Università di Verona

A.A. 2020-21

Machine Learning & Artificial Intelligence

Teoria della decisione di Bayes

Vittorio Murino

Rev. Thomas Bayes, F.R.S (1702-1761)

Introduzione

- Approccio statistico fondamentale di classificazione di pattern
- Ipotesi:
  1. Il problema di decisione è posto in termini probabilistici;
  2. Tutte le probabilità rilevanti sono conosciute;
- Goal:

  Discriminare le differenti ***regole di decisione*** usando le ***probabilità*** ed i ***costi*** ad esse associati;

- Il problema di classificazione non è diverso dalla regressione:
  - dato $\mathbf{x}$ bisogna stimare il relativo valore di y dove y è **continuo** nei problemi di regressione, mentre nei problemi di classificazione è **discreto** (etichette della classe)

- Stimare la probabilità congiunta $p(\mathbf{x}, \mathrm{y})$ dall'insieme di dati di training è un classico problema di *inferenza*

- Molte volte non è richiesto e il problema consiste nel predire un valore di y associato ad un certo $\mathbf{x}$, oppure più in generale prendere una **decisione** (**azione**) basata sulla predizione del valore di y.

Un esempio semplice

- Sia ω lo ***stato di natura*** da descrivere probabilisticamente
- Siano date:
  1. Due classi ω_1 and ω_2 per cui sono note
     a) $P(\omega = \omega_1) = 0.7$
     b) $P(\omega = \omega_2) = 0.3$
  2. Nessuna misurazione.

→ **Probabilità a priori** o **Prior**

- Regola di decisione:
  - Decidi ω_1 se $P(\omega_1) > P(\omega_2)$; altrimenti decidi ω_2

- Più che decidere, *indovino* lo stato di natura.

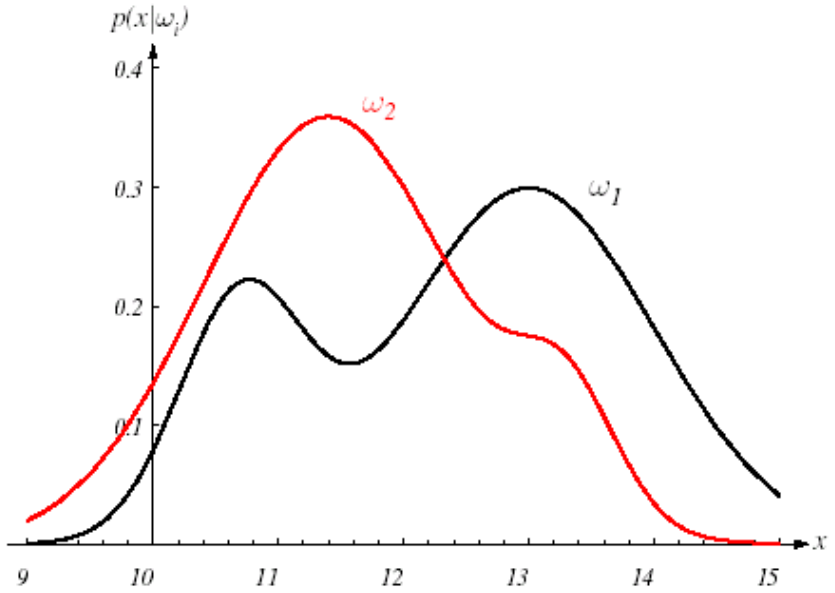
Altro esempio – Formula di Bayes

- Nell'ipotesi precedente, con in in più la singola misurazione x, v.a. dipendente da ω_j, posso ottenere

$$p(x \mid \omega_j)_{j=1,2}$$ = **Likelihood, o densità di probabilità stato-condizionale** *(class-conditional probability density function)*

ossia *la probabilità di avere la misurazione x sapendo che lo stato di natura è* ω_j.

Fissata la misurazione x più è alta $p(x|\omega_j)$ più è probabile che ω_j sia lo stato "giusto".



Altro esempio – Formula di Bayes (2)

- Note $P(\omega_j)$ e $p(x|\omega_j)$, la decisione dello stato di natura diventa, per Bayes

$$p(\omega_j, x) = P(\omega_j \mid x)\, p(x) = p(x \mid \omega_j) P(\omega_j)$$

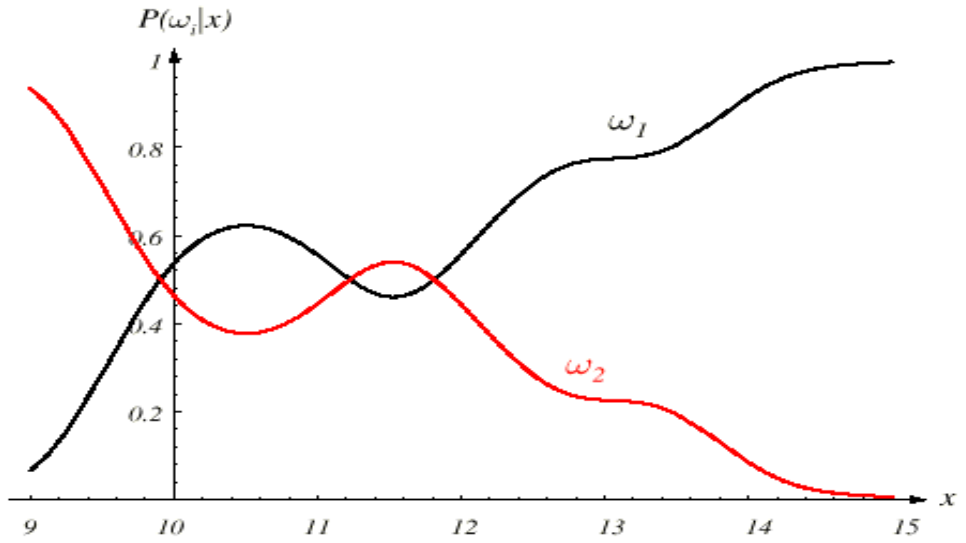
ossia

$$P(\omega_j \mid x) = \frac{p(x \mid \omega_j) P(\omega_j)}{p(x)} \propto p(x \mid \omega_j) P(\omega_j)$$

dove:

- $P(\omega_j)$ = Prior
- $p(x \mid \omega_j)$ = Likelihood
- $P(\omega_j \mid x)$ = ***Posterior***
- $p(x) = \sum_{j=1}^{J} p(x \mid \omega_j) P(\omega_j)$

= ***Evidenza***



Regola di decisione di Bayes

$$P(\omega_j \mid x) = \frac{p(x \mid \omega_j)P(\omega_j)}{p(x)} \quad \Leftrightarrow \quad posterior = \frac{likelihood \times prior}{evidence}$$

important

constant

- Ossia il *Posterior* o ***probabilità a posteriori*** è *la probabilità che lo stato di natura sia* ω_j *data l'osservazione x.*
- Il fattore più importante è il prodotto $likelihood \times prior$;
  l'evidenza $p(x)$ è semplicemente un fattore di scala, che assicura che

$$\sum_j P(\omega_j \mid x) = 1$$

- Dalla formula di Bayes deriva ***la regola di decisione di Bayes:***

Decidi ω_1 se $P(\omega_1|x) > P(\omega_2|x)$, ω_2 altrimenti

Decidi la probabilità maggiore tra le due

Regola di decisione di Bayes (2)

- Per dimostrare l'efficacia della regola di decisione di Bayes:

1) Definisco la *probabilità d'errore* annessa a tale decisione:

$$P(error \mid x) = \begin{cases} P(\omega_1 \mid x) & \text{se decido } \omega_2 \\ P(\omega_2 \mid x) & \text{se decido } \omega_1 \end{cases}$$

→ inverso rispetto alla probabilità di prima

2) Dimostro che ***la regola di decisione di Bayes minimizza la probabilità d'errore.***

   Decido ω_1 se $P(\omega_1 \mid x) > P(\omega_2 \mid x)$ e viceversa.

3) Quindi se voglio ***minimizzare la probabilità media di errore*** su tutte le osservazioni possibili,

$$P(error) = \int_{-\infty}^{+\infty} P(error, x)dx = \int_{-\infty}^{+\infty} P(error \mid x)\, p(x)dx$$

   se per ogni *x* prendo *P(error|x)* più piccola possibile mi assicuro la probabilità d'errore minore (come detto il fattore *p(x)* è ininfluente).

Regola di decisione di Bayes (3)

In questo caso tale probabilità d'errore diventa

$$P(error|x)=min[P(\omega_1|x), P(\omega_2|x)]$$

Questo mi assicura che la regola di decisione di Bayes

Decidi ω_1 se $P(\omega_1|x) > P(\omega_2|x)$, ω_2 altrimenti

minimizza l'errore!

- ***Regola di decisione equivalente***:
  - La forma della regola di decisione evidenzia *l'importanza della probabilità a posteriori*, e sottolinea *l'ininfluenza dell'evidenza*, un fattore di scala che mostra quanto frequentemente si osserva un pattern *x*; eliminandola, si ottiene la equivalente regola di decisione:

    Decidi ω_1 se $p(x|\omega_1)P(\omega_1) > p(x|\omega_2)P(\omega_2)$, ω_2 altrimenti

Estensione della teoria di decisione di Bayes

- È possibile estendere l'approccio Bayesiano utilizzando:
  - Più di un tipo di osservazioni o **feature** x , per es., *peso*, *altezza*, ...

$$x \rightarrow \mathbf{x} = \{x_1, x_2, ..., x_d\}, \mathbf{x} \in \mathrm{R}^d \quad \text{con } \mathrm{R}^d \quad \textbf{\textit{spazio delle feature}}$$

  - Più di due stati di natura o **categorie**

$$\omega_1, \omega_2 \rightarrow \{\omega_1, \omega_2, ..., \omega_c\}$$

può essere esteso a più classi

  - **Azioni diverse**, oltre alla scelta degli stati di natura

$$\{\alpha_1, \alpha_2, ..., \alpha_a\}$$

  - Una **funzione di costo** più generale della probabilità di errore, ossia $\lambda(\alpha_i \mid \omega_j)$ che descrive il costo (o la perdita) dell'azione α_i quando lo stato è ω_j

Estensione della teoria di decisione di Bayes (2)

- Le estensioni mostrate non cambiano la forma della probabilità a posteriori, che rimane:

cambio che x è un vettore di feature

$$P(\omega_j \mid \mathbf{x}) = \frac{p(\mathbf{x} \mid \omega_j) P(\omega_j)}{p(\mathbf{x})} \quad , \mathbf{x} = \{x_1, x_2, ..., x_d\}, \mathbf{x} \in \mathrm{R}^d$$

- Supponiamo di osservare un particolare **x**, e decidiamo di effettuare l'azione α_i : per definizione, saremo soggetti alla perdita $\lambda(\alpha_i \mid \omega_j)$.

  Data l'indeterminazione di ω_j , la perdita attesa (o ***rischio***) *associata a questa decisione* sarà:

sommatoria delle perdite associate ad alfa_i

$$R(\alpha_i \mid \mathbf{x}) = \sum_{j=1}^{c} \lambda(\alpha_i \mid \omega_j) P(\omega_j \mid \mathbf{x}) \qquad \textbf{\textit{Rischio condizionale}}$$

- In questo caso la teoria di decisione di Bayes indica di effettuare l'azione che minimizza il rischio condizionale ossia, formalmente, una *funzione di decisione* $\alpha(\mathbf{x})$ tale che:

$$\alpha(\mathbf{x}) \rightarrow \alpha_i \, , \alpha_i \in \{\alpha_1, \alpha_2, ..., \alpha_a\}$$, tale che $R(\alpha_i \mid \mathbf{x})$ sia minimo.

Estensione della teoria di decisione di Bayes (3)

- Per valutare una simile funzione si introduce il ***Rischio complessivo,*** ossia *la perdita attesa data una regola di decisione*.

  Dato che $R(\alpha_i \mid \mathbf{x})$ è il rischio condizionale associato all'azione e visto che la regola di decisione specifica l'azione, il rischio complessivo risulta

$$R = \int R(\alpha(\mathbf{x}) \mid \mathbf{x})\, p(\mathbf{x})\, d\mathbf{x}$$

integrale del rischio condiz. · probab. di x

- Chiaramente, se $\alpha(\mathbf{x})$ viene scelto in modo che $R(\alpha_i \mid \mathbf{x})$ sia il minore possibile per ogni $\mathbf{x}$, il rischio complessivo viene minimizzato. Quindi la regola di decisione di Bayes estesa è:

1) *Calcola* $R(\alpha_i \mid \mathbf{x}) = \sum_{j=1}^{c} \lambda(\alpha_i \mid \omega_j) P(\omega_j \mid \mathbf{x})$

2) *Scegli l'azione* $i^* = \arg\min_i R(\alpha_i \mid \mathbf{x})$

Il risultante rischio complessivo minimo prende il nome di ***Rischio di Bayes*** R^* ed *è la migliore performance che può essere raggiunta.*

il rischio è anche collegato al tipo di azione, non solo alle classi

Problemi di classificazione a due categorie

- Consideriamo la regola di decisione di Bayes applicata ai problemi di classificazione con due stati di natura possibili ω_1, ω_2, con α_i → lo stato giusto è ω_i. Per definizione, $\lambda_{ij}=\lambda(\alpha_i \mid \omega_j)$.
- Il rischio condizionale diventa

condiz
Rischio dell'azione

$$1= R(\alpha_1 \mid \mathbf{x}) = \lambda_{11}P(\omega_1 \mid \mathbf{x}) + \lambda_{12}P(\omega_2 \mid \mathbf{x})$$

$$2= R(\alpha_2 \mid \mathbf{x}) = \lambda_{21}P(\omega_1 \mid \mathbf{x}) + \lambda_{22}P(\omega_2 \mid \mathbf{x})$$

- Vi sono molti modi *equivalenti* di esprimere la regola di decisione di minimo rischio, ognuno con i propri vantaggi:
  - *Forma fondamentale*: scegli ω_1 se $R(\alpha_1 \mid \mathbf{x}) < R(\alpha_2 \mid \mathbf{x})$
  - In termini di *probabilità a posteriori* scegli ω_1 se

$$(\lambda_{21} - \lambda_{11})P(\omega_1 \mid \mathbf{x}) > (\lambda_{12} - \lambda_{22})P(\omega_2 \mid \mathbf{x}).$$

Problemi di classificazione a due categorie (2)

- Ordinariamente, la perdita per una decisione sbagliata è maggiore della perdita per una decisione giusta, pertanto

$$(\lambda_{21} - \lambda_{11}), (\lambda_{12} - \lambda_{22}) > 0$$

- Quindi, in pratica, la nostra decisione è determinata dallo stato di natura più probabile (indicato dalla probabilità a posteriori), sebbene scalato dal fattore differenza (comunque positivo) dato dalle perdite.
- Utilizzando Bayes, sostituiamo la probabilità a posteriori con

$$(\lambda_{21} - \lambda_{11}) P(\omega_1 \mid \mathbf{x}) > (\lambda_{12} - \lambda_{22}) P(\omega_2 \mid \mathbf{x}).$$

$$(\lambda_{21} - \lambda_{11}) p(\mathbf{x} \mid \omega_1) P(\omega_1) > (\lambda_{12} - \lambda_{22}) p(\mathbf{x} \mid \omega_2) P(\omega_2).$$

ottenendo la forma equivalente *dipendente da prior e densità condizionali*

Problemi di classificazione a due categorie (3)

- Un'altra forma alternativa, valida per l'assunzione ragionevole che $\lambda_{21} > \lambda_{11}$ è decidere ω_1 se

$$(\lambda_{21} - \lambda_{11}) p(\mathbf{x} \mid \omega_1) P(\omega_1) > (\lambda_{12} - \lambda_{22}) p(\mathbf{x} \mid \omega_2) P(\omega_2).$$

costante *

Rapporto tra probabilità

$$\frac{p(\mathbf{x} \mid \omega_1)}{p(\mathbf{x} \mid \omega_2)} > \frac{\lambda_{12} - \lambda_{22}}{\lambda_{21} - \lambda_{11}} \frac{P(\omega_2)}{P(\omega_1)}$$

dipende dalla perdite e prob. a priori

Questa forma di regola di decisione si focalizza sulla dipendenza da **x** dalle densità di probabilità. Consideriamo $p(\mathbf{x}|\omega_j)$ una funzione di ω_j cioè la funzione di likelihood, e formiamo il *likelihood ratio*, che traduce la regola di Bayes come *la scelta di ω_1 se il rapporto di likelihood supera una certa soglia,* scelta indipendente dall'osservazione **x**.

* questo termine NON dipende dalle osservazioni x

Classificazione *Minimum Error Rate*

- Nei problemi di classificazione, ogni stato è associato ad una delle *c* classi ω_j e le azioni α_i significano che " lo stato giusto è ω_i ".
- La funzione perdita associata a questo caso viene definita ***di perdita 0-1*** o ***simmetrica***

$$\lambda(\alpha_i \mid \omega_j) = \begin{cases} 0 & \text{se} \quad i = j \\ 1 & \text{se} \quad i \neq j \end{cases}$$

→ 0 nella diagonale

→ 1 in antidiagonale

- Il rischio corrispondente a questa funzione di perdita è *la probabilità media di errore*, dato che il rischio condizionale è

$$R(\alpha_i \mid \mathbf{x}) = \sum_{j=1}^{c} \lambda(\alpha_i \mid \omega_j) P(\omega_j \mid \mathbf{x}) =$$

$$= \sum_{j \neq i}^{c} P(\omega_j \mid \mathbf{x}) = 1 - P(\omega_i \mid \mathbf{x})$$

1 - probabilità a posteriori della classificazione corretta

e $P(\omega_i \mid \mathbf{x})$ è la probabilità che l'azione α_i sia corretta.

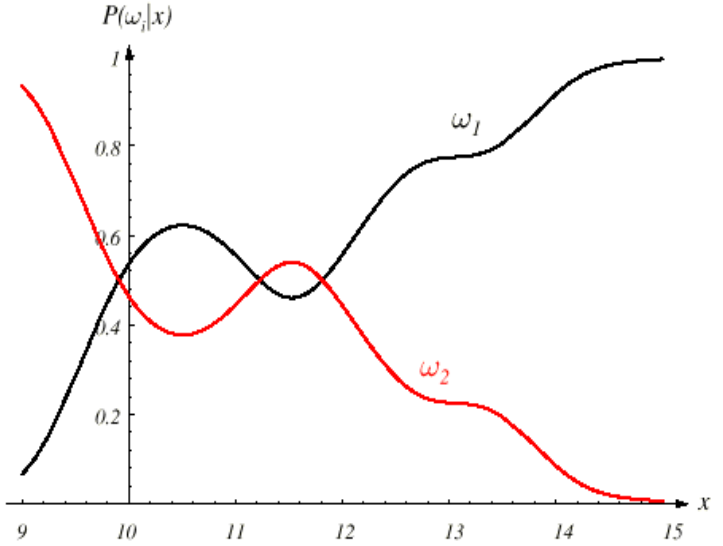
Classificazione Minimum Error Rate (2)

- Per minimizzare il rischio totale ossia in questo caso minimizzare la probabilità media di errore, dobbiamo scegliere i che *massimizzi* la probabilità a posteriori $P(\omega_i \mid \mathbf{x})$, ossia, per il ***Minimum Error Rate***:

Decidi ω_i se $P(\omega_i|\mathbf{x}) > P(\omega_j|\mathbf{x})$ $\quad$ *per ogni* $j \neq i$

Recap

Formula di Bayes $$P(\omega_j \mid \mathbf{x}) = \frac{p(\mathbf{x} \mid \omega_j) P(\omega_j)}{p(\mathbf{x})}$$



Regola di decisione di Bayes:

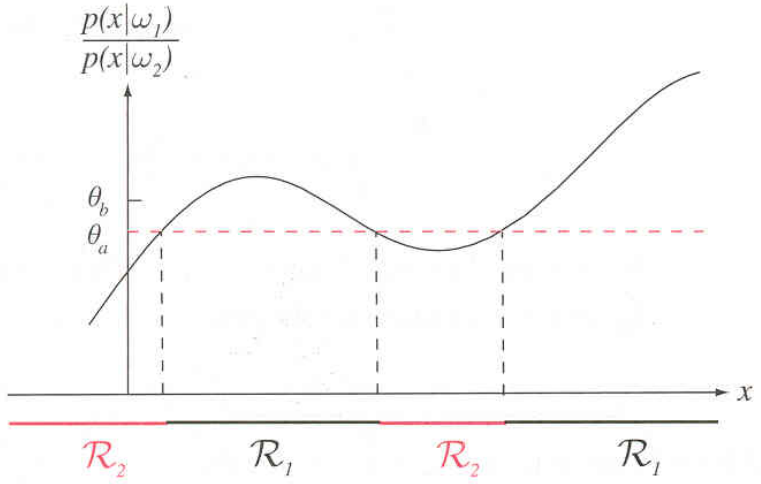
Decidi ω_1 se $P(\omega_1|\mathbf{x}) > P(\omega_2|\mathbf{x})$, ω_2 altrimenti,

equiv. $p(\mathbf{x}|\omega_1)P(\omega_1) > p(\mathbf{x}|\omega_2)P(\omega_2)$

Con la funzione di perdita, la regola non cambia

Decidi ω_1 se $(\lambda_{21} - \lambda_{11}) p(\mathbf{x} \mid \omega_1) P(\omega_1) > (\lambda_{12} - \lambda_{22}) p(\mathbf{x} \mid \omega_2) P(\omega_2)$, ω_2 altrimenti

e permette di minimizzare il rischio!



Mettendo a rapporto le likelihood ho

$$\frac{p(\mathbf{x} \mid \omega_1)}{p(\mathbf{x} \mid \omega_2)} > \frac{\lambda_{12} - \lambda_{22}}{\lambda_{21} - \lambda_{11}} \frac{P(\omega_2)}{P(\omega_1)}$$

in cui può essere (Minimum Error Rate)

$$\lambda_{ij} = \lambda(\alpha_i \mid \omega_j) = \begin{cases} 0 & \text{se i} = \text{j} \\ 1 & \text{se i} \neq \text{j} \end{cases}$$

da cui mi ricollego alla regola iniziale!

Teoria della decisione

- Quindi il problema può essere scisso in una fase di *inferenza* in cui si usano i dati per addestrare un modello $p(\omega_k|\mathbf{x})$ e una seguente fase di *decisione*, in cui si usa la *posterior* per fare la scelta della classe
- Un'alternativa è quella di risolvere i 2 problemi contemporaneamente e addestrare una funzione che mappi l'input $\mathbf{x}$ direttamente nello spazio delle decisioni, cioè delle classi

  → **funzioni discriminanti**
- Esistono 3 approcci per risolvere il problema della decisione (in ordine decrescente di complessità):
  1. Risolvere prima il problema di inferenza per determinare le densità *class-conditional* per ogni singola classe, inferire anche i *prior* e quindi usare Bayes per trovare la *posterior* e quindi determinare la classe (sulla base della teoria della decisione)

- Alternativamente si può modellare direttamente la congiunta $p(\mathbf{x}, \omega_k)$ e quindi normalizzare per ottenere la *posterior*

  ➔ **Modelli generativi** ~> Abbiamo il completo controllo delle probabilità

2. Risolvere prima il problema di inferenza per determinare *direttamente* la *posterior* e quindi usare la teoria della decisione per decidere la classe

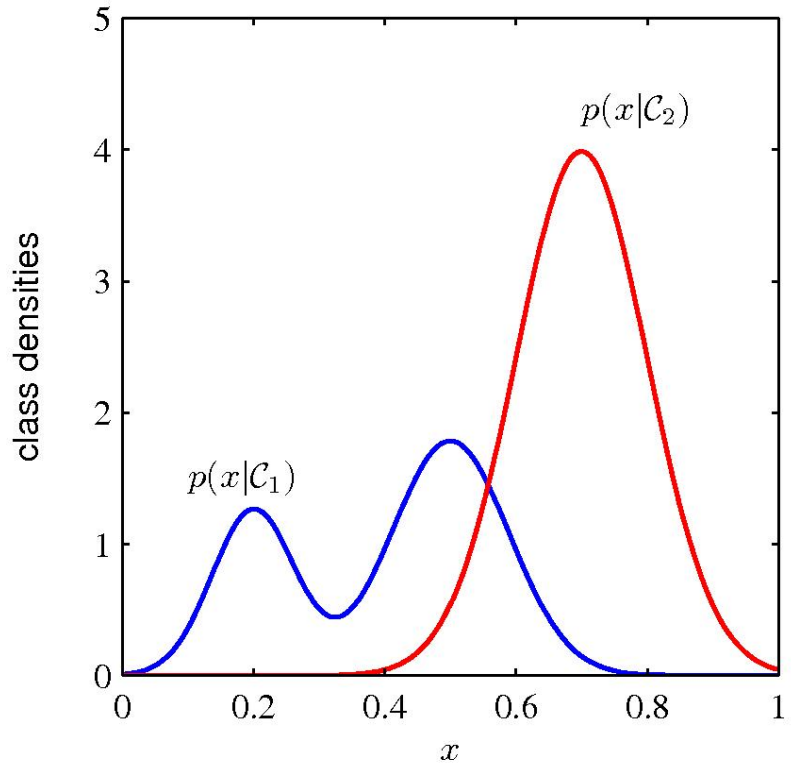
   ➔ **Modelli discriminativi** ~> Metodo più performante

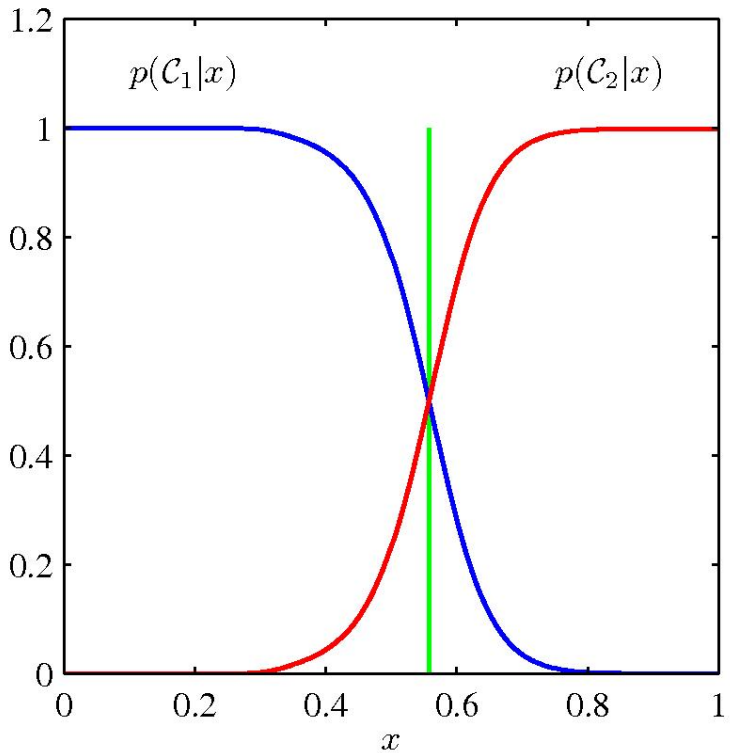
3. Trovare una funzione $f(\mathbf{x})$, chiamata *funzione discriminante*, che mappi l'input $\mathbf{x}$ direttamente nell'etichetta di una classe

   ↳ mappare direttamente x nella classe, senza passare per la probabilità

- Ogni approccio ha svantaggi e vantaggi.
- I metodi generativi sono più complessi, richiedono "buoni" training set, ma hanno il vantaggio di poter manipolare tutte le variabili in gioco.
- Ma quando il problema è di classificazione (decisione, azione) allora i metodi discriminativi sono più efficienti, anche perchè a volte le probabilità *class-conditional* hanno un profilo complesso ma che non influisce sulla *posterior*
- Ancora meglio sarebbe usare le funzioni discriminanti, ovvero trovare direttamente la superficie di separazione tra le classi

ogni approccio ne ha bisogno, ma questi in modo particolare


class densities
$p(x|\mathcal{C}_2)$
$p(x|\mathcal{C}_1)$
x


$p(\mathcal{C}_1|x)$
$p(\mathcal{C}_2|x)$
x

- Tuttavia, stimare la *posterior* è molte volte utile in quanto:
  - si minimizza il rischio quando la matrice di perdita cambia nel tempo;
  - si compensano i *prior* delle classi quando il training set è sbilanciato;
  - si combinano i modelli nel caso in cui un problema complesso debba essere suddiviso in problemi più semplici e quindi "fondere" i risultati (*naive Bayes* sotto l'ipotesi di indipendenza condizionale)

Separare le prob dati due feat. vectors

$$p(\omega_j \mid \mathbf{x}_A, \mathbf{x}_B) \propto p(\mathbf{x}_A, \mathbf{x}_B \mid \omega_j) p(\omega_j)$$

$$\propto p(\mathbf{x}_A \mid \omega_j) p(\mathbf{x}_B \mid \omega_j) p(\omega_j) \quad \textit{naive Bayes}$$

Divido in due problemi indipendenti tra loro

$$\propto \frac{p(\omega_j \mid \mathbf{x}_A) p(\omega_j \mid \mathbf{x}_B)}{p(\omega_j)}$$

Classificatori, funzioni discriminanti e superfici di separazione

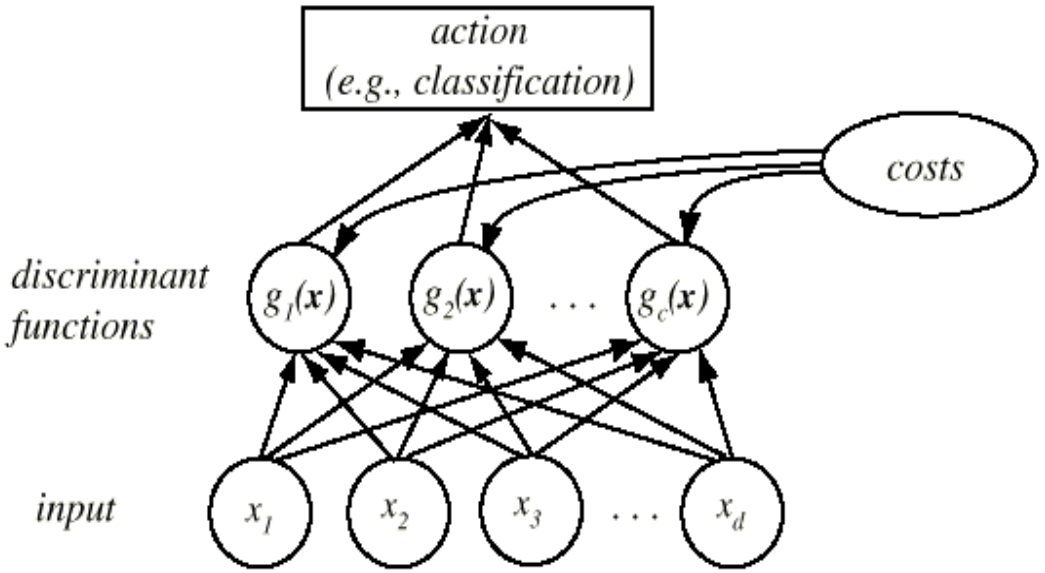
- Uno dei vari metodi per rappresentare classificatori di pattern consiste in un set di ***funzioni discriminanti*** $g_i(\mathbf{x}),\ i=1,\ldots,c$
- Il classificatore assegna il vettore di feature $\mathbf{x}$ alla classe ω_i se

$$g_i(\mathbf{x}) > g_j(\mathbf{x}) \ per\ ogni\ j \neq i$$

associano un valore il cui maggiore corrisponde alla classe corretta

- Un tale classificatore può essere considerato come una rete che calcola c funzioni discriminanti e sceglie la funzione che discrimina maggiormente

- Un classificatore di Bayes si presta facilmente a questa rappresentazione:



Rischio generico $g_i(\mathbf{x}) = -R(\alpha_i \mid \mathbf{x})$

Minimum Error Rate $g_i(\mathbf{x}) = P(\omega_i \mid \mathbf{x})$

Classificatori, funzioni discriminanti e superfici di separazione (2)

- Esistono molte funzioni discriminanti equivalenti. Per esempio, tutte quelle per cui i risultati di classificazione sono gli stessi
  - Per esempio, se f è una funzione monotona crescente, allora

$$g_i(\mathbf{x}) \Leftrightarrow f(g_i(\mathbf{x}))$$

quindi il significato non cambia la forma di g_i, la scala in modo diverso

  - Alcune forme di funzioni discriminanti sono più semplici da capire o da calcolare

Minimum Error Rate

$$g_i(\mathbf{x}) = P(\omega_i|\mathbf{x}) = \frac{p(\mathbf{x}|\omega_i)P(\omega_i)}{\sum_{j=1}^{c} p(\mathbf{x}|\omega_j)P(\omega_j)}$$

$$g_i(\mathbf{x}) = p(\mathbf{x}|\omega_i)P(\omega_i)$$

$$g_i(\mathbf{x}) = \ln p(\mathbf{x}|\omega_i) + \ln P(\omega_i),$$

il log ha la proprietà di dividere i termini di un prodotto!

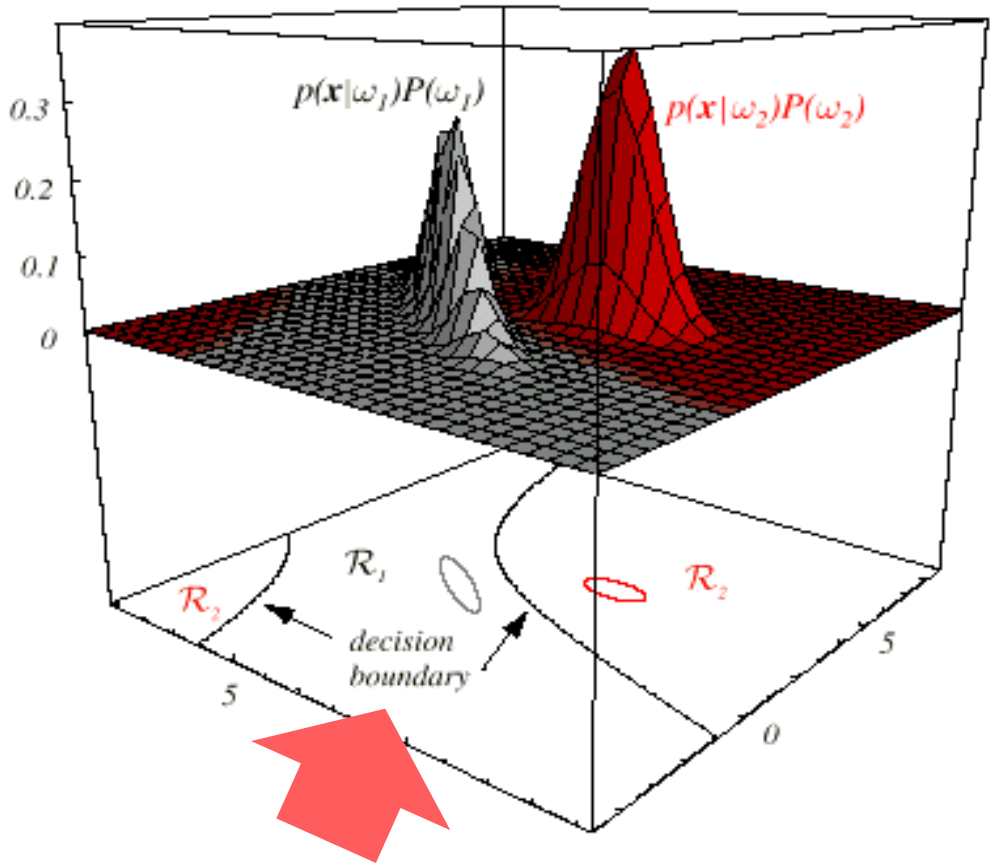
Classificatori, funzioni discriminanti e superfici di separazione (3)

- L'effetto di ogni decisione è quello di *dividere lo spazio delle features* in *c* ***superfici di separazione*** o ***decisione*** $R_1, \ldots, R_c$
  - Le regioni sono separate con ***confini di decisione***, linee descritte dalle massime funzioni discriminanti.
  - Nel caso a *due* categorie ho due funzioni discriminanti, g_1 e g_2, per cui assegno $\mathbf{x}$ a ω_1 se $g_1 > g_2$ o $g_1 - g_2 > 0$
  - Usando

$$g(\mathbf{x}) = g_1(\mathbf{x}) - g_2(\mathbf{x})$$

$$g(\mathbf{x}) = P(\omega_1 \mid \mathbf{x}) - P(\omega_2 \mid \mathbf{x})$$

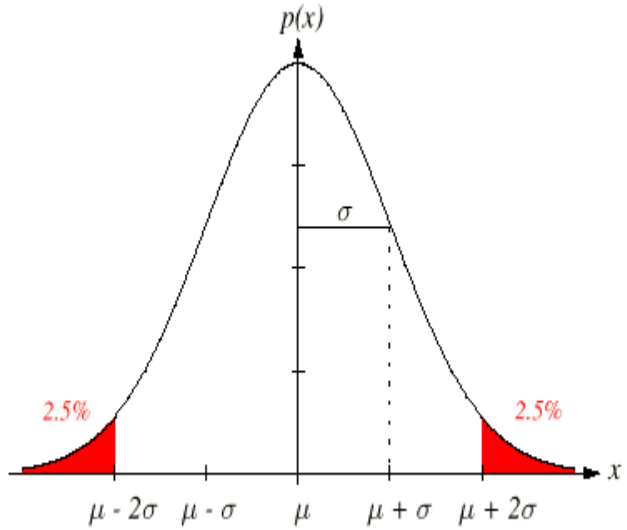
$$g(\mathbf{x}) = \ln \frac{p(\mathbf{x} \mid \omega_1)}{p(\mathbf{x} \mid \omega_2)} + \ln \frac{P(\omega_1)}{P(\omega_2)}$$



ho una sola funzione discriminante!

La densità normale

- La struttura di un classificatore di Bayes è determinata da:
  - Le densità condizionali $p(\mathbf{x} \mid \omega_i)$
  - Le probabilità a priori $P(\omega_i)$
- Una delle più importanti densità è **la densità normale** o **Gaussiana multivariate**, infatti:
  - è analiticamente trattabile;
  - più importante, fornisce la migliore modellazione di problemi sia teorici che pratici
    - il teorema del Limite Centrale asserisce che "*sotto varie condizioni, la distribuzione della somma di d variabili aleatorie indipendenti tende ad un limite particolare conosciuto come distribuzione normale*".



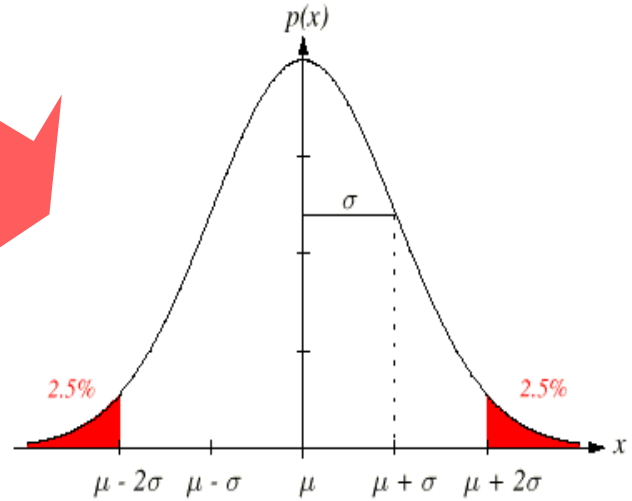
La densità normale (2)

- La funzione Gaussiana ha altre proprietà
  - La trasformata di Fourier di una funzione Gaussiana è una funzione Gaussiana;
  - È ottimale per la localizzazione nel tempo o in frequenza
    - Il principio di indeterminazione stabilisce che la localizzazione non può avvenire simultaneamente in tempo e frequenza

La densità normale univariata

- Iniziamo con la densità normale univariata. Essa è completamente specificata da due parametri, *media* μ e *varianza* σ^2, si indica con $N(\mu, \sigma^2)$ e si presenta nella forma

$$p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left\{-\frac{1}{2}\left(\frac{x-\mu}{\sigma}\right)^2\right\}$$



Media $$\mu = E[x] = \int_{-\infty}^{\infty} x p(x) dx$$

Varianza $$\sigma^2 = E[(x-\mu)^2] = \int_{-\infty}^{\infty} (x-\mu)^2 p(x) dx$$

- Fissata media e varianza la densità Normale è quella dotata di massima entropia;
  - L'entropia misura l'incertezza di una distribuzione o la quantità d'informazione necessaria in media per descrivere la variabile aleatoria associata, ed è data da

$$H(p(x)) = -\int p(x) \ln p(x)\, dx$$

Densità normale multivariata

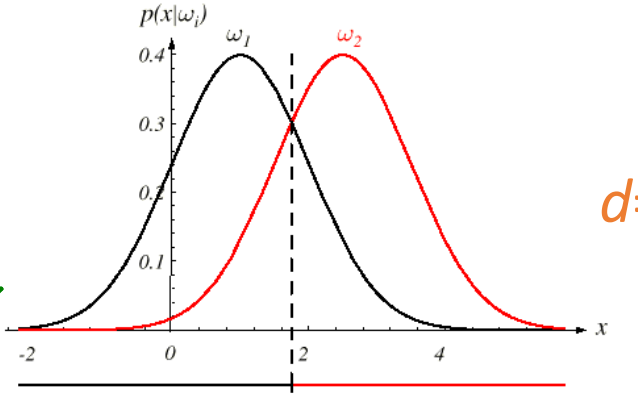
- La generica densità normale multivariata a *d* dimensioni si presenta nella forma

$$p(\mathbf{x}) = \frac{1}{(2\pi)^{d/2}|\boldsymbol{\Sigma}|^{1/2}} \exp\left\{-\frac{1}{2}(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu})^T \boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu})\right\}$$

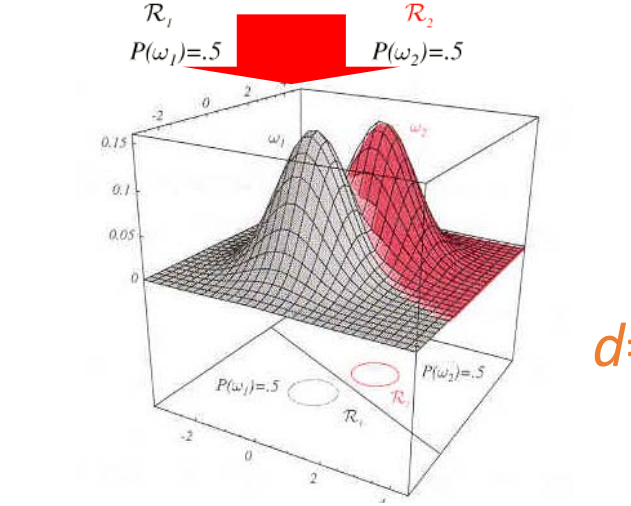
cambia il tipo di distanza ma analiticamente non cambia nulla

in cui

  - $\boldsymbol{\mu}$ = vettore di ***media*** a *d* componenti
  - $\boldsymbol{\Sigma}$ = matrice *d* x *d* di ***covarianza***, dove
    - $|\boldsymbol{\Sigma}|$ = determinante della matrice
    - $\boldsymbol{\Sigma}^{-1}$ = matrice inversa



d=1



d=2

La covarianza ci dice il comportamento dei componenti delle features, e quanto sono correlati tra loro

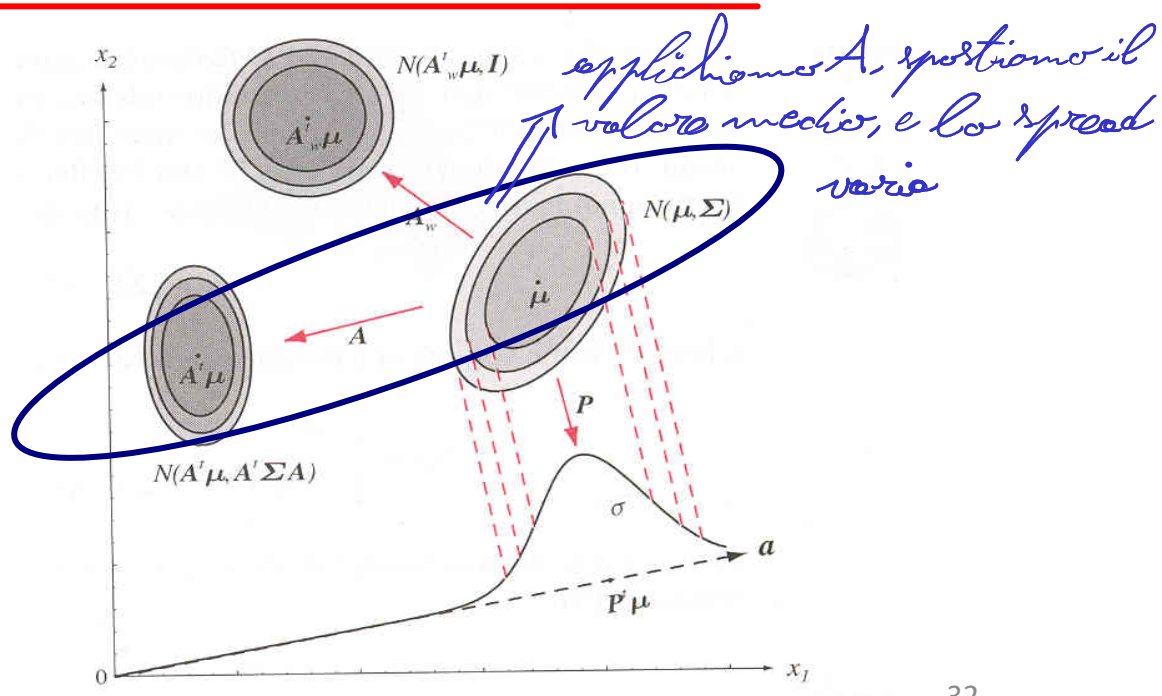
  - *Analiticamente* $\Sigma = \mathrm{E}\left[(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu})(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu})^t\right] = \int (\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu})(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu})^t\, p(\mathbf{x})d\mathbf{x}$
  - *Elemento per elemento* $\sigma_{ij} = \mathrm{E}\left[(x_i-\mu_i)(x_j-\mu_j)\right]$

Densità normale multivariate (2)

- Caratteristiche della matrice di covarianza
  - Simmetrica
  - Semidefinita positiva $(|\boldsymbol{\Sigma}| \geq 0)$
  - σ_{ii}= varianza di x_i $(= \sigma_i^2)$
  - σ_{ij}= covarianza tra x_i e x_j (se x_i e x_j sono ***statisticamente indipendenti*** σ_{ij}= 0)
  - Se $\sigma_{ij} = 0 \quad \forall i \neq j$ $p(\mathbf{x})$ è il prodotto della densità univariata per **x** componente per componente.
  - Se
    - $p(\mathbf{x}) \approx N(\boldsymbol{\mu}, \Sigma)$
    - A matrice d x k
    - $\mathbf{y} = \mathrm{A}^t \mathbf{x}$

trasformare serve come base per correlare i componenti del features vector, per trasformare in uno spazio più gestibile

$$\rightarrow p(\mathbf{y}) \approx N(A^t\boldsymbol{\mu}, A^t\Sigma A)$$



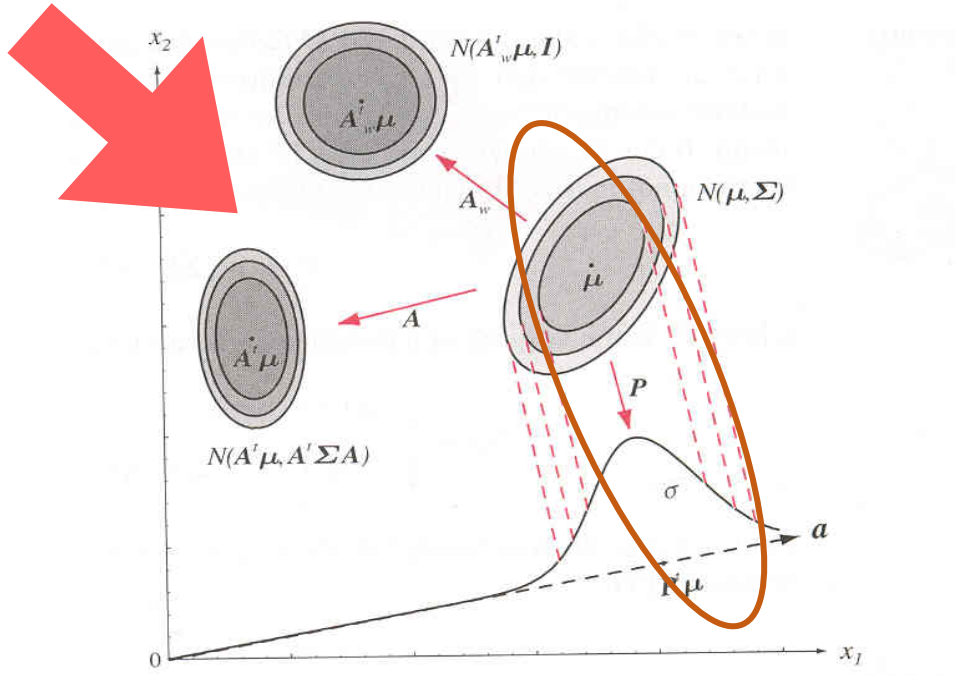
applichiamo A, spostiamo il valore medio, e lo spread varia

Densità normale multivariate (3)

- CASO PARTICOLARE: k = 1
  - $p(\mathbf{x}) \approx N(\boldsymbol{\mu},\boldsymbol{\Sigma})$
  - $\boldsymbol{a}$ vettore d x 1 di lunghezza unitaria
  - $y = \boldsymbol{a}^t \mathbf{x}$ → normalizzato, con norma = 1
  - y è uno scalare che rappresenta la proiezione di $\mathbf{x}$ su una linea in direzione definita da $\boldsymbol{a}$
  - $\boldsymbol{a}^t \boldsymbol{\Sigma} \boldsymbol{a}$ è la *varianza* di $\mathbf{x}$ su $\boldsymbol{a}$

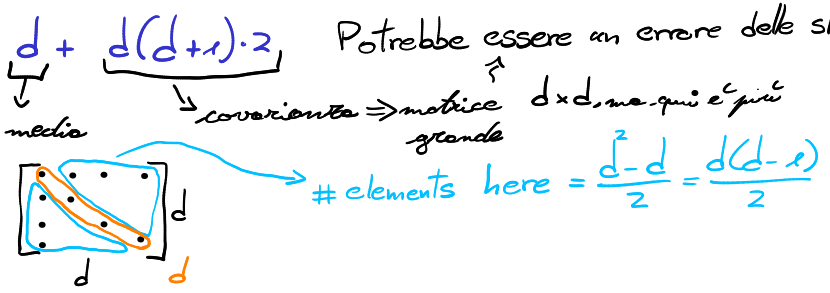
Con la matrice A possiamo cambiare la dimensione del vettore di feature.

- **In generale Σ permette di calcolare la *dispersione* dei dati in ogni superficie o sottospazio.**

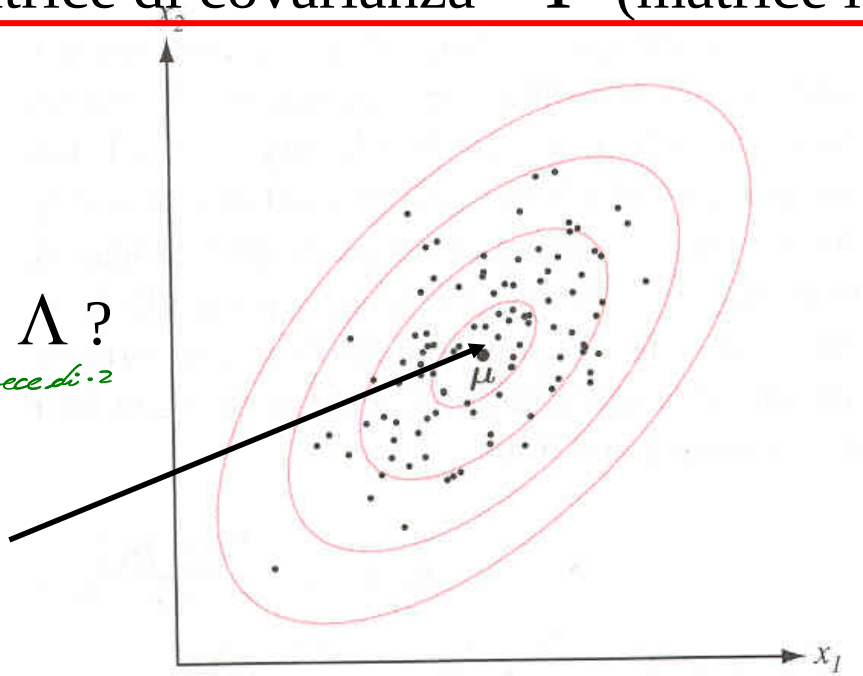


Densità normale multivariate (4)

- Siano (trasf. sbiancante, *whitening transform*)
  - Φ la matrice degli autovettori ortonormali di Σ in colonna;
  - Λ la matrice diagonale dei corrispondenti autovalori;
- La trasformazione $A_w = \Phi\Lambda^{-1/2}$, applicata alle coordinate dello spazio delle feature, assicura una distribuzione con matrice di covarianza = I (matrice identica)
- La densità $N(\mu, \Sigma)$ d-dimensionale necessita di d + d(d+1)*2 parametri per essere definita
- Ma cosa rappresentano graficamente Φ e Λ ?



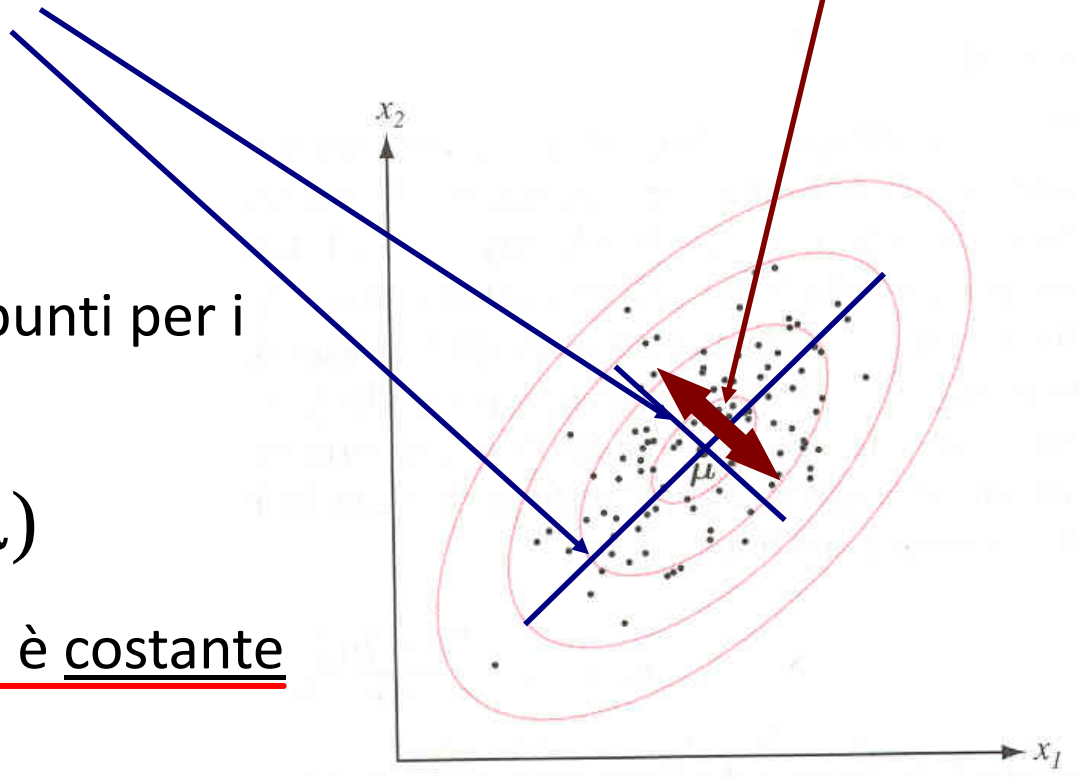
Media individuata dalle coordinate di μ



Densità normale multivariate (5)

Le lunghezze degli assi principali degli iperellissoidi sono dati dagli autovalori di Σ (descritti da Λ)

Gli assi principali degli iperellissoidi sono dati dagli autovettori di Σ (descritti da Φ)



Gli iperellissoidi sono quei luoghi dei punti per i quali la distanza di $\mathbf{x}$ da $\mathbf{m}$

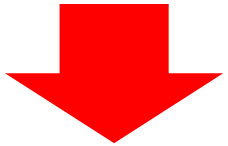
$$r^2 = (\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu})^t \boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu})$$

detta anche ***distanza di Mahalanobis***, è costante

Funzioni discriminanti - Densità Normale

- Tornando ai classificatori Bayesiani, ed in particolare alle funzioni discriminanti, analizziamo la funzione discriminante come si traduce nel caso di densità Normale e *minimum error rate*

$$g_i(\mathbf{x}) = \ln p(\mathbf{x} \mid \omega_i) + \ln P(\omega_i)$$



$$g_i(\mathbf{x}) = -\frac{1}{2}(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu}_i)^t \boldsymbol{\Sigma}_i^{-1}(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu}_i) - \frac{d}{2}\ln 2\pi - \frac{1}{2}\ln|\boldsymbol{\Sigma}_i| + \ln P(\omega_i)$$

- A seconda della natura di Σ, la formula sopra scritta può essere semplificata. Vediamo alcuni esempi …

Funzioni discriminanti - Densità Normale $\Sigma_i=\sigma^2 I$

- È il caso più semplice in cui le feature sono statisticamente indipendenti ($\sigma_{ij}= 0$, i≠j), ed ogni classe ha la stessa varianza *(caso 1-D):*

La soglia è costante per le varie classi

$$g_i(\mathbf{x}) = -\frac{\|\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu}_i\|^2}{2\sigma^2} + \ln P(\omega_i)$$

$$g_i(\mathbf{x}) = -\frac{1}{2\sigma^2}\left[\mathbf{x}^t\mathbf{x} - 2\boldsymbol{\mu}_i^t\mathbf{x} + \boldsymbol{\mu}_i^t\boldsymbol{\mu}_i\right] + \ln P(\omega_i)$$

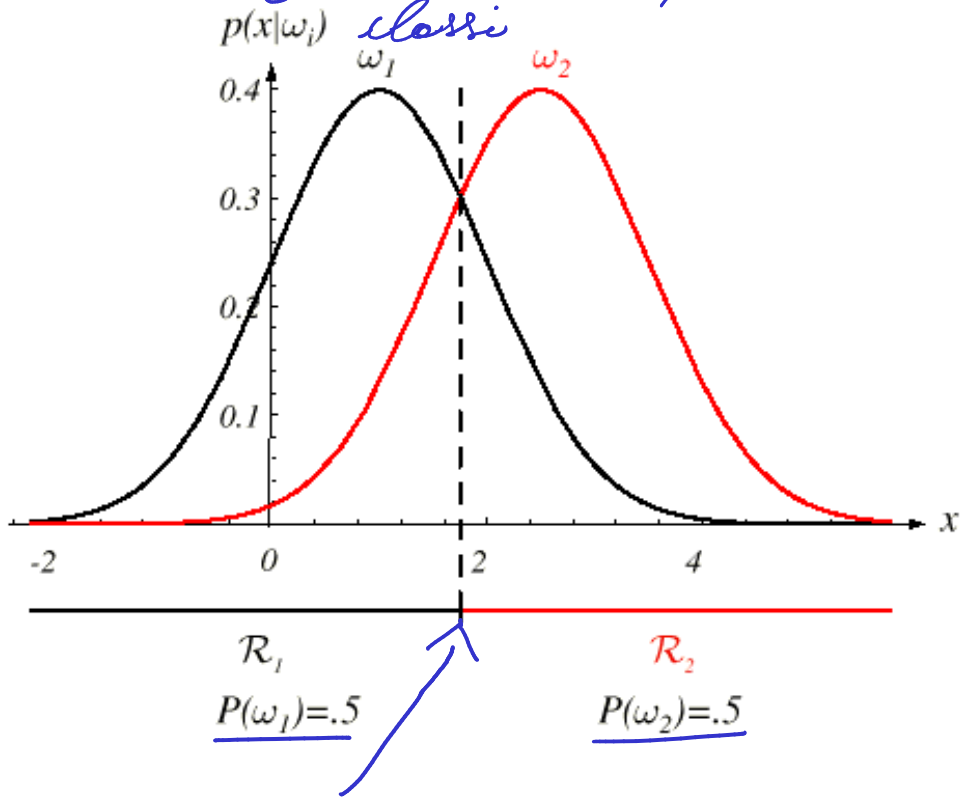
dove il termine $\mathbf{x}^t\mathbf{x}$, uguale per ogni $\mathbf{x}$,

può essere ignorato giungendo alla forma :

$$g_i(\mathbf{x}) = \mathbf{w}_i^t\mathbf{x} + w_{i0},$$

dove

$$\mathbf{w}_i = \frac{1}{\sigma^2}\boldsymbol{\mu}_i \quad \text{e} \quad w_{i0} = -\frac{1}{2\sigma^2}\boldsymbol{\mu}_i^t\boldsymbol{\mu}_i + \ln P(\omega_i)$$



= **SOGLIA per l'i-esima classe**

quando facciamo la differenza tra g1 e g2 vediamo che la soglia è a metà

Funzioni discriminanti - Densità Normale $\Sigma_i=\sigma^2 I$ (2)

- Le funzioni precedenti vengono chiamate ***funzioni discriminanti lineari*** (o *linear machine*)
  - I **confini di decisione** sono dati da $g_i(\mathbf{x}) = g_j(\mathbf{x})$ per le due classi con più alta probabilità a posteriori
  - In questo caso particolare abbiamo:

SOGLIA $\rightsquigarrow$

$$\mathbf{w}^t(\mathbf{x}-\mathbf{x}_0)=0$$

dove

$$\mathbf{w}=\boldsymbol{\mu}_i-\boldsymbol{\mu}_j$$

$$\mathbf{x}_0=\frac{1}{2}(\boldsymbol{\mu}_i+\boldsymbol{\mu}_j)-\frac{\sigma^2}{\|\boldsymbol{\mu}_i-\boldsymbol{\mu}_j\|^2}\ln\frac{P(\omega_i)}{P(\omega_j)}(\boldsymbol{\mu}_i-\boldsymbol{\mu}_j)$$

media tra μ_i e μ_j

NB: se $\sigma^2 << \|\boldsymbol{\mu}_i-\boldsymbol{\mu}_j\|^2$ la posizione del confine di decisione è insensibile ai prior !

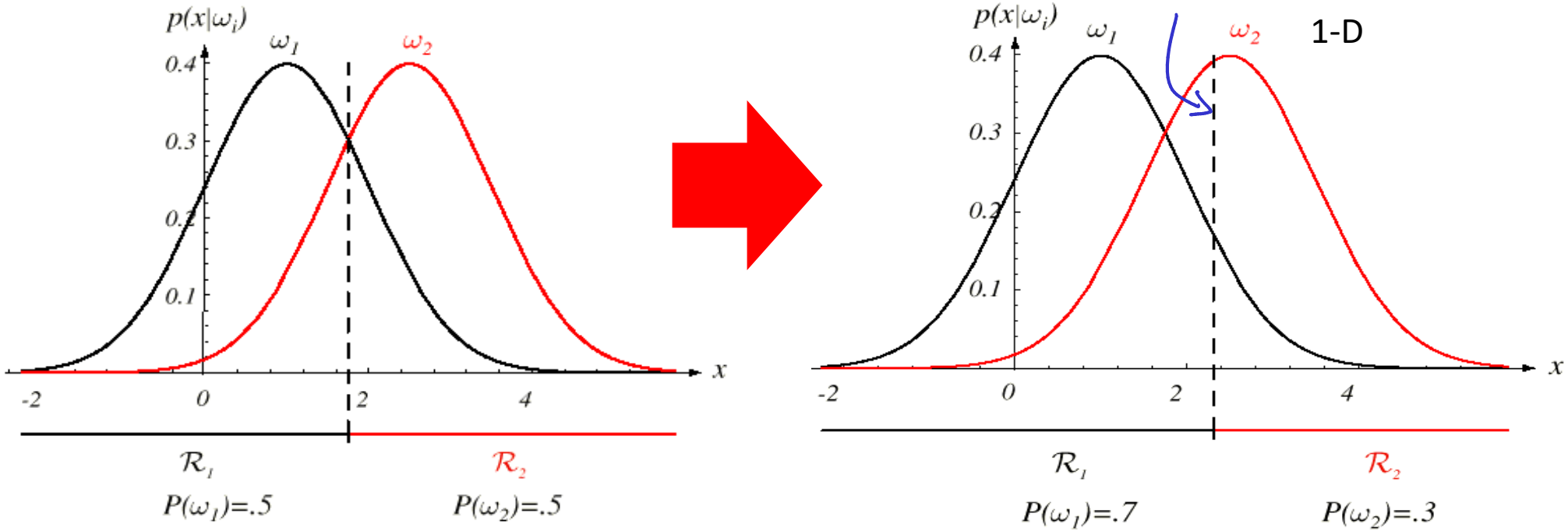
$P(\omega_i)=P(\omega_j)$ $\Rightarrow$ $\ln(1)=0$ $\Rightarrow$ la soglia è esattam. a metà

Funzioni discriminanti - Densità Normale $\Sigma_i=\sigma^2 I$ (3)

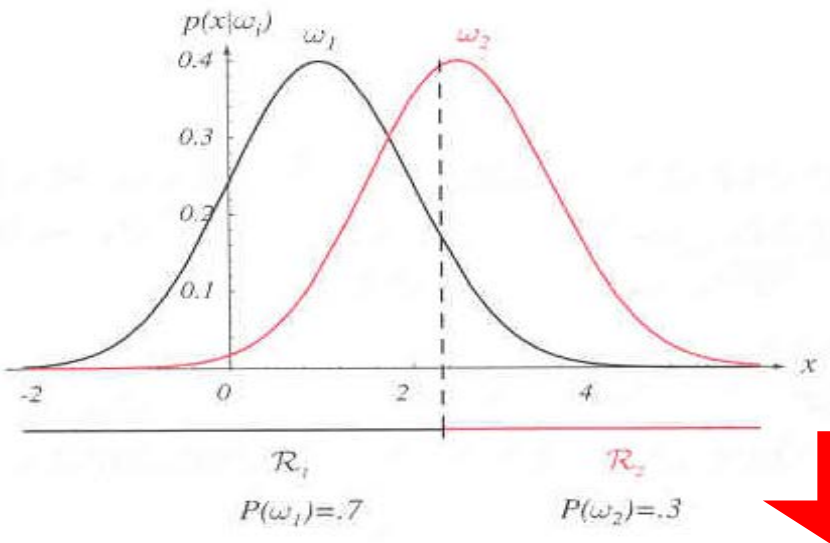
- Le funzioni discriminanti lineari definiscono un iperpiano passante per $\mathbf{x}_0$ ed ortogonale a $\mathbf{w}$:

  dato che $\mathbf{w} = \boldsymbol{\mu}_i - \boldsymbol{\mu}_j$, l'iperpiano che separa R_i da R_j è *ortogonale* alla linea che unisce le medie.
- Dalla formula precedente si nota che, a parità di varianza, il prior maggiore determina la classificazione.

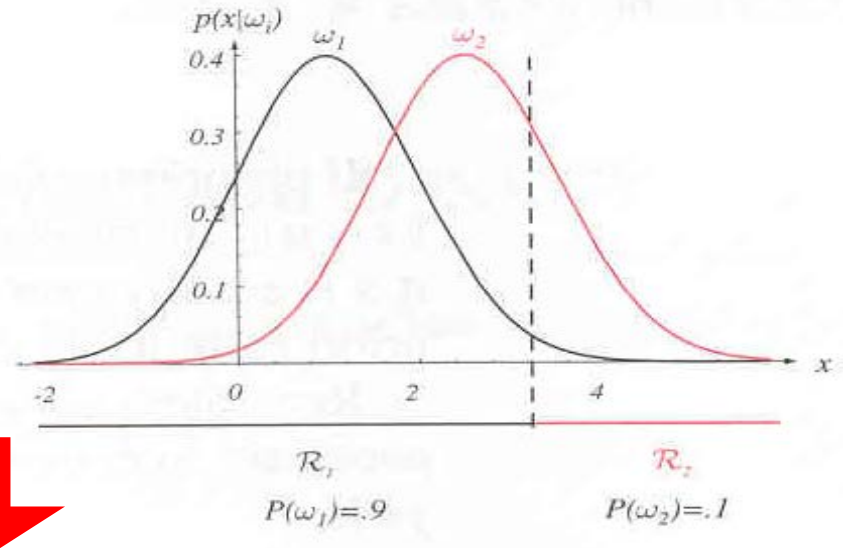
il confine si muove verso la classe meno probabile
in questo modo do più importanza all'altra classe



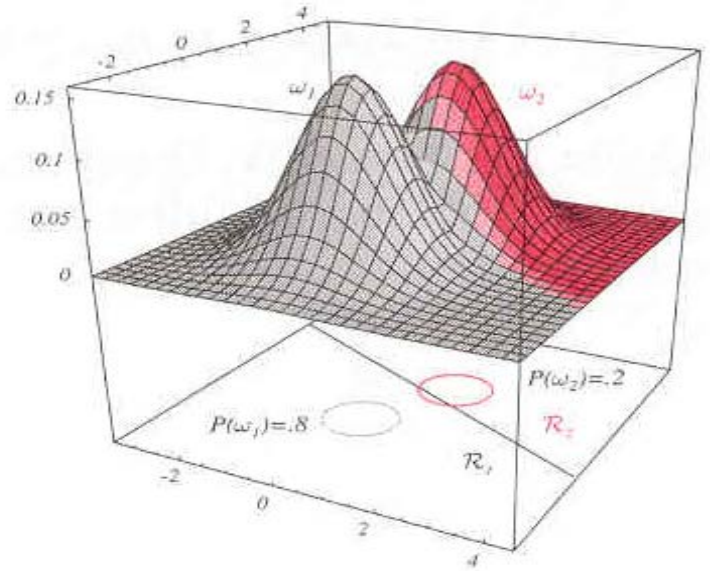
Funzioni discriminanti - Densità Normale $\Sigma_i=\sigma^2 I$ (4)

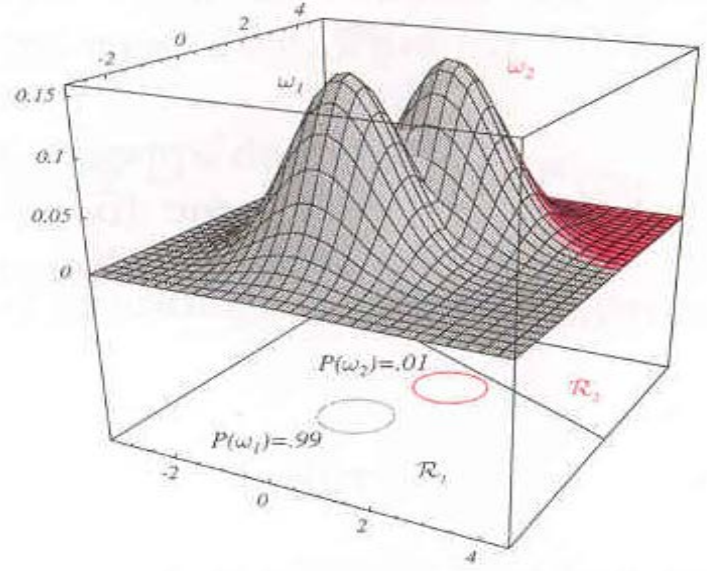


1-D

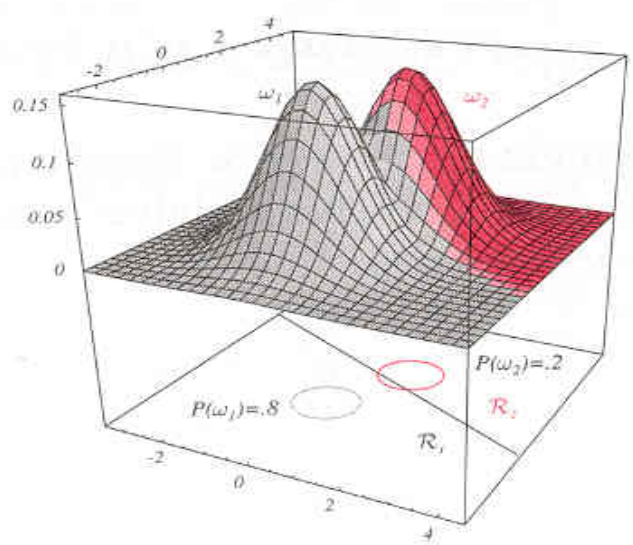


2-D

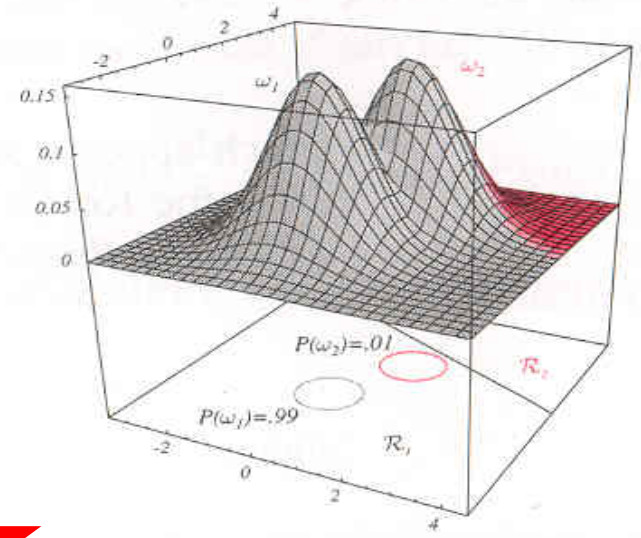


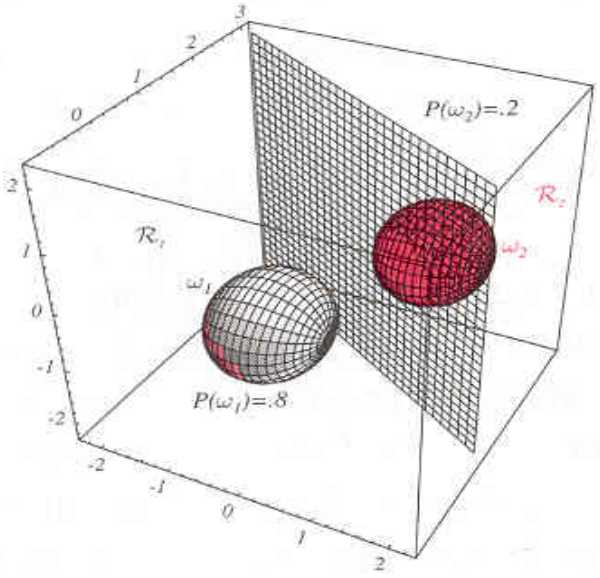


Funzioni discriminanti - Densità Normale $\Sigma_i=\sigma^2 I$ (5)

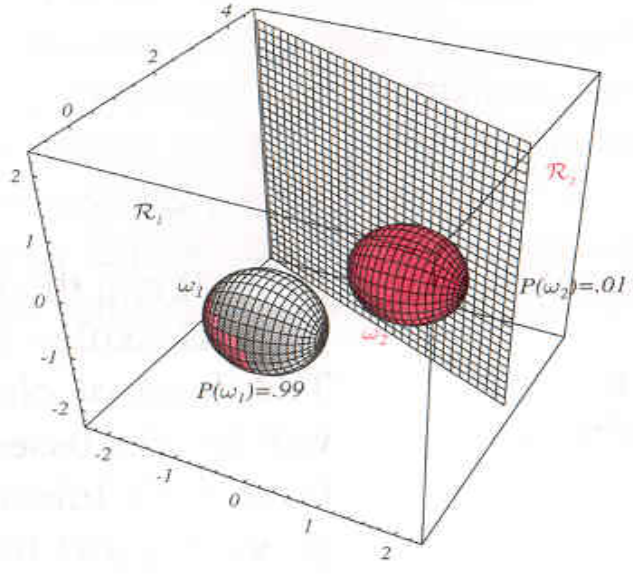


2-D



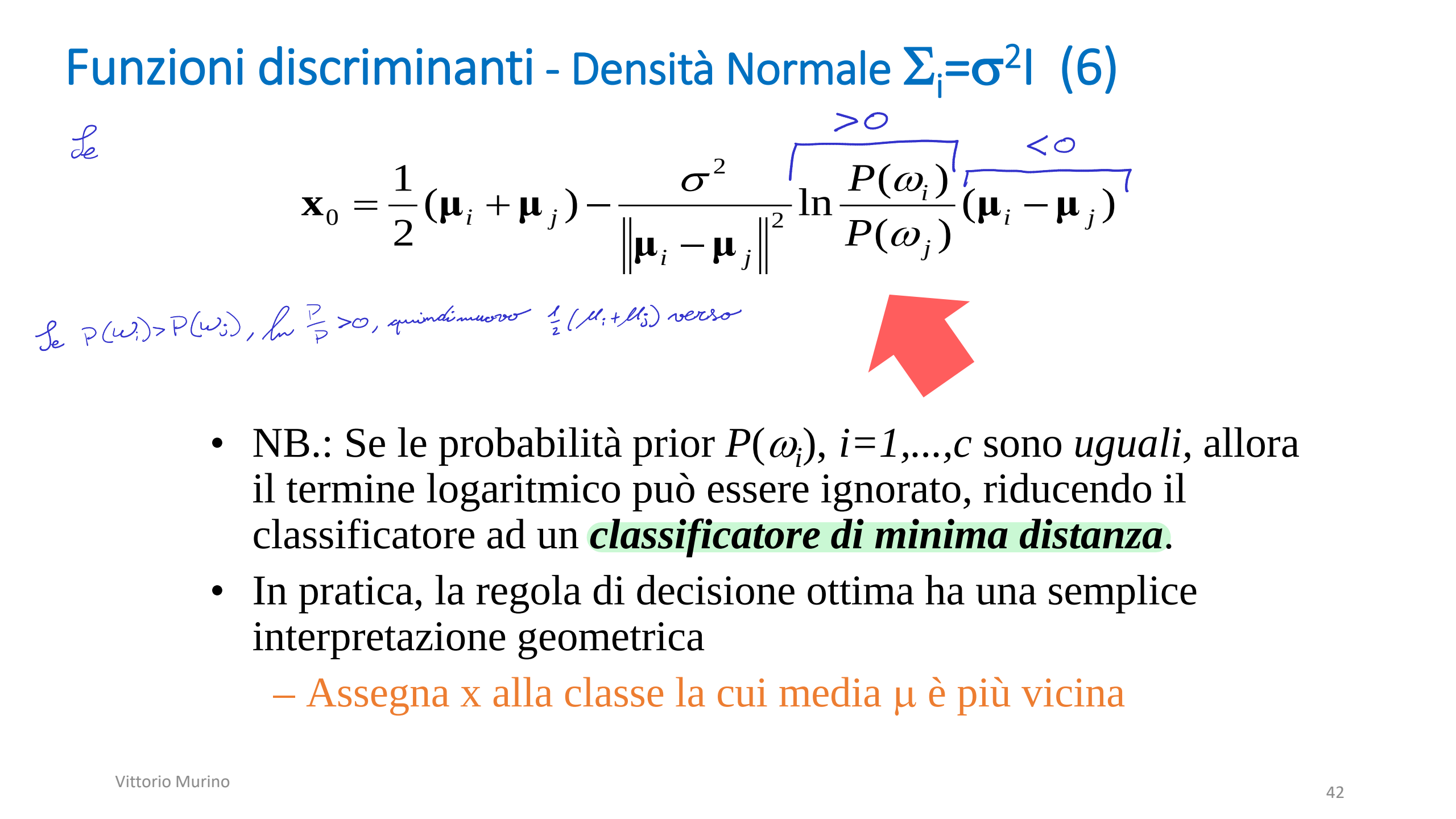


3-D



Funzioni discriminanti - Densità Normale $\Sigma_i=\sigma^2 I$ (6)

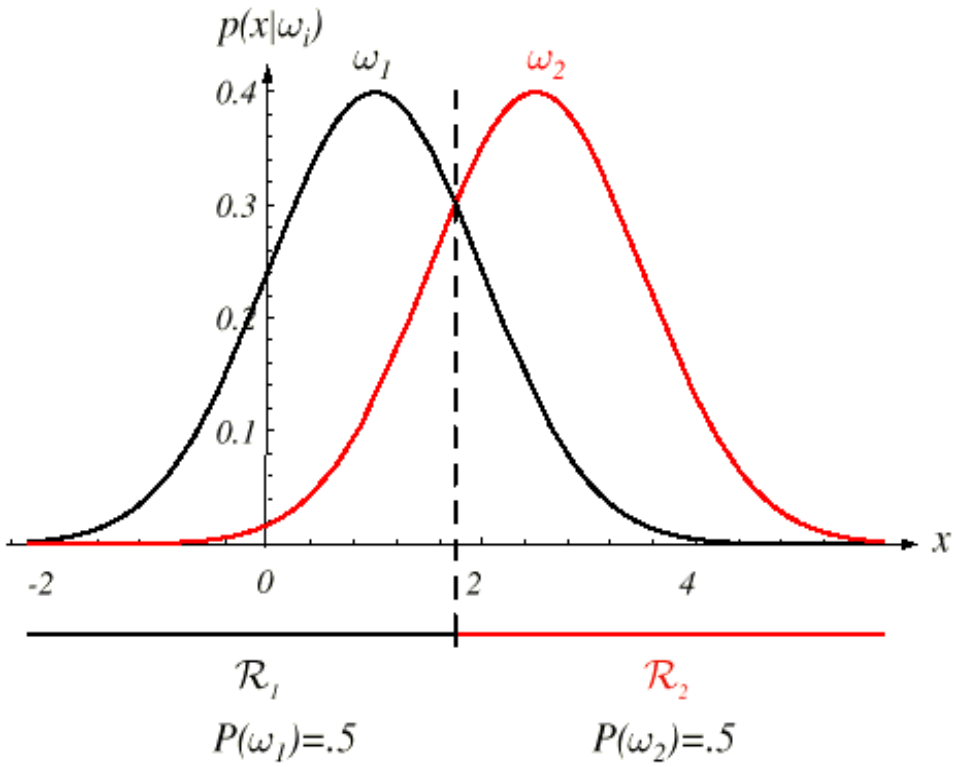
$$\mathbf{x}_0 = \frac{1}{2}(\boldsymbol{\mu}_i + \boldsymbol{\mu}_j) - \frac{\sigma^2}{\|\boldsymbol{\mu}_i - \boldsymbol{\mu}_j\|^2} \ln\frac{P(\omega_i)}{P(\omega_j)} (\boldsymbol{\mu}_i - \boldsymbol{\mu}_j)$$



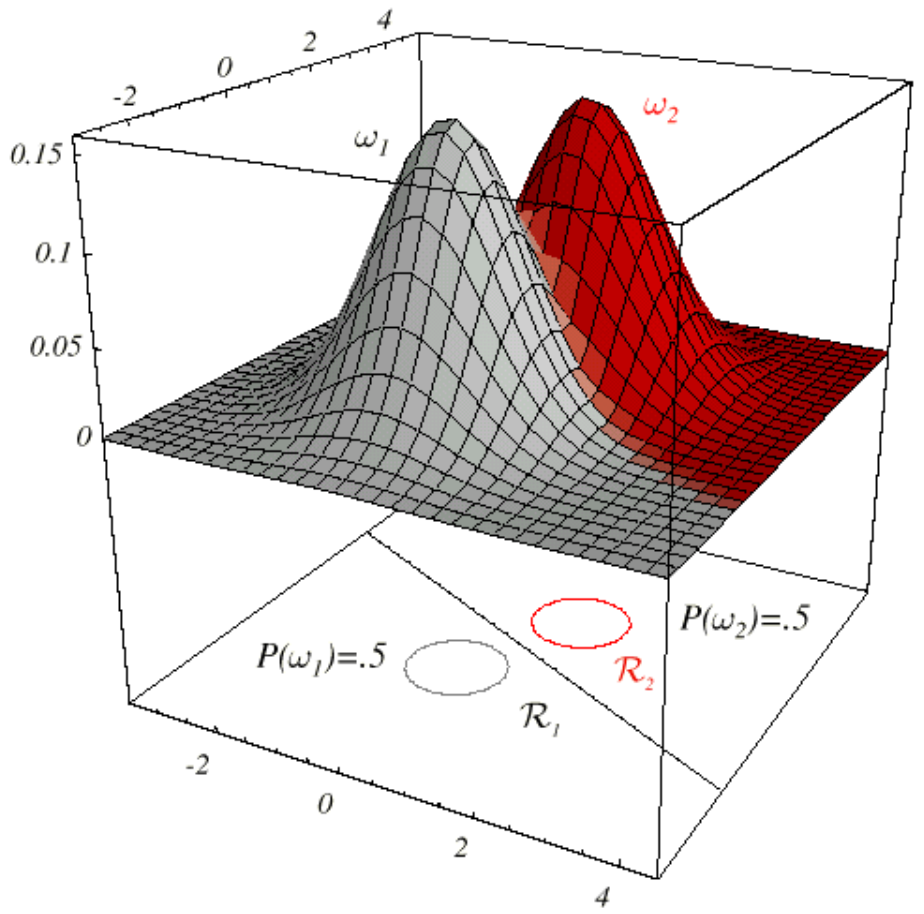
- NB.: Se le probabilità prior $P(\omega_i)$, $i=1,\ldots,c$ sono *uguali*, allora il termine logaritmico può essere ignorato, riducendo il classificatore ad un ***classificatore di minima distanza***.
- In pratica, la regola di decisione ottima ha una semplice interpretazione geometrica
  - Assegna x alla classe la cui media μ è più vicina

Funzioni discriminanti - Densità Normale $\Sigma_i=\sigma^2 I$ (7)

1-D

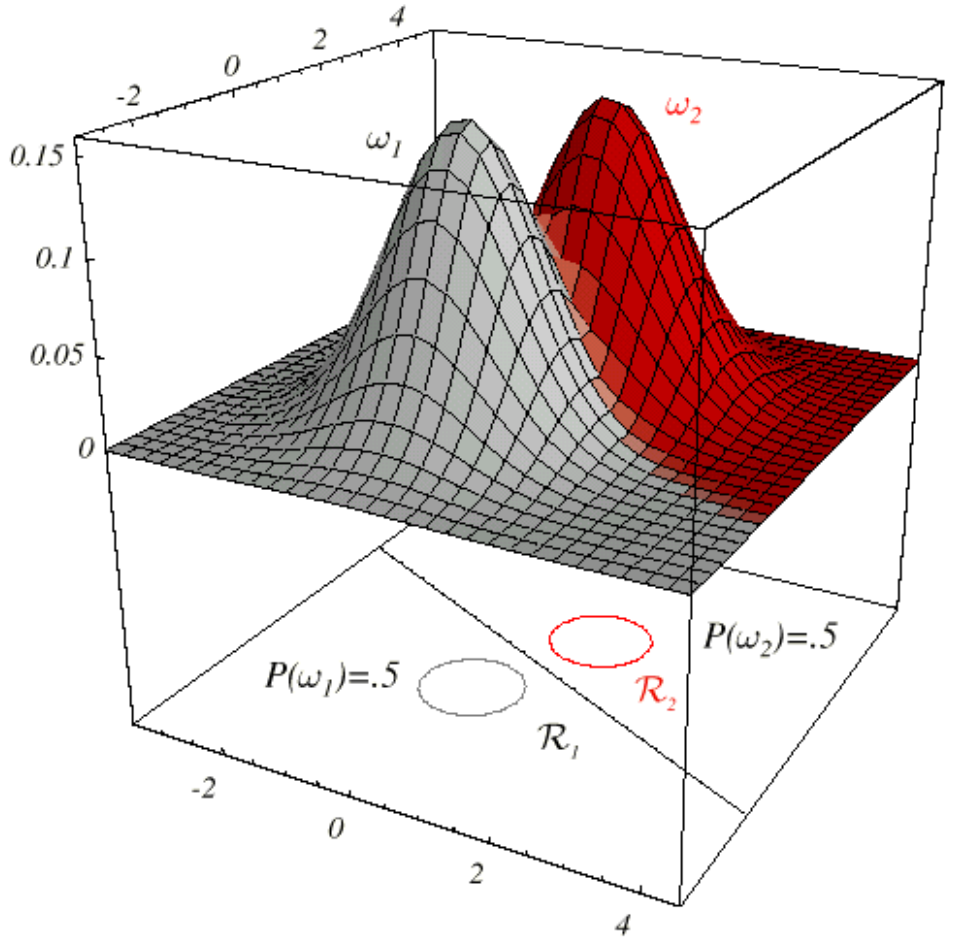


2-D

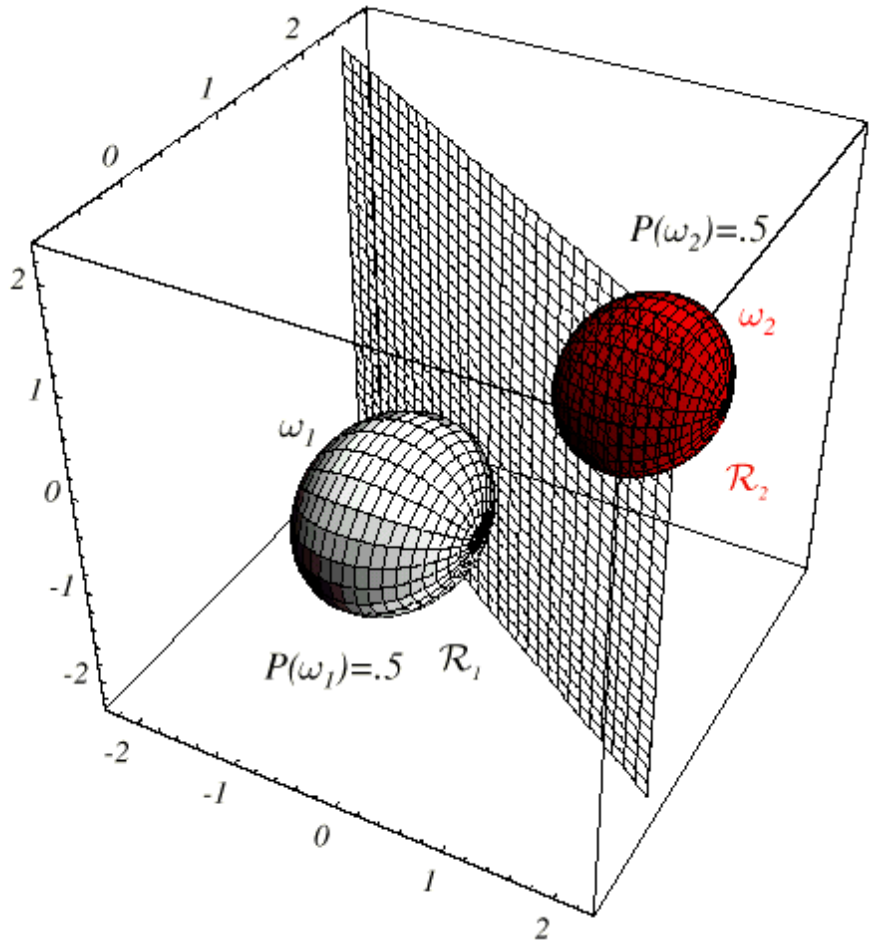


Funzioni discriminanti - Densità Normale $\Sigma_i=\sigma^2 I$ (8)

2-D



3-D



Funzioni discriminanti - Densità Normale $\Sigma_i = \Sigma$

- Un altro semplice caso occorre quando le matrici di covarianza per tutte le classi sono uguali, ma arbitrarie.
- In questo caso l'ordinaria formula

$$g_i(\mathbf{x}) = -\frac{1}{2}(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu}_i)^t \Sigma_i^{-1}(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu}_i) - \frac{d}{2}\ln 2\pi - \frac{1}{2}\ln|\boldsymbol{\Sigma}_i| + \ln P(\omega_i)$$

può essere semplificata con

$$g_i(\mathbf{x}) = -\frac{1}{2}(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu}_i)^t \Sigma^{-1}(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu}_i) + \ln P(\omega_i)$$

che è ulteriormente trattabile, con un procedimento analogo al caso precedente (sviluppando il prodotto ed eliminando il termine $\mathbf{x}^t\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\mathbf{x}$)

Funzioni discriminanti - Densità Normale $\Sigma_i = \Sigma$ (2)

- Otteniamo così funzioni discriminanti ancora lineari, nella forma:

$$g_i(\mathbf{x}) = \mathbf{w}_i^t \mathbf{x} + w_{i0}$$

dove

$$\mathbf{w}_i = \boldsymbol{\Sigma}^{-1}\boldsymbol{\mu}_i$$

$$w_{i0} = -\frac{1}{2}\boldsymbol{\mu}_i^t \boldsymbol{\Sigma}^{-1}\boldsymbol{\mu}_i + \ln P(\omega_i)$$

- Poiché i discriminanti sono lineari, i *confini di decisione* sono ancora iperpiani

Funzioni discriminanti - Densità Normale $\Sigma_i = \Sigma$ (3)

- Se le regioni di decisione R_i ed R_j sono contigue, il confine tra esse diventa:

$$\mathbf{w}^t(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) = 0,$$

where

$$\mathbf{w} = \boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\boldsymbol{\mu}_i - \boldsymbol{\mu}_j)$$

and

$$\mathbf{x}_0 = \frac{1}{2}(\boldsymbol{\mu}_i + \boldsymbol{\mu}_j) - \frac{\ln[P(\omega_i)/P(\omega_j)]}{(\boldsymbol{\mu}_i - \boldsymbol{\mu}_j)^t \boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\boldsymbol{\mu}_i - \boldsymbol{\mu}_j)}(\boldsymbol{\mu}_i - \boldsymbol{\mu}_j).$$

ancora la media — non c'è più σ^2

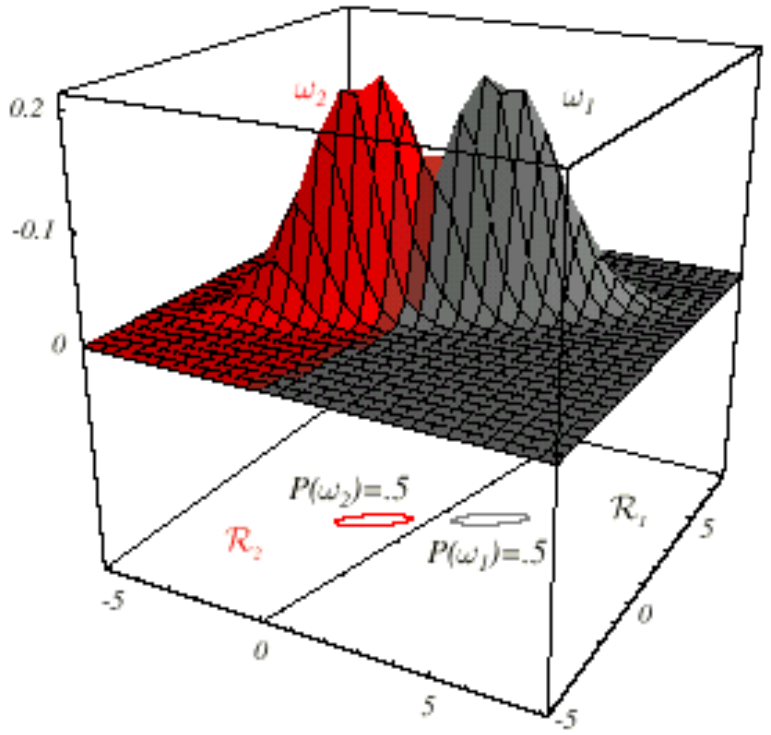
Funzioni discriminanti - Densità Normale $\Sigma_i = \Sigma$ (4)

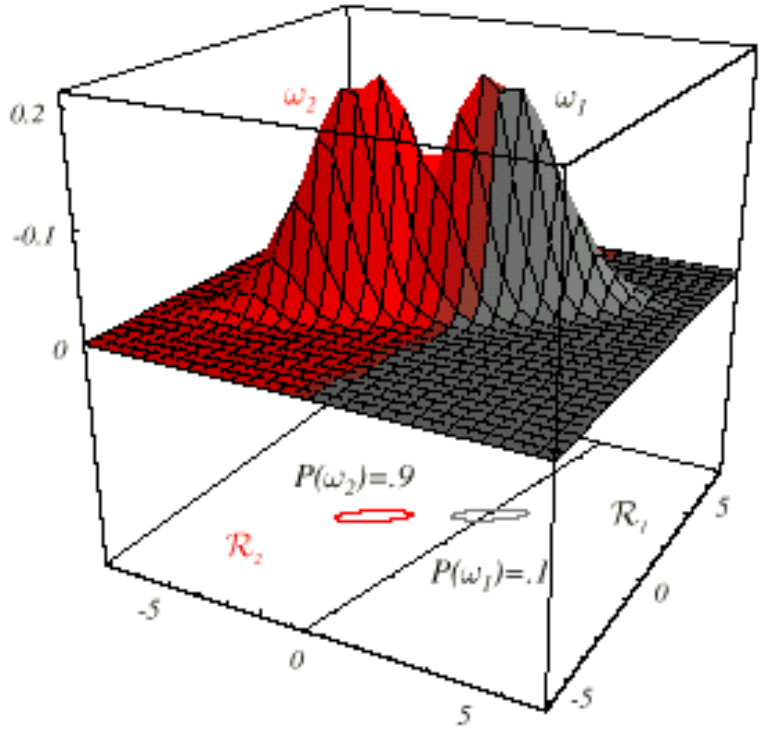
- Poiché $\mathbf{w}$ in generale (differentemente da prima) non è il vettore che unisce le 2 medie ($\mathbf{w} = \boldsymbol{\mu}_i - \boldsymbol{\mu}_j$), l'iperpiano che divide R_i da R_j non è quindi ortogonale alla linea tra le medie.

  Comunque, esso interseca questa linea in $\mathbf{x}_0$

- Se i *prior* sono uguali, allora $\mathbf{x}_0$ si trova in mezzo alle medie, altrimenti l'iperpiano ottimale di separazione si troverà spostato verso la media della classe meno probabile.

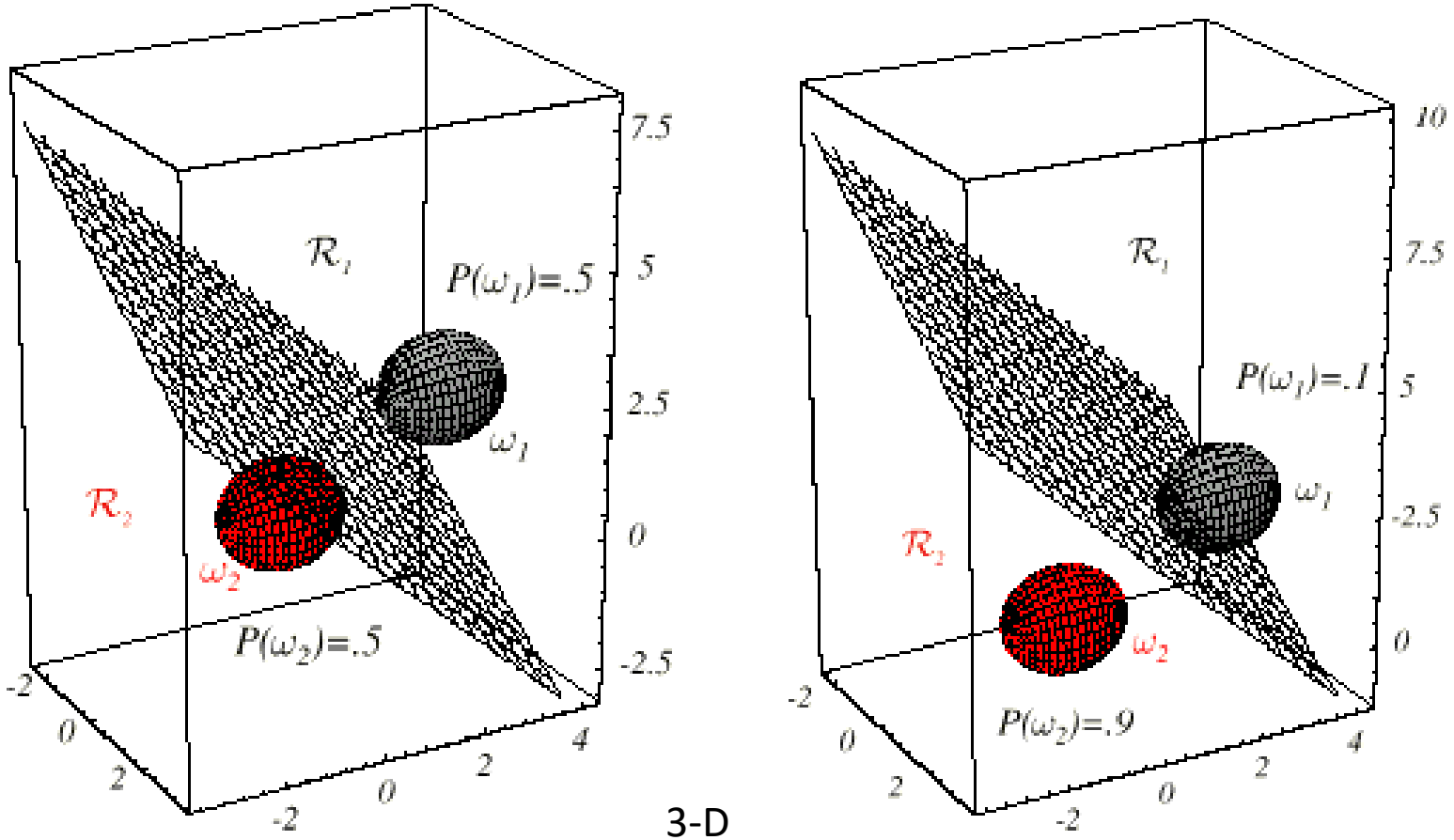
Funzioni discriminanti - Densità Normale $\Sigma_i = \Sigma$ (5)





2-D

Funzioni discriminanti - Densità Normale $\Sigma_i = \Sigma$ (6)



3-D

Funzioni discriminanti - Densità Normale Σ_i arbitraria

- Le matrici di covarianza sono differenti per ogni categoria;
- Le funzioni discriminanti sono inerentemente quadratiche;

$$g_i(\mathbf{x}) = \mathbf{x}^t \mathbf{W}_i \mathbf{x} + \mathbf{w}_i^t \mathbf{x} + w_{i0},$$

where

$$\mathbf{W}_i = -\frac{1}{2}\boldsymbol{\Sigma}_i^{-1},$$

$$\mathbf{w}_i = \boldsymbol{\Sigma}_i^{-1}\boldsymbol{\mu}_i$$

and

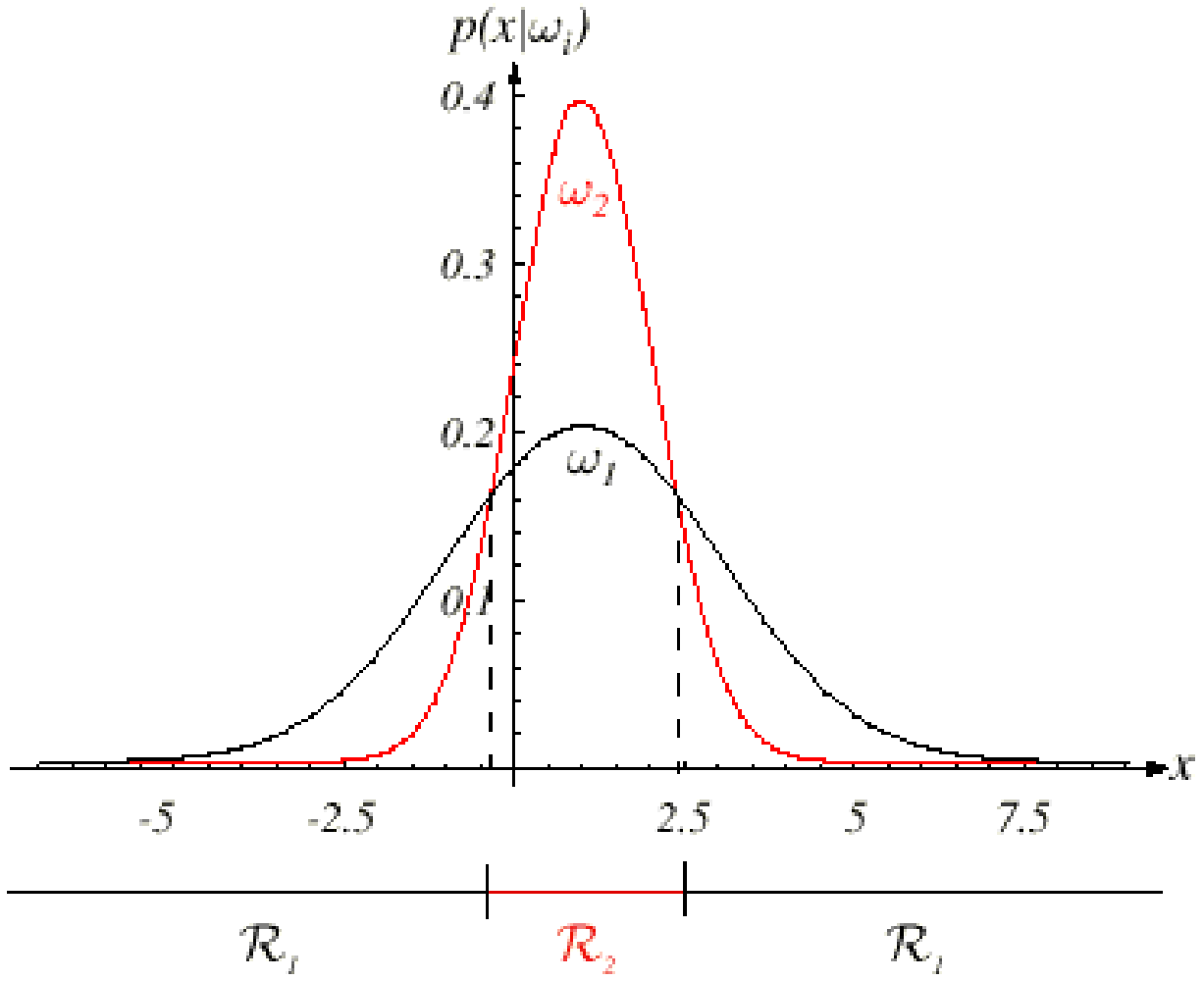
$$w_{i0} = -\frac{1}{2}\boldsymbol{\mu}_i^t \boldsymbol{\Sigma}_i^{-1}\boldsymbol{\mu}_i - \frac{1}{2}\ln|\boldsymbol{\Sigma}_i| + \ln P(\omega_i).$$

Funzioni discriminanti - Densità Normale Σ_i arbitraria (2)

- Nel caso 2-D le superfici di decisione sono *iperquadriche:*
  - Iperpiani
  - Coppia di iperpiani
  - Ipersfere
  - Iperparaboloidi
  - Iperiperboloidi di vario tipo

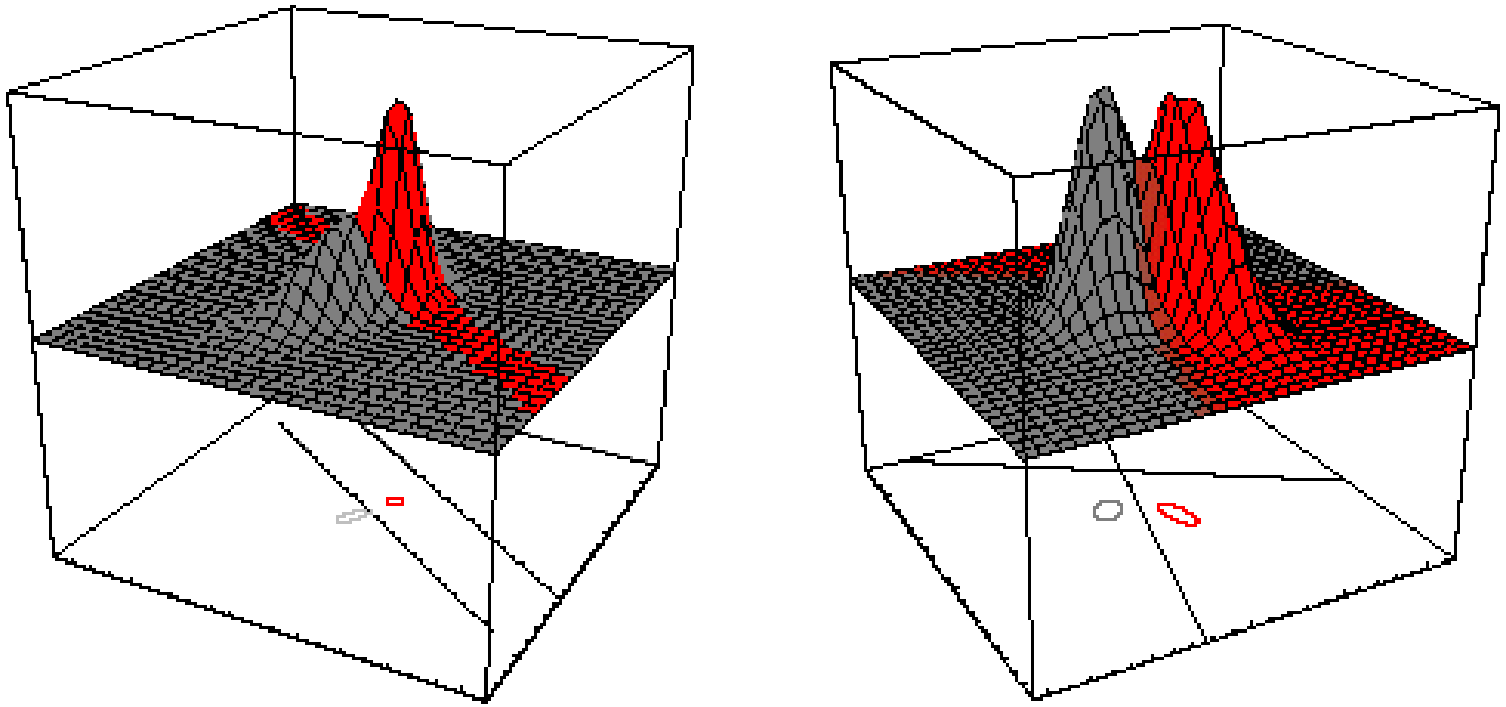
- Anche nel caso 1-D, per la varianza arbitraria, le regioni di decisione di solito sono non connesse.

Funzioni discriminanti - Densità Normale Σ_i arbitraria (3)

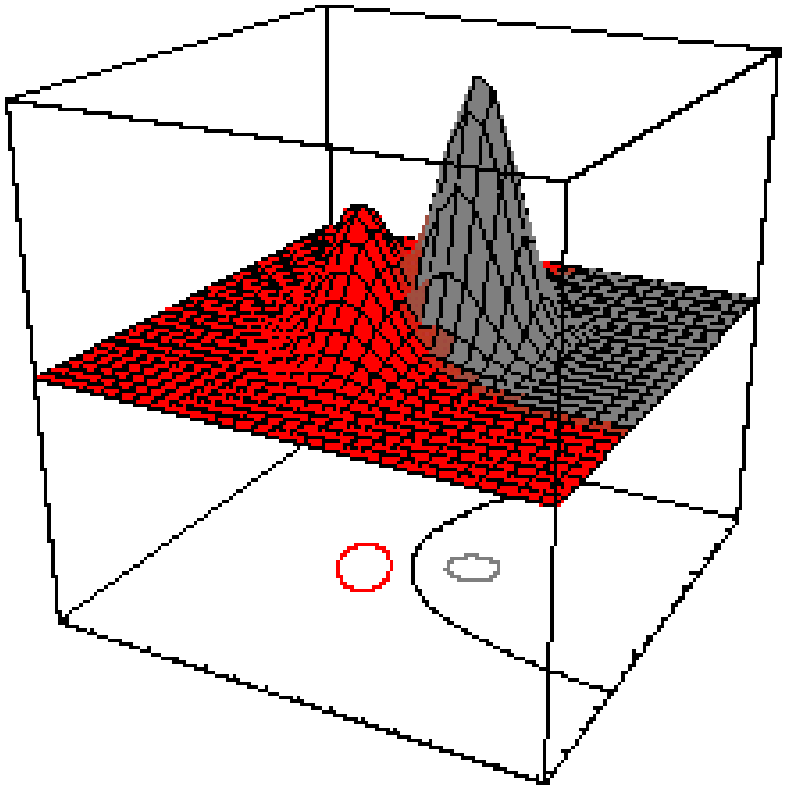


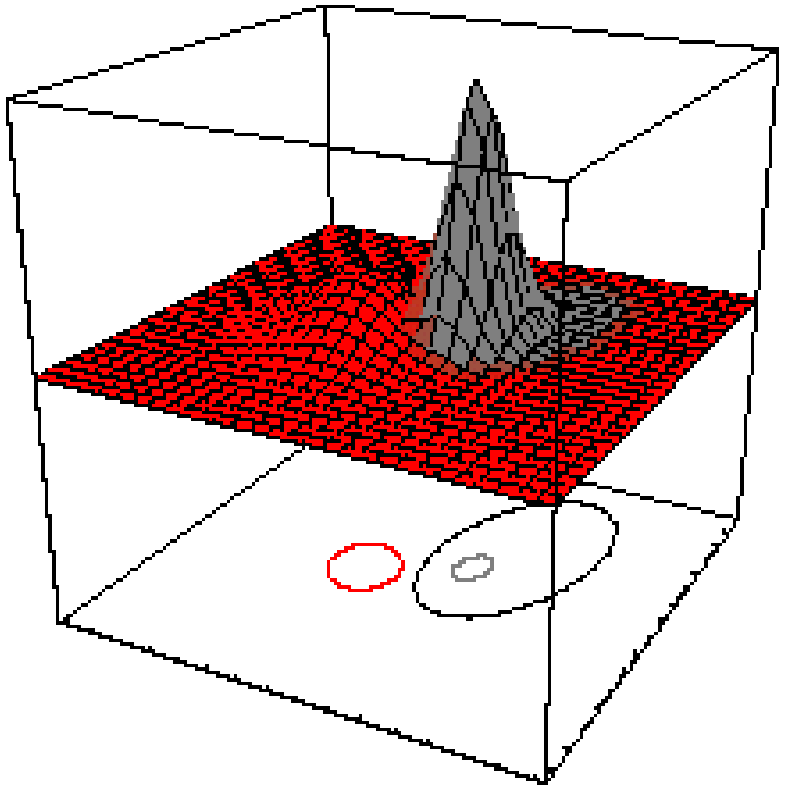
Funzioni discriminanti

Densità Normale Σ_i arbitraria (4)

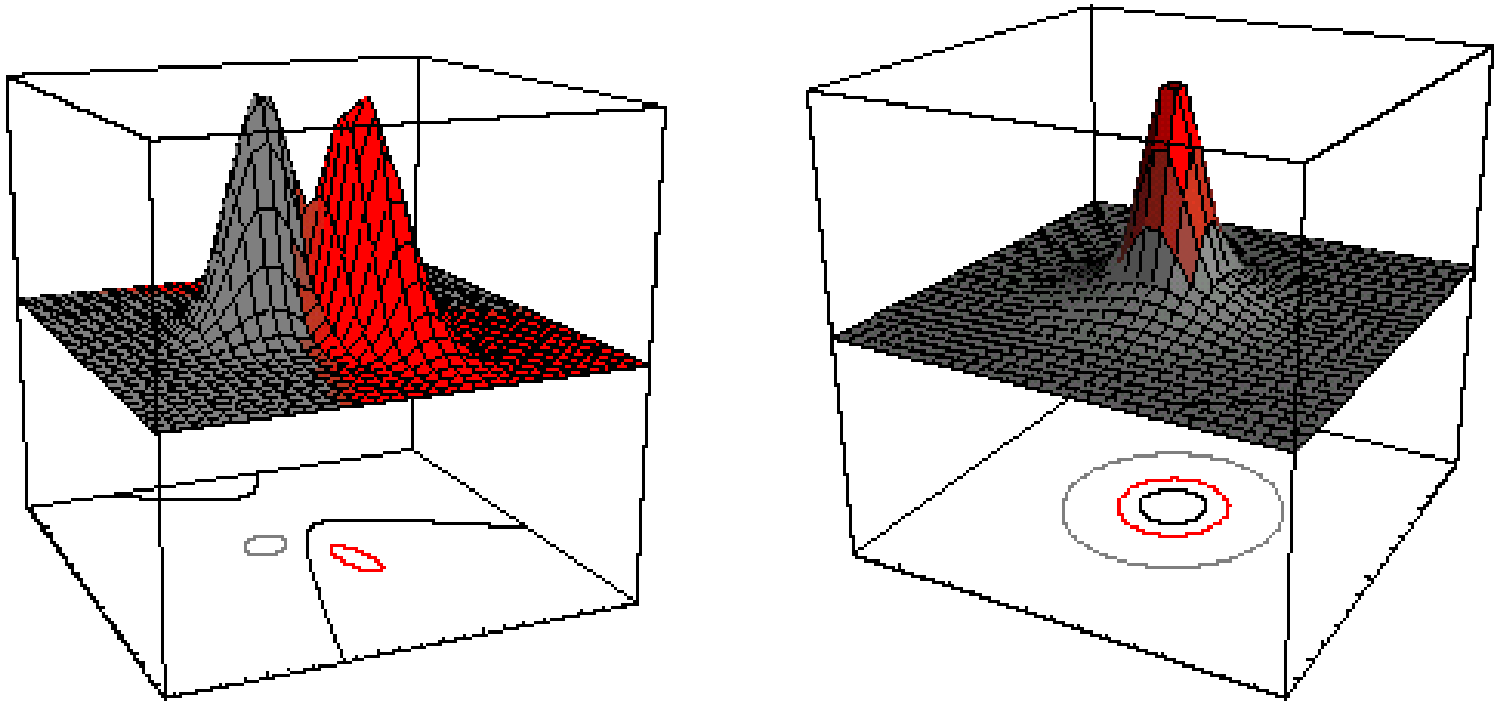


Funzioni discriminanti - Densità Normale Σ_i arbitraria (5)

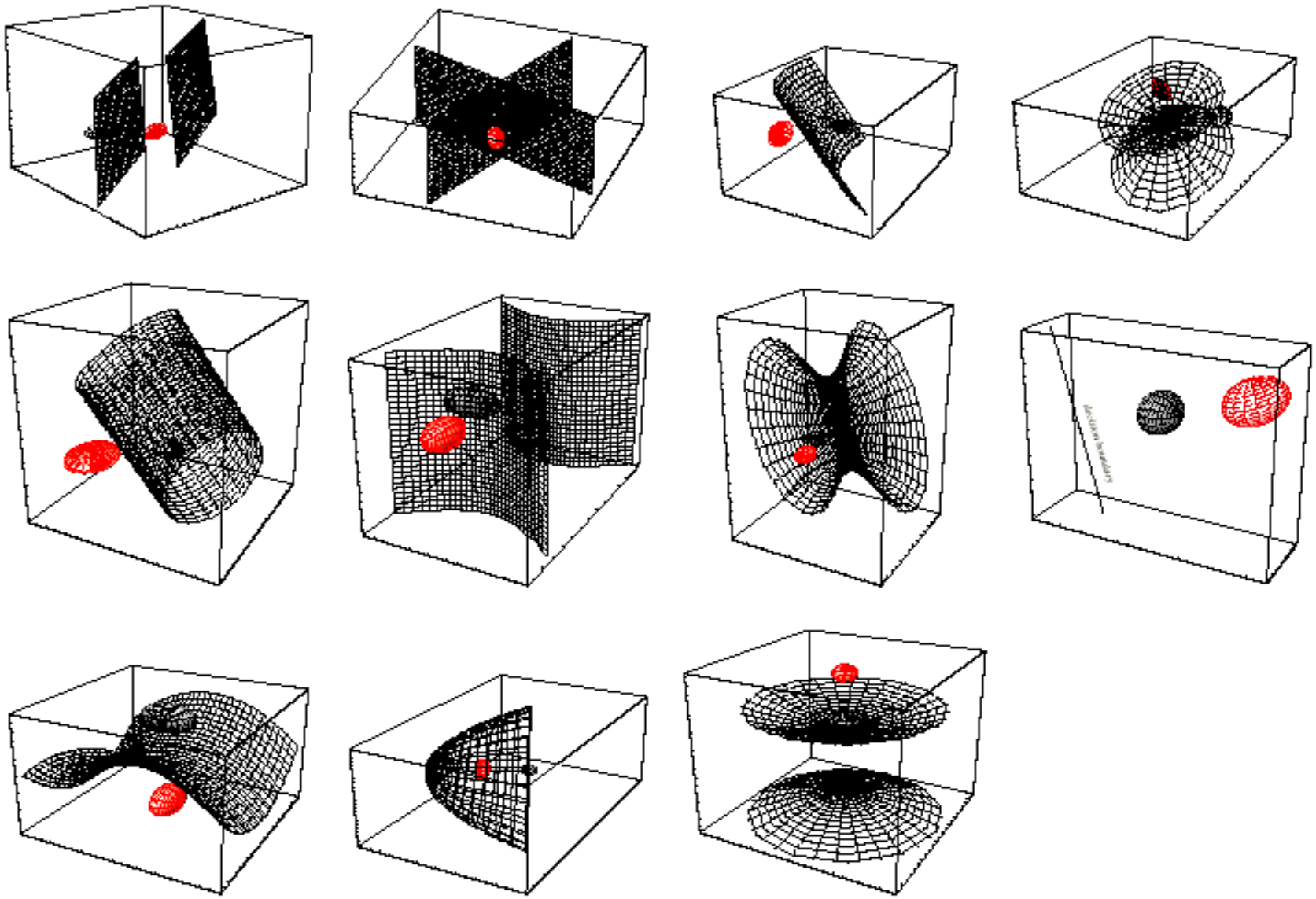




Funzioni discriminanti
Densità Normale Σ_i arbitraria (6)



Funzioni discriminanti - Densità Normale Σ_i arbitraria (7)



Funzioni discriminanti - Densità Normale Σ_i arbitraria (8)