica seleccionando a la clase con más *votos*.
- *one-vs-the-rest*: Se entrenan  $K$  clasificadores binarios, donde cada uno toma una clase como positiva y el resto como negativa. Se clasifica según  $\arg \max_k w_k^T \phi(x) + b_k$ .

# Support Vector Machines

## Generalización a $K$ -clases

- *one-vs-one*: Se toman todas las combinaciones de pares de clases (son  $\frac{K(K-1)}{2}$ ) y se entrenan clasificadores binarios. Se clasifica seleccionando a la clase con más *votos*.
- *one-vs-the-rest*: Se entrenan  $K$  clasificadores binarios, donde cada uno toma una clase como positiva y el resto como negativa. Se clasifica según  $\arg \max_k w_k^T \phi(x) + b_k$ .

## Generalización a Regresión

$$\min_{w,b} \frac{1}{2} \|w\|^2 \quad \text{s.t.} \quad |w^T x_i + b - y_i| \leq \epsilon \quad (\forall 1 \leq i \leq n)$$

# Optimización Convexa

Tomemos el problema básico de SVM. Sea

$$J_1 = \min_{w,b} \frac{1}{2} \|w\|^2 \quad \text{s.t.} \quad y_i(w^T \phi(x_i) + b) \geq 1 \quad (\forall 1 \leq i \leq n)$$

Dicho problema puede reescribirse usando multiplicadores de Lagrange  $\alpha_i$ :

$$J_1 = \min_{w,b} \max_{\alpha_i \geq 0} \frac{1}{2} \|w\|^2 - \sum_{i=1}^n \alpha_i [y_i(w^T \phi(x_i) + b) - 1]$$

## Vectores Soportes

Notar que, el multiplicador óptimo (la solución del problema) debe cumplir que  $\alpha_i = 0$  para toda muestra que no sea vector soporte. En contraste, para los vectores soporte ocurre que  $y_i(w^T \phi(x_i) + b) = 1$ .

Llamamos problema dual al problema definido a partir de invertir el mínimo y el máximo:

$$J_2 = \max_{\alpha_i \geq 0} \min_{w,b} \frac{1}{2} \|w\|^2 - \sum_{i=1}^n \alpha_i [y_i(w^T \phi(x_i) + b) - 1]$$

# Optimización Convexa

## Teorema: Weak and Strong duality

Para cualquier problema de optimización  $J_1 \geq J_2$ . En el caso particular del problema de SVM, por ser convexo, se obtiene que  $J_1 = J_2$ .

Fijo los multiplicadores  $\alpha_i \geq 0$ , igualamos a cero la derivada respecto de los parámetros para buscar el mínimo:

- $w - \sum_{i=1}^n \alpha_i y_i \phi(x_i) = 0 \quad \rightarrow \quad w = \sum_{i=1}^n \alpha_i y_i \phi(x_i)$

- $-\sum_{i=1}^n \alpha_i y_i = 0 \quad \rightarrow \quad \sum_{i=1}^n \alpha_i y_i = 0$

La suma dentro de  $J_2$  queda como:

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^n \alpha_i [y_i (w^T \phi(x_i) + b) - 1] &= \sum_{i=1}^n \alpha_i y_i w^T \phi(x_i) + \sum_{i=1}^n \alpha_i y_i b - \sum_{i=1}^n \alpha_i \\ &= \|w\|^2 + 0 - \sum_{i=1}^n \alpha_i \end{aligned}$$



# Optimización Convexa

La función a optimizar se puede reescribir como

$$\frac{1}{2}\|w\|^2 - \sum_{i=1}^n \alpha_i [y_i(w^T \phi(x_i) + b) - 1] = \left( \sum_{i=1}^n \alpha_i \right) - \frac{1}{2}\|w\|^2$$

La norma cuadrática puede vectorizarse como

$$\|w\|^2 = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \alpha_i \alpha_j y_i y_j \phi(x_i)^T \phi(x_j) = \alpha^T Q \alpha$$

donde  $Q$  es una matriz de elementos  $Q_{i,j} = y_i y_j \phi(x_i)^T \phi(x_j)$  (depende de los predictores a través del kernel). Entonces, el problema se reduce a:

## Problema de optimización dual

$$\max_{\alpha} \alpha^T \mathbf{1} - \frac{1}{2} \alpha^T Q \alpha \quad \text{s.t.} \quad \alpha^T y = 0, \quad \alpha_i \geq 0$$

Por cuestiones numéricas, suele traer complicaciones detectar vectores soportes como  $\alpha_i > 0$ . En la práctica suele compararse  $\alpha_i > \epsilon$  con  $\epsilon > 0$  un número pequeño.

## Bias

Sea  $\mathcal{S}$  el conjunto de índices de vectores soporte y  $N_{\mathcal{S}}$  la cantidad de elementos de dicho conjunto; luego  $y_i(w^T \phi(x_i) + b) = 1 \forall i \in \mathcal{S}$  y  $\alpha_i = 0 \forall i \notin \mathcal{S}$ . El bias solo depende de los predictores a través del kernel:

$$b = \frac{1}{N_{\mathcal{S}}} \sum_{i \in \mathcal{S}} (y_i - w^T \phi(x_i)) = \frac{1}{N_{\mathcal{S}}} \sum_{i \in \mathcal{S}} \left( y_i - \sum_{j \in \mathcal{S}} \alpha_j y_j \phi(x_j)^T \phi(x_i) \right)$$

## Regla de decisión

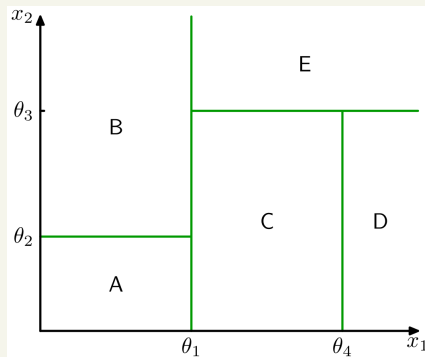
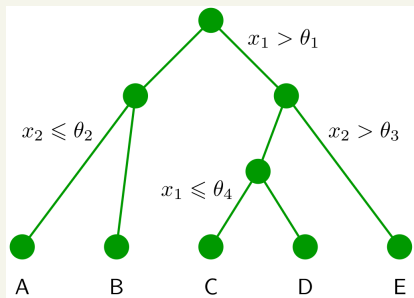
Una vez entrenado, la regla de decisión para evaluar el signo de  $z(x)$ . Dicha decisión solo depende de los predictores a través del kernel:

$$z(x) = \sum_{j \in \mathcal{S}} \alpha_j y_j \phi(x_j)^T \phi(x) + b$$

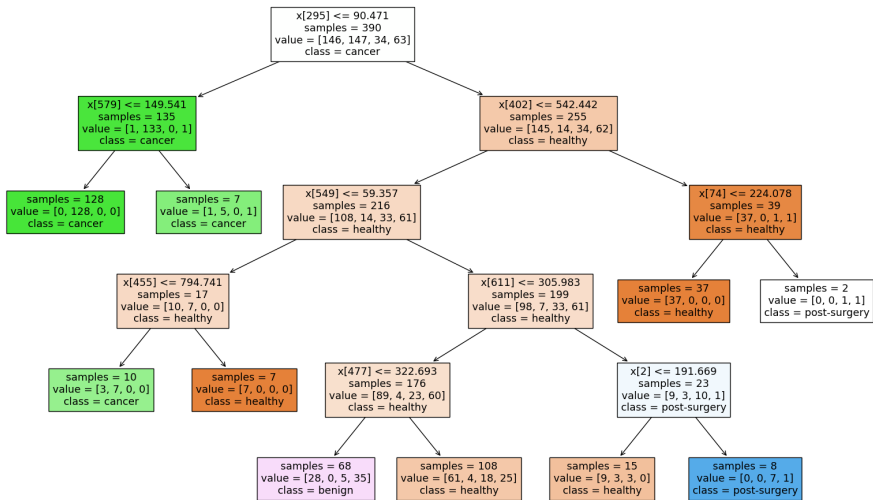
# Outline

- 1 Introducción al problema de clasificación
- 2 Regresión Logística Binaria
- 3 Regresión Logística Categórica
- 4 Linear Discriminant Analysis
- 5 K-Vecinos más cercanos
- 6 Support Vector Machines
- 7 Árboles de decisión**

# CART: Classification and Regression Trees



# Árboles de decisión



# Árboles de decisión

## Modelado matemático por nodo

Llamamos:

- $Q_m$  al conjunto de datos en el nodo  $m$ .
- $Q_m^L(j_m, t_m) = \{(x, y) \in Q_m : x_{j_m} \leq t_m\}$ .
- $Q_m^R(j_m, t_m) = \{(x, y) \in Q_m : x_{j_m} > t_m\}$ .
- $H(Q_m)$  a la función impureza del conjunto  $Q_m$ .
- $G_m(j_m, t_m) = \frac{|Q_m^L(j_m, t_m)|}{|Q_m|} H(Q_m^L(j_m, t_m)) + \frac{|Q_m^R(j_m, t_m)|}{|Q_m|} H(Q_m^R(j_m, t_m))$ .
- Busco para cada nodo  $(j_m^*, t_m^*) = \arg \min_{j_m, t_m} G_m(j_m, t_m)$

# Árboles de decisión

## Modelado matemático por nodo

Llamamos:

- $Q_m$  al conjunto de datos en el nodo  $m$ .
- $Q_m^L(j_m, t_m) = \{(x, y) \in Q_m : x_{j_m} \leq t_m\}$ .
- $Q_m^R(j_m, t_m) = \{(x, y) \in Q_m : x_{j_m} > t_m\}$ .
- $H(Q_m)$  a la función impureza del conjunto  $Q_m$ .
- $G_m(j_m, t_m) = \frac{|Q_m^L(j_m, t_m)|}{|Q_m|} H(Q_m^L(j_m, t_m)) + \frac{|Q_m^R(j_m, t_m)|}{|Q_m|} H(Q_m^R(j_m, t_m))$ .
- Busco para cada nodo  $(j_m^*, t_m^*) = \arg \min_{j_m, t_m} G_m(j_m, t_m)$

## Funciones impurezas habituales

Sea  $p_{m,k}$  la proporción de muestras de la clase  $k$  en el nodo  $m$ :

- Gini:  $H(Q_m) = \sum_k p_{m,k} (1 - p_{m,k})$ .
- Entropía:  $H(Q_m) = \sum_k -p_{m,k} \log_2(p_{m,k})$ .

# Árboles de decisión

## Condiciones de Parada

- Todas las observaciones tienen la misma etiqueta.
- Si la rama tiene menos de un número preestablecido de observaciones.
- Otras (ver documentación).



# Árboles de decisión

## Condiciones de Parada

- Todas las observaciones tienen la misma etiqueta.
- Si la rama tiene menos de un número preestablecido de observaciones.
- Otras (ver documentación).

## Variables Categóricas

Dada la característica binaria de los árboles, estas variables se codifican en estructuras binarias (ej. *one hot encoding*).

# Árboles de decisión

## Condiciones de Parada

- Todas las observaciones tienen la misma etiqueta.
- Si la rama tiene menos de un número preestablecido de observaciones.
- Otras (ver documentación).

## Variables Categóricas

Dada la característica binaria de los árboles, estas variables se codifican en estructuras binarias (ej. *one hot encoding*).

## Importancia de cada Feature

La *Gini Importance* se define como la disminución total de la impureza del nodo, ponderada por la probabilidad de llegar a ese nodo (normalizado).

# Árboles de decisión

## Problemas de regresión

Modelando la función regresión como constante por regiones, este método puede ser adaptado. Como función impureza suele usarse el error cuadrático medio:

$$H(Q_m) = \sum_{(x,y) \in Q_m} (y - \bar{y}_m)^2$$

donde  $\bar{y}_m$  es el promedio de las  $y$  en  $Q_m$ .

# Árboles de decisión

## Problemas de regresión

Modelando la función regresión como constante por regiones, este método puede ser adaptado. Como función impureza suele usarse el error cuadrático medio:

$$H(Q_m) = \sum_{(x,y) \in Q_m} (y - \bar{y}_m)^2$$

donde  $\bar{y}_m$  es el promedio de las  $y$  en  $Q_m$ .

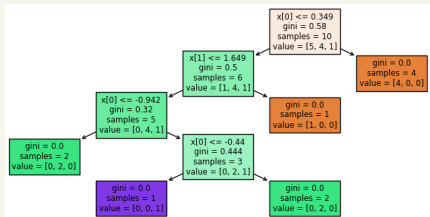
## Podado: Regularización

Sea  $T$  un árbol determinado (sin condiciones de parado fuertes),  $L(T)$  su respectivo conjunto de hojas y  $\alpha$  el parámetro de complejidad. Se denomina medida de costo-complejidad a

$$H_\alpha(T) = \sum_{m \in L(T)} \frac{|Q_m|}{n} \cdot H(Q_m) + \alpha \cdot |L(T)|$$

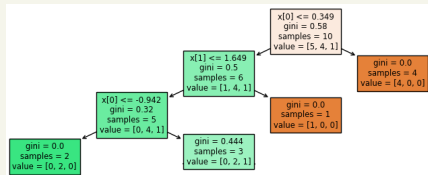
La poda se basa en quedarse con el subárbol de menor costo-complejidad.

$T_1$



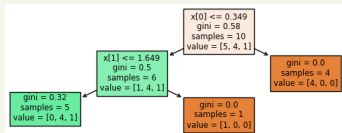
$$H_{\alpha}(T) = 0 + 5\alpha$$

$T_2$



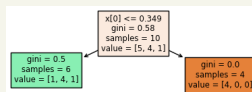
$$H_{\alpha}(T) = 0.13 + 4\alpha$$

$T_3$



$$H_{\alpha}(T) = 0.16 + 3\alpha$$

$T_4$



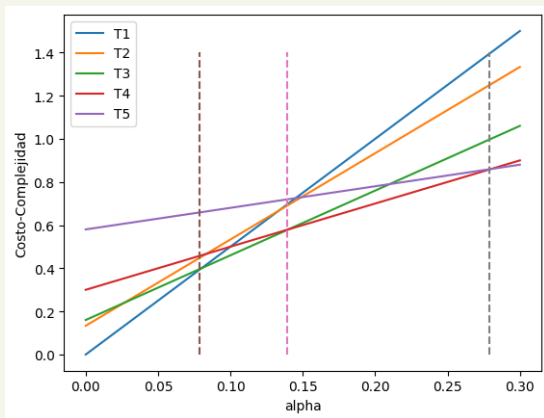
$$H_{\alpha}(T) = 0.3 + 2\alpha$$

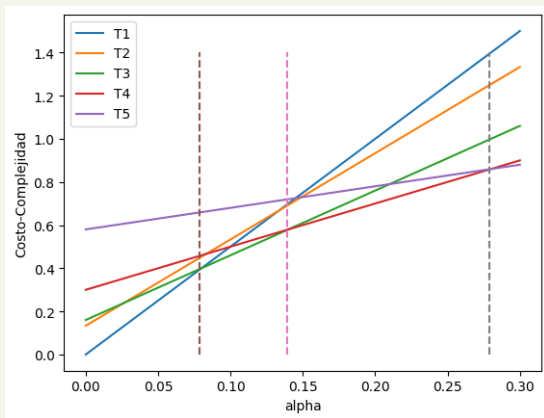
$T_5$



$$H_{\alpha}(T) = 0.58 + \alpha$$

# Poda





- La cantidad de candidatos a óptimos es menor a la cantidad de subárboles (el  $T_2$  nunca es el de menor costo-complejidad).
- El subárbol se elige por validación (típicamente sobre el error de clasificación) comparando todos los casos posibles (en este caso 4 candidatos).

# Bosques aleatorios

## Bagging

El problema de los árboles de decisión es el *overfitting*. Las condiciones de stop y la poda ayudan a combatirlo, pero muchas veces no son suficiente. Es por eso que surge *Bagging*: Entrenar múltiples algoritmos y decidir por mayoría o promedio (en clasificación o regresión respectivamente). Un algoritmo de múltiples árboles se llama bosque.

## ¿Por que promediar?

- El promedio mantiene la esperanza y reduce la varianza en muestras i.i.d:

$$\mathbb{E} \left[ \frac{1}{B} \sum_{b=1}^B Z_b \right] = \mu, \quad \text{var} \left( \frac{1}{B} \sum_{b=1}^B Z_b \right) = \frac{\sigma^2}{B}$$

- En clasificación, si se piensan etiquetas en codificación *one-hot*, promediar para luego elegir el máximo equivale a elegir la respuesta mayoritaria.



## Bosques aleatorios

Se desea entrenar varios algoritmos (de manera que sean variados). Para asegurar ésto, se toman dos decisiones:

### No usar todos los features

En lugar de usar todos los  $d_x$  *features*, para asegurar variedad en los árboles, para cada nodo se eligen al azar  $\sqrt{d_x}$  *features*.

## Bosques aleatorios

Se desea entrenar varios algoritmos (de manera que sean variados). Para asegurar ésto, se toman dos decisiones:

### No usar todos los features

En lugar de usar todos los  $d_x$  features, para asegurar variedad en los árboles, para cada nodo se eligen al azar  $\sqrt{d_x}$  features.

### Bootstrap

Generar  $B$  conjuntos de datos diferentes del mismo tamaño que el dataset original  $n$ . Para esto, se utiliza una técnica llamada Bootstrap: Se eligen al azar  $n$  datos del conjunto *con reposición* y se arma cada conjunto Bootstrap, de manera que la probabilidad que un dato no esté en el conjunto es del  $\approx 37\%$  :

$$\left(1 - \frac{1}{n}\right)^n \rightarrow e^{-1}$$