

Tarea 1

Aprendizaje supervisado, funciones de pérdida y dimensión VC

Reconocimiento de Patrones y AA 26-01

Instrucciones: Resuelve los siguientes ejercicios de manera individual. La entrega es en un documento PDF. Puedes escribir tus respuestas en el documento mediante algún software o completamente a mano. Si lo haces a mano, cada paso debe ser legible, y las fotos que tomes se deben incorporar como parte del documento PDF.

1. [2.5 puntos] Dimensión VC

Para una clase de hipótesis de triángulos \mathcal{H}_{tri} :

- a) Escribe una función indicadora para evaluar si un punto 2D pertenece o no a una hipótesis de un triángulo particular $h_{\theta} \in \mathcal{H}_{\text{tri}}$.

La función indicadora debe determinar si un punto $(x, y) \in \mathbb{R}^2$ está dentro o fuera de un triángulo, regresando 1 si el punto está dentro y 0 si está fuera.

Utilizo las coordenadas baricéntricas para resolver este problema. Para un triángulo con vértices $V_1 = (x_1, y_1)$, $V_2 = (x_2, y_2)$, $V_3 = (x_3, y_3)$, cualquier punto $P = (x, y)$ se puede expresar como:

$$P = \lambda_1 V_1 + \lambda_2 V_2 + \lambda_3 V_3$$

donde $\lambda_1 + \lambda_2 + \lambda_3 = 1$.

Las coordenadas λ_1 , λ_2 y λ_3 se obtienen resolviendo el sistema:

$$x = \lambda_1 x_1 + \lambda_2 x_2 + \lambda_3 x_3 \quad (1)$$

$$y = \lambda_1 y_1 + \lambda_2 y_2 + \lambda_3 y_3 \quad (2)$$

$$1 = \lambda_1 + \lambda_2 + \lambda_3 \quad (3)$$

La solución es:

$$\lambda_1 = \frac{(y_2 - y_3)(x - x_3) + (x_3 - x_2)(y - y_3)}{(y_2 - y_3)(x_1 - x_3) + (x_3 - x_2)(y_1 - y_3)}$$

$$\lambda_2 = \frac{(y_3 - y_1)(x - x_3) + (x_1 - x_3)(y - y_3)}{(y_2 - y_3)(x_1 - x_3) + (x_3 - x_2)(y_1 - y_3)}$$

$$\lambda_3 = 1 - \lambda_1 - \lambda_2$$

Criterio de pertenencia:

Un punto pertenece al triángulo si y solo si todas sus coordenadas baricéntricas son no negativas:

$$P \in \text{Triángulo} \Leftrightarrow \lambda_1 \geq 0 \wedge \lambda_2 \geq 0 \wedge \lambda_3 \geq 0$$

Función indicadora resultante:

$$h_{\boldsymbol{\theta}}(x, y) = \begin{cases} 1 & \text{si } \lambda_1 \geq 0 \wedge \lambda_2 \geq 0 \wedge \lambda_3 \geq 0 \\ 0 & \text{en caso contrario} \end{cases}$$

- b) Debes escribir la función parametrizada por los parámetros $\boldsymbol{\theta}$ que tú consideres.

Parametrización propuesta:

Un triángulo en \mathbb{R}^2 queda completamente determinado por sus tres vértices. Cada vértice tiene dos coordenadas (x_i, y_i) , por lo que defino 6 parámetros en total.

Vector de parámetros:

$$\boldsymbol{\theta} = (x_1, y_1, x_2, y_2, x_3, y_3) \in \mathbb{R}^6$$

Función parametrizada:

La función $h_{\boldsymbol{\theta}} : \mathbb{R}^2 \rightarrow \{0, 1\}$ se define como:

$$h_{\boldsymbol{\theta}}(x, y) = \mathbb{1}_{\{\lambda_1(\boldsymbol{\theta}, x, y) \geq 0\}} \cdot \mathbb{1}_{\{\lambda_2(\boldsymbol{\theta}, x, y) \geq 0\}} \cdot \mathbb{1}_{\{\lambda_3(\boldsymbol{\theta}, x, y) \geq 0\}}$$

donde $\mathbb{1}_{\{A\}}$ es la función indicadora del evento A .

Implementación explícita:

Definiendo el denominador común:

$$D(\boldsymbol{\theta}) = (y_2 - y_3)(x_1 - x_3) + (x_3 - x_2)(y_1 - y_3)$$

Si $|D(\boldsymbol{\theta})| > \epsilon$ (triángulo no degenerado), entonces:

$$h_{\boldsymbol{\theta}}(x, y) = \begin{cases} \frac{(y_2 - y_3)(x - x_3) + (x_3 - x_2)(y - y_3)}{D(\boldsymbol{\theta})} \geq 0 & \text{y} \\ 1 & \text{si } \frac{(y_3 - y_1)(x - x_3) + (x_1 - x_3)(y - y_3)}{D(\boldsymbol{\theta})} \geq 0 \text{ y} \\ & 1 - \lambda_1 - \lambda_2 \geq 0 \\ 0 & \text{en caso contrario} \end{cases}$$

Si $|D(\boldsymbol{\theta})| \leq \epsilon$, entonces $h_{\boldsymbol{\theta}}(x, y) = 0$ (triángulo degenerado).

2. [2.5 puntos] Clases de hipótesis

Para una clase de hipótesis de elipses \mathcal{H}_{eli} donde una elipse con centro en la coordenada (h, k) se describe con la siguiente ecuación:

$$\frac{(x - h)^2}{a^2} + \frac{(y - k)^2}{b^2} = 1 \quad (4)$$

donde $a > 0$ y $b > 0$ son los parámetros para los semiejes de la elipse.

- a) Usa esta ecuación para escribir una función indicadora para evaluar si un punto en 2D pertenece o no a una hipótesis de una elipse particular $h_{\theta} \in \mathcal{H}_{\text{eli}}$, donde $\theta = \{h, k, a, b\}$.

Solución:

La ecuación estándar de una elipse con centro en (h, k) y semiejes a y b es:

$$\frac{(x - h)^2}{a^2} + \frac{(y - k)^2}{b^2} = 1$$

Esta ecuación define la frontera de la elipse. Para la función indicadora, generalizo para incluir el interior:

Criterio de pertenencia:

Defino la distancia normalizada:

$$d(x, y) = \frac{(x - h)^2}{a^2} + \frac{(y - k)^2}{b^2}$$

La interpretación es:

- Si $d(x, y) < 1$: el punto está dentro de la elipse
- Si $d(x, y) = 1$: el punto está sobre la elipse
- Si $d(x, y) > 1$: el punto está fuera de la elipse

Función indicadora:

Para clasificación binaria, considero que un punto pertenece a la clase positiva si está dentro o sobre la elipse:

$$h_{\theta}(x, y) = \begin{cases} 1 & \text{si } \frac{(x-h)^2}{a^2} + \frac{(y-k)^2}{b^2} \leq 1 \\ 0 & \text{en caso contrario} \end{cases}$$

La función indicadora $h_{\theta} : \mathbb{R}^2 \rightarrow \{0, 1\}$ divide el plano en dos regiones: el interior (incluyendo la frontera) de la elipse y el exterior.

- b) Escribe a manera de pseudocódigo un algoritmo para encontrar los parámetros $\theta' = \{h', k', a', b'\}$ de la elipse más pequeña que sólo permite un error menor o igual a un umbral α (relativamente pequeño; por ejemplo, 10 %) de clasificaciones incorrectas (para una de dos clases) del total de puntos $\mathcal{X} = \{(x_1, y_1), (x_2, y_2), \dots, (x_n, y_n)\}$.

Solución:

Formulación del problema

Buscamos la elipse más pequeña (en área) que clasifique correctamente al menos $(1 - \alpha) \cdot n$ puntos, donde $n = |\mathcal{X}|$.

Definición matemática: Minimizar $\pi a'b'$ (área de la elipse) sujeto a:

$$\sum_{i=1}^n \mathbb{1}_{\{h_{\theta'}(x_i, y_i) \neq y_i\}} \leq \lfloor \alpha \cdot n \rfloor$$

Estrategia de escalamiento

La idea es:

- a) Estimar la forma y orientación de la elipse usando la clase positiva
- b) Encontrar la escala mínima que respete el presupuesto de error

Algoritmo paso a paso

Algorithm 1 ElipseMinima - Encontrar elipse mínima con umbral de error

Require: $\mathcal{X} = \{(x_i, y_i)\}_{i=1}^n$, $\mathcal{Y} = \{y_i\}_{i=1}^n \subseteq \{-1, +1\}$, $\alpha \in (0, 1)$ **Ensure:** $\theta' = \{h', k', a', b'\}$

```
1: ▷ Separación por clases
2:  $\mathcal{X}^+ \leftarrow \{(x_i, y_i) : y_i = +1\}$ 
3:  $\mathcal{X}^- \leftarrow \{(x_i, y_i) : y_i = -1\}$ 
4:  $n^+ \leftarrow |\mathcal{X}^+|$ ,  $n^- \leftarrow |\mathcal{X}^-|$ 
5:  $\text{max\_errores} \leftarrow \lfloor \alpha \cdot n \rfloor$ 
6:
7: ▷ Estimación del centro
8:  $h' \leftarrow \frac{1}{n^+} \sum_{(x,y) \in \mathcal{X}^+} x$ 
9:  $k' \leftarrow \frac{1}{n^+} \sum_{(x,y) \in \mathcal{X}^+} y$ 
10:
11: ▷ Estimación de la forma base
12:  $\epsilon \leftarrow 1 \times 10^{-9}$ 
13:  $a_0 \leftarrow \sqrt{\frac{1}{n^+} \sum_{(x,y) \in \mathcal{X}^+} (x - h')^2 + \epsilon}$ 
14:  $b_0 \leftarrow \sqrt{\frac{1}{n^+} \sum_{(x,y) \in \mathcal{X}^+} (y - k')^2 + \epsilon}$ 
15:
16: ▷ Cálculo de distancias normalizadas
17: for cada punto  $(x_i, y_i) \in \mathcal{X}$  do
18:    $d_i \leftarrow \sqrt{\frac{(x_i - h')^2}{a_0^2} + \frac{(y_i - k')^2}{b_0^2}}$ 
19: end for
20:
21: ▷ Búsqueda de la escala óptima
22:  $\mathcal{S} \leftarrow$  valores únicos ordenados de  $\{d_i : i = 1, \dots, n\}$ 
23: for cada  $s \in \mathcal{S}$  (en orden ascendente) do
24:   errores  $\leftarrow 0$ 
25:   for  $i = 1$  to  $n$  do
26:     if  $d_i \leq s$  then
27:        $\text{pred}_i \leftarrow +1$ 
28:     else
29:        $\text{pred}_i \leftarrow -1$ 
30:     end if
31:     if  $\text{pred}_i \neq y_i$  then
32:       errores  $\leftarrow$  errores + 1
33:     end if
34:   end for
35:   if errores  $\leq \text{max\_errores}$  then
36:      $s^* \leftarrow s$ 
37:     break
38:   end if
39: end for
40:
41: ▷ Parámetros finales
42:  $a' \leftarrow a_0 \cdot s^*$ 
43:  $b' \leftarrow b_0 \cdot s^*$ 
44: return  $\theta' = \{h', k', a', b'\}$ 
```

- c) Ahora encuentra también a manera de pseudocódigo los parámetros del elipse más grande que no introduce nuevos errores. Puedes partir de los parámetros θ' del inciso anterior.

Solución:

Problema de optimización

Dada la elipse mínima $\theta' = \{h', k', a', b'\}$, buscamos la elipse máxima $\theta'' = \{h', k', a'', b''\}$ tal que:

$$\text{errores}(\theta'') = \text{errores}(\theta')$$

Es decir, no introducimos errores adicionales.

Restricción geométrica

Para no introducir nuevos errores, la elipse expandida no debe incluir puntos negativos que estaban correctamente clasificados como negativos.

Criterio: Si $(x_i, y_i) \in \mathcal{X}^-$ y está correctamente clasificado por θ' , entonces:

$$\frac{(x_i - h')^2}{(a')^2} + \frac{(y_i - k')^2}{(b')^2} > 1$$

Factor de expansión

Si escalamos uniformemente: $a'' = s \cdot a'$ y $b'' = s \cdot b'$ con $s \geq 1$, entonces la nueva distancia normalizada para el punto (x_i, y_i) es:

$$d_i^{(s)} = \sqrt{\frac{(x_i - h')^2}{(s \cdot a')^2} + \frac{(y_i - k')^2}{(s \cdot b')^2}} = \frac{d_i^{(\text{original})}}{s}$$

Algoritmo de expansión

Algorithm 2 ElipseMaxima - Encontrar elipse máxima sin nuevos errores

Require: $\theta' = \{h', k', a', b'\}$, \mathcal{X}, \mathcal{Y}
Ensure: $\theta'' = \{h', k', a'', b''\}$

```
1: ▷ Calcular distancias originales
2: for cada punto  $(x_i, y_i) \in \mathcal{X}$  do
3:    $d_i^{(\text{original})} \leftarrow \sqrt{\frac{(x_i-h')^2}{(a')^2} + \frac{(y_i-k')^2}{(b')^2}}$ 
4: end for
5: ▷ Identificar puntos negativos externos
6: 
7:  $\mathcal{N} \leftarrow \{i : y_i = -1 \text{ y } d_i^{(\text{original})} > 1\}$ 
8: ▷ Calcular factor de expansión máximo
9: 
10: if  $\mathcal{N} \neq \emptyset$  then
11:    $\delta \leftarrow 1 \times 10^{-6}$ 
12:    $s_{\max} \leftarrow \min_{i \in \mathcal{N}} d_i^{(\text{original})} - \delta$ 
13:    $s_{\max} \leftarrow \max(s_{\max}, 1, 0)$ 
14: else
15:    $s_{\max} \leftarrow 1,0$ 
16: end if
17: ▷ Parámetros de la elipse máxima
18: 
19:  $a'' \leftarrow s_{\max} \cdot a'$ 
20:  $b'' \leftarrow s_{\max} \cdot b'$ 
21: ▷ Verificación final
22: 
23:  $\text{errores\_original} \leftarrow \text{contar\_errores}(\mathcal{X}, \mathcal{Y}, \theta')$ 
24:  $\text{errores\_expandida} \leftarrow \text{contar\_errores}(\mathcal{X}, \mathcal{Y}, \{h', k', a'', b''\})$ 
25: while  $\text{errores\_expandida} > \text{errores\_original}$  do
26:    $s_{\max} \leftarrow s_{\max} \times 0,999$ 
27:    $a'' \leftarrow s_{\max} \cdot a'$ 
28:    $b'' \leftarrow s_{\max} \cdot b'$ 
29:    $\text{errores\_expandida} \leftarrow \text{contar\_errores}(\mathcal{X}, \mathcal{Y}, \{h', k', a'', b''\})$ 
30: end while
31: 
32: return  $\theta'' = \{h', k', a'', b''\}$ 
```

- d) Finalmente propón como hipótesis para la función indicadora un elipse que esté entre ambos (de los incisos b y c), por ejemplo a la mitad del camino paramétricamente hablando.

Solución:

Motivación para la interpolación

La elipse mínima θ' minimiza el error de entrenamiento pero puede ser muy conservadora (alto sesgo). La elipse máxima θ'' maximiza el margen pero puede ser muy permisiva. Una interpolación puede balancear estos extremos.

Interpolación lineal

Para un parámetro de interpolación $\lambda \in [0, 1]$, definimos:

$$h_{\text{final}} = h' \quad (\text{el centro no cambia}) \quad (5)$$

$$k_{\text{final}} = k' \quad (\text{el centro no cambia}) \quad (6)$$

$$a_{\text{final}} = (1 - \lambda)a' + \lambda a'' \quad (7)$$

$$b_{\text{final}} = (1 - \lambda)b' + \lambda b'' \quad (8)$$

Caso especial ($\lambda = 0,5$): Para el punto medio:

$$a_{\text{final}} = \frac{a' + a''}{2} \quad (9)$$

$$b_{\text{final}} = \frac{b' + b''}{2} \quad (10)$$

Función indicadora interpolada

$$h_{\text{final}}(x, y) = \begin{cases} 1 & \text{si } \frac{(x-h')^2}{a_{\text{final}}^2} + \frac{(y-k')^2}{b_{\text{final}}^2} \leq 1 \\ 0 & \text{en caso contrario} \end{cases}$$

Interpretación geométrica

La elipse interpolada tiene:

- **Área:** $\pi a_{\text{final}} b_{\text{final}} = \pi \cdot \frac{a' + a''}{2} \cdot \frac{b' + b''}{2}$
- **Error esperado:** Entre el error mínimo y el error de la elipse máxima
- **Generalización:** Potencialmente mejor que los extremos

Validación

Para validar la elección de λ , se puede:

- a) Usar validación cruzada para seleccionar $\lambda^* \in [0, 1]$
- b) Evaluar el error en un conjunto de prueba
- c) Comparar con $\lambda = 0$ (elipse mínima) y $\lambda = 1$ (elipse máxima)
- e) Implementarás esto en la práctica asociada a este ejercicio.

Guía para la implementación:

La implementación debe incluir las siguientes funciones matemáticas:

Función 1: Evaluación de la función indicadora

$$f_{\text{indicadora}}(\boldsymbol{\theta}, x, y) = \mathbb{1}_{\left\{ \frac{(x-h)^2}{a^2} + \frac{(y-k)^2}{b^2} \leq 1 \right\}}$$

Función 2: Cálculo de error

$$E(\boldsymbol{\theta}) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \mathbb{1}_{\{h_{\boldsymbol{\theta}}(x_i, y_i) \neq y_i\}}$$

Función 3: Optimización de parámetros

Implementar los algoritmos ElipseMinima y ElipseMaxima descritos en los incisos anteriores.

3. [2.5 puntos] Función de pérdida esperada

Dados los valores de una función de pérdida L_{kj} , el riesgo esperado

$$E[L] = \sum_k \sum_j \int_{R_j} L_{kj} p(x, \mathcal{C}_k) dx \quad (11)$$

se minimiza si para cada x escogemos la clase para minimizar la siguiente expresión (ya que $p(x)$ no contiene al parámetro de clase):

$$\arg \min_j \left(\sum_k L_{kj} p(\mathcal{C}_k|x) p(x) \right) = \arg \min_j \left(\sum_k L_{kj} p(\mathcal{C}_k|x) \right) \quad (12)$$

Verifica que si $L_{kj} = 1 - I_{kj}$, donde I_{kj} son los elementos de la matriz identidad, entonces la minimización anterior se reduce a escoger la clase i con la probabilidad más grande $p(\mathcal{C}_i|x)$.

Solución:

Desarrollo de la demostración:

Analizo un problema de decisión bayesiana donde:

- \mathcal{C}_k representa las clases verdaderas ($k = 1, 2, \dots, K$)
- j representa las decisiones o predicciones ($j = 1, 2, \dots, K$)
- L_{kj} es la pérdida incurrida al decidir la clase j cuando la clase verdadera es k
- $p(\mathcal{C}_k|x)$ es la probabilidad a posteriori de la clase k dado el input x

Definición de la función de pérdida 0-1:

La función de pérdida $L_{kj} = 1 - I_{kj}$ donde I_{kj} es el elemento (k, j) de la matriz identidad se expresa como:

$$L_{kj} = 1 - I_{kj} = \begin{cases} 0 & \text{si } k = j \text{ (clasificación correcta)} \\ 1 & \text{si } k \neq j \text{ (clasificación incorrecta)} \end{cases}$$

Esta es la función de pérdida 0-1 estándar que penaliza igualmente todos los errores de clasificación.

Calcular el riesgo esperado para una decisión específica

Para una decisión fija j , el riesgo esperado es:

$$R(j|x) = \sum_k L_{kj} p(\mathcal{C}_k|x)$$

Sustituyendo $L_{kj} = 1 - I_{kj}$:

$$R(j|x) = \sum_k (1 - I_{kj}) p(\mathcal{C}_k|x) \quad (13)$$

$$= \sum_k p(\mathcal{C}_k|x) - \sum_k I_{kj} p(\mathcal{C}_k|x) \quad (14)$$

Simplificar usando propiedades de las probabilidades

Analizamos cada término:

Primer término: $\sum_k p(\mathcal{C}_k|x) = 1$ (axioma de probabilidad)

Segundo término: $\sum_k I_{kj}p(\mathcal{C}_k|x)$

Por definición de la matriz identidad, $I_{kj} = 1$ solo cuando $k = j$, y $I_{kj} = 0$ en todos los demás casos. Por tanto:

$$\sum_k I_{kj}p(\mathcal{C}_k|x) = I_{jj}p(\mathcal{C}_j|x) + \sum_{k \neq j} I_{kj}p(\mathcal{C}_k|x) = 1 \cdot p(\mathcal{C}_j|x) + \sum_{k \neq j} 0 \cdot p(\mathcal{C}_k|x) = p(\mathcal{C}_j|x)$$

Expresión final del riesgo

Combinando los resultados:

$$R(j|x) = 1 - p(\mathcal{C}_j|x)$$

Interpretación: El riesgo de decidir la clase j es igual a la probabilidad de que la clase verdadera NO sea j .

Encontrar la decisión óptima

Para minimizar el riesgo esperado, debemos encontrar:

$$j^* = \arg \min_j R(j|x) = \arg \min_j [1 - p(\mathcal{C}_j|x)]$$

Como el término constante 1 no afecta la minimización:

$$j^* = \arg \min_j [-p(\mathcal{C}_j|x)] = \arg \max_j p(\mathcal{C}_j|x)$$

Conclusión y interpretación

Resultado principal: Con la función de pérdida 0-1, la regla de decisión óptima de Bayes es:

$$i^* = \arg \max_j p(\mathcal{C}_j|x)$$

Interpretación práctica:

- Elegir siempre la clase con mayor probabilidad a posteriori
- Esta regla minimiza la probabilidad de error de clasificación
- Es la base teórica para muchos clasificadores bayesianos

Verificación matemática

Para verificar que efectivamente hemos demostrado lo requerido, observemos que:

1. **Partimos de:** $\arg \min_j (\sum_k L_{kj}p(\mathcal{C}_k|x))$ con $L_{kj} = 1 - I_{kj}$
2. **Demostramos que esto es igual a:** $\arg \min_j [1 - p(\mathcal{C}_j|x)]$
3. **Lo cual es equivalente a:** $\arg \max_j p(\mathcal{C}_j|x)$
4. **Por tanto:** La minimización se reduce efectivamente a escoger la clase i con la probabilidad más grande $p(\mathcal{C}_i|x)$ ■

Extensión teórica:

Este resultado es fundamental en la teoría de decisiones bayesianas porque establece que, bajo pérdida 0-1:

- La frontera de decisión óptima está dada por $p(\mathcal{C}_i|x) = p(\mathcal{C}_j|x)$ para clases $i \neq j$
- El error de Bayes (error mínimo alcanzable) es $1 - \max_j p(\mathcal{C}_j|x)$
- Cualquier clasificador que no siga esta regla tendrá error subóptimo

4. [2.5 puntos] Función de pérdida relajada

En los ejercicios 1 y 2 obtuviste funciones indicadoras para evaluar la pertenencia o no de puntos a hipótesis concretas.

- a) Debes extender la función indicadora para crear una nueva función que no evalúe de manera estrictamente “dura” la pertenencia a la hipótesis sino que permita considerar puntos cercanos a la frontera de la hipótesis de manera penalizada.

Solución:

Justificación para la función suave:

Las funciones indicadoras binarias presentan limitaciones importantes:

- **Discontinuidad:** Cambio abrupto de 0 a 1 en la frontera
- **No diferenciabilidad:** Dificulta la optimización con métodos basados en gráfico
- **Rigidez:** No permite grados de pertenencia o incertidumbre

Propuesta de función de pérdida relajada:

Mi función de pérdida relajada $L_{\text{soft}} : \mathbb{R}^2 \rightarrow [0, 1]$ satisface:

- a) **Continuidad:** $L_{\text{soft}}(x, y)$ es continua
- b) **Monotonidad:** Mayor distancia a la frontera implica mayor pérdida
- c) **Compatibilidad:** $\lim_{\delta \rightarrow 0^+} L_{\text{soft}}(x, y) = L_{\text{hard}}(x, y)$

Definición matemática para elipse

Para una hipótesis de elipse con parámetros $\boldsymbol{\theta} = \{h, k, a, b\}$, definimos la **distancia normalizada**:

$$d(x, y; \boldsymbol{\theta}) = \sqrt{\frac{(x - h)^2}{a^2} + \frac{(y - k)^2}{b^2}}$$

Interpretación geométrica:

- $d(x, y) = 1$: punto en la frontera de la elipse
- $d(x, y) < 1$: punto en el interior
- $d(x, y) > 1$: punto en el exterior

Función de pérdida relajada por partes

Definimos la función de pérdida suave con parámetro de suavidad $\delta > 0$:

$$L_{\text{soft}}(x, y; \boldsymbol{\theta}, \delta) = \begin{cases} 0 & \text{si } d(x, y) \leq 1 \\ \frac{d(x, y) - 1}{\delta} & \text{si } 1 < d(x, y) \leq 1 + \delta \\ 1 & \text{si } d(x, y) > 1 + \delta \end{cases}$$

Propiedades matemáticas:

- a) **Rango:** $L_{\text{soft}} \in [0, 1]$

- b) **Continuidad:** La función es continua en todo \mathbb{R}^2
- c) **Límite:** $\lim_{\delta \rightarrow 0^+} L_{\text{soft}}(x, y) = \mathbb{1}_{\{d(x,y) > 1\}}$
- b) Tú debes definir una manera de extender la frontera hasta cierta distancia máxima más allá de la frontera original. Por ejemplo: englobando a la hipótesis dentro de un círculo con cierto radio, o definiendo una distancia Δd más allá de la frontera de la hipótesis.

Solución:

Concepto de zona de transición

La extensión de la frontera crea una **zona de transición** (o margen suave) alrededor de la hipótesis original donde la clasificación no es binaria sino gradual.

Definición formal de la extensión

Para una elipse con parámetros $\boldsymbol{\theta} = \{h, k, a, b\}$ y parámetro de extensión $\delta > 0$, definimos tres regiones:

$$\mathcal{R}_{\text{interior}} = \{(x, y) : d(x, y; \boldsymbol{\theta}) \leq 1\} \quad (15)$$

$$\mathcal{R}_{\text{transición}} = \{(x, y) : 1 < d(x, y; \boldsymbol{\theta}) \leq 1 + \delta\} \quad (16)$$

$$\mathcal{R}_{\text{exterior}} = \{(x, y) : d(x, y; \boldsymbol{\theta}) > 1 + \delta\} \quad (17)$$

Interpretación geométrica de la extensión

La zona de transición $\mathcal{R}_{\text{transición}}$ forma una “cáscara elíptica” definida por:

Frontera interior: $\frac{(x-h)^2}{a^2} + \frac{(y-k)^2}{b^2} = 1$

Frontera exterior: $\frac{(x-h)^2}{(a\sqrt{1+\delta})^2} + \frac{(y-k)^2}{(b\sqrt{1+\delta})^2} = 1$

Parametrización alternativa usando distancia euclíadiana

Método 1: Extensión uniforme

Extender la elipse uniformemente en todas las direcciones:

$$\boldsymbol{\theta}_{\text{ext}} = \{h, k, a + \Delta a, b + \Delta b\}$$

donde $\Delta a, \Delta b > 0$ son extensiones en los ejes principales.

Método 2: Extensión por factor de escala

Escalar la elipse por un factor $s > 1$:

$$\boldsymbol{\theta}_{\text{ext}} = \{h, k, s \cdot a, s \cdot b\}$$

La zona de transición está entre las elipses con factores de escala 1 y s .

Elección del parámetro de extensión

El parámetro δ controla el ancho de la zona de transición:

- **δ pequeño** ($\delta < 0,1$): Transición muy estrecha, comportamiento casi binario
- **δ moderado** ($0,1 \leq \delta \leq 1$): Balance entre suavidad y precisión

- **δ grande ($\delta > 1$):** Transición muy gradual, alta tolerancia

Criterio de selección: δ puede elegirse mediante validación cruzada o como fracción del tamaño característico de la hipótesis (ej. $\delta = 0,1 \cdot \max(a, b)$).

- En la región donde extiendas la frontera la función de pérdida debe penalizar en lugar de evaluar a cero.

Solución:

Principio de penalización gradual

En lugar de una penalización binaria (0 o 1), implementamos una penalización que crece monotónicamente con la distancia a la frontera original.

Función de penalización lineal

La función de pérdida relajada con penalización lineal es:

$$L_{\text{relajada}}(x, y; \boldsymbol{\theta}, \delta) = \begin{cases} 0 & \text{si } d(x, y) \leq 1 \\ \frac{d(x, y) - 1}{\delta} & \text{si } 1 < d(x, y) \leq 1 + \delta \\ 1 & \text{si } d(x, y) > 1 + \delta \end{cases}$$

Justificación matemática:

Región interior ($d \leq 1$):

$$L_{\text{relajada}}(x, y) = 0$$

Interpretación: Clasificación completamente correcta, sin penalización.

Zona de transición ($1 < d \leq 1 + \delta$):

$$L_{\text{relajada}}(x, y) = \frac{d - 1}{\delta} \in (0, 1)$$

Interpretación: Penalización proporcional a la distancia de la frontera.

Región exterior ($d > 1 + \delta$):

$$L_{\text{relajada}}(x, y) = 1$$

Interpretación: Penalización máxima para puntos claramente fuera de la hipótesis extendida.

Propiedades de la función de penalización

Continuidad: Verificamos que la función es continua en los puntos de transición:

En $d = 1$:

$$\lim_{d \rightarrow 1^-} L(d) = 0, \quad \lim_{d \rightarrow 1^+} L(d) = \frac{1 - 1}{\delta} = 0$$

En $d = 1 + \delta$:

$$\lim_{d \rightarrow (1+\delta)^-} L(d) = \frac{(1 + \delta) - 1}{\delta} = 1, \quad \lim_{d \rightarrow (1+\delta)^+} L(d) = 1$$

Monotonidad: En la zona de transición:

$$\frac{dL}{dd} = \frac{1}{\delta} > 0$$

Interpretación probabilística

La función relajada puede interpretarse como la probabilidad de clasificación incorrecta:

$$L_{\text{relajada}}(x, y) \approx P(\text{clasificación incorrecta} | \text{posición en zona de transición})$$

donde la probabilidad aumenta linealmente con la distancia a la frontera.

- d) Puedes elegir para este ejercicio una de las hipótesis de los ejercicios 1 y 2.

Solución:

Elección: Hipótesis de elipse del Ejercicio 2

Justificación de la elección

Elegimos la clase de hipótesis de elipses \mathcal{H}_{eli} por las siguientes ventajas:

- a) **Simplicidad computacional:** La distancia normalizada se calcula eficientemente
- b) **Diferenciabilidad:** La función es diferenciable en casi todo punto
- c) **Flexibilidad geométrica:** Las elipses pueden adaptarse a diferentes formas de datos
- d) **Parametrización compacta:** Solo 4 parámetros $\{h, k, a, b\}$ más δ

Definición completa de la función relajada

Para una elipse con parámetros $\boldsymbol{\theta} = \{h, k, a, b\}$ y parámetro de suavidad $\delta > 0$:

$$L_{\text{elipse}}(x, y; \boldsymbol{\theta}, \delta) = \begin{cases} 0 & \text{si } d(x, y) \leq 1 \\ \frac{d(x, y) - 1}{\delta} & \text{si } 1 < d(x, y) \leq 1 + \delta \\ 1 & \text{si } d(x, y) > 1 + \delta \end{cases}$$

donde:

$$d(x, y) = \sqrt{\frac{(x - h)^2}{a^2} + \frac{(y - k)^2}{b^2}}$$

Familia de funciones relajadas

Variando δ , obtenemos una familia de funciones:

$$\mathcal{F}_{\text{relajada}} = \{L_{\text{elipse}}(\cdot; \boldsymbol{\theta}, \delta) : \boldsymbol{\theta} \in \mathbb{R}^4, \delta \in \mathbb{R}^+\}$$

Casos límite:

- $\delta \rightarrow 0^+$: Recuperamos la función indicadora binaria

- $\delta \rightarrow \infty$: La función se vuelve completamente suave pero pierde precisión

Análisis de la superficie de pérdida

La función $L_{\text{elipse}}(x, y)$ define una superficie en \mathbb{R}^3 con:

Valores en regiones clave:

- **Centro de la elipse:** $L(h, k) = 0$
- **Frontera original:** $L(x, y) = 0$ para $d(x, y) = 1$
- **Frontera extendida:** $L(x, y) = 1$ para $d(x, y) = 1 + \delta$

Gradiente en la zona de transición:

$$\nabla L(x, y) = \frac{1}{\delta} \cdot \frac{\nabla d(x, y)}{d(x, y)} \cdot \left(\frac{x - h}{a^2}, \frac{y - k}{b^2} \right)^T$$

- e) Implementarás esto en la práctica asociada a este ejercicio.

Solución:

Guía para la implementación

La implementación debe incluir las siguientes componentes matemáticas:

Función 1: Distancia normalizada

$$d(\mathbf{x}; \boldsymbol{\theta}) = \sqrt{(\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu})^T \boldsymbol{\Sigma}^{-1} (\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu})}$$

donde $\boldsymbol{\mu} = (h, k)^T$ y $\boldsymbol{\Sigma} = \text{diag}(a^2, b^2)$.

Función 2: Pérdida relajada

$$L(\mathbf{x}; \boldsymbol{\theta}, \delta) = \max \left(0, \min \left(1, \frac{d(\mathbf{x}) - 1}{\delta} \right) \right)$$

Función 3: Gradiente de la pérdida

Para optimización, el gradiente respecto a los parámetros es:

$$\frac{\partial L}{\partial \boldsymbol{\theta}} = \begin{cases} \mathbf{0} & \text{si } d \leq 1 \text{ o } d > 1 + \delta \\ \frac{1}{\delta} \frac{\partial d}{\partial \boldsymbol{\theta}} & \text{si } 1 < d \leq 1 + \delta \end{cases}$$

Algoritmo de optimización:

Algorithm 3 Optimización de Función de Pérdida Relajada

Require: $\{\mathbf{x}_i\}_{i=1}^n, \{y_i\}_{i=1}^n, \delta > 0, \alpha > 0$ (tasa de aprendizaje), $\epsilon > 0$ (tolerancia)

Ensure: $\boldsymbol{\theta}^*$ (parámetros óptimos)

```
1: ▷ Inicialización
2: Inicializar  $\boldsymbol{\theta}^{(0)}$  aleatoriamente
3:  $t \leftarrow 0$ 
4: converged  $\leftarrow$  false
5:
6: while  $\neg$ converged do
7:   ▷ Calcular pérdida total
8:      $L_{\text{total}} \leftarrow \sum_{i=1}^n L(\mathbf{x}_i; \boldsymbol{\theta}^{(t)}, \delta)$ 
9:
10:    ▷ Calcular gradientes
11:     $\nabla_{\boldsymbol{\theta}} L_{\text{total}} \leftarrow \sum_{i=1}^n \nabla_{\boldsymbol{\theta}} L(\mathbf{x}_i; \boldsymbol{\theta}^{(t)}, \delta)$ 
12:
13:    ▷ Actualizar parámetros
14:     $\boldsymbol{\theta}^{(t+1)} \leftarrow \boldsymbol{\theta}^{(t)} - \alpha \nabla_{\boldsymbol{\theta}} L_{\text{total}}$ 
15:
16:    ▷ Verificar convergencia
17:    if  $\|\boldsymbol{\theta}^{(t+1)} - \boldsymbol{\theta}^{(t)}\| < \epsilon$  then
18:      converged  $\leftarrow$  true
19:    end if
20:     $t \leftarrow t + 1$ 
21: end while
22:
23: return  $\boldsymbol{\theta}^* = \boldsymbol{\theta}^{(t)}$ 
```

Validación de la implementación:

- a) Verificar que $\lim_{\delta \rightarrow 0} L(\mathbf{x}) = L_{\text{hard}}(\mathbf{x})$
- b) Comprobar continuidad en las fronteras
- c) Validar monotonicidad en la zona de transición