Introducción a ciencia de datos

Emilien Joly – Ayu. Samuel Gurrola

CIMAT - Semestre Agosto 2024 - Diciembre 2024

Horarios y enlaces

Profesor: Emilien Joly (emilien.joly@cimat.mx)
Ayudante: Samuel Gurrola (samuel.gurrola@cimat.mx)

Fecha de inicio : **martes 20 de agosto**

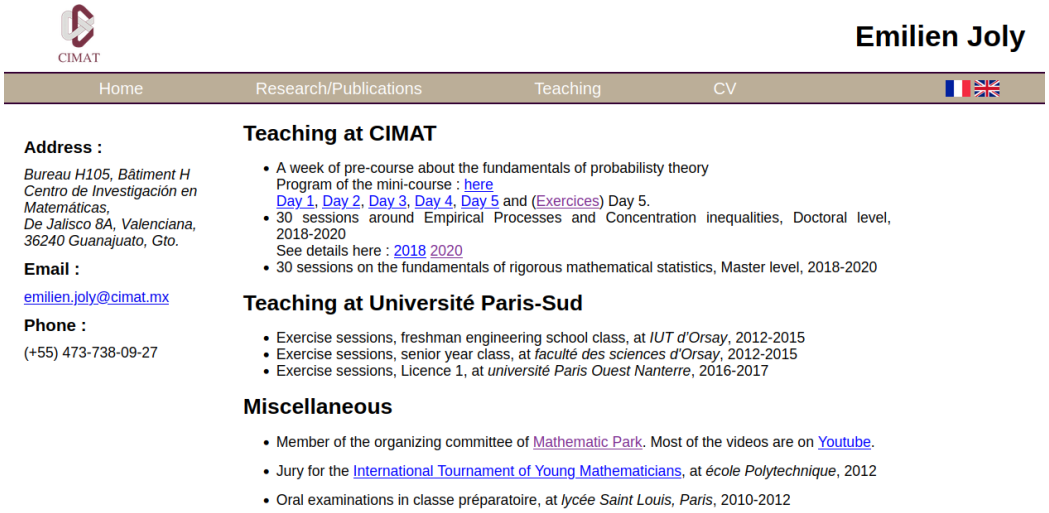
Horarios de clase: martes y jueves, 11:00-12:20
Horarios de prácticas: viernes (horario a definir)

Fecha de fin de clases : **jueves 28 de noviembre**

Información útil

La información del curso de EM se encontrará en la pagina web :

- `https://joly415.perso.math.cnrs.fr/EnseignementEG.htm`



CIMAT

Emilien Joly

Home | Research/Publications | Teaching | CV

Address :

Bureau H105, Bâtiment H
Centro de Investigación en Matemáticas,
De Jalisco 8A, Valenciana,
36240 Guanajuato, Gto.

Email :

emilien.joly@cimat.mx

Phone :

(+55) 473-738-09-27

Teaching at CIMAT

- A week of pre-course about the fundamentals of probabilisty theory
  Program of the mini-course : here
  Day 1, Day 2, Day 3, Day 4, Day 5 and (Exercices) Day 5.
- 30 sessions around Empirical Processes and Concentration inequalities, Doctoral level, 2018-2020
  See details here : 2018 2020
- 30 sessions on the fundamentals of rigorous mathematical statistics, Master level, 2018-2020

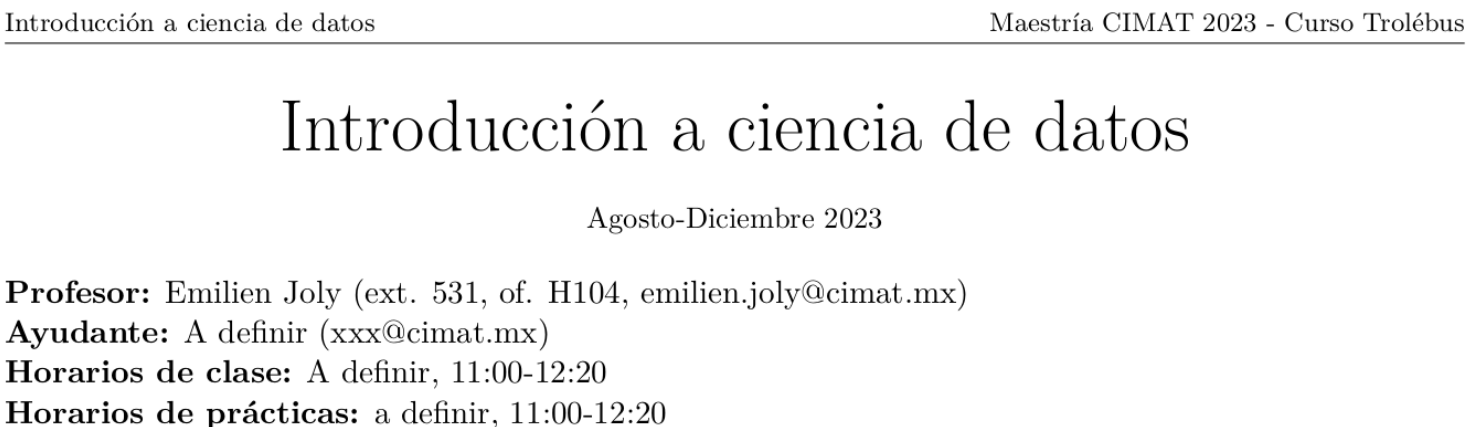
Teaching at Université Paris-Sud

- Exercise sessions, freshman engineering school class, at *IUT d'Orsay*, 2012-2015
- Exercise sessions, senior year class, at *faculté des sciences d'Orsay*, 2012-2015
- Exercise sessions, Licence 1, at *université Paris Ouest Nanterre*, 2016-2017

Miscellaneous

- Member of the organizing committee of Mathematic Park. Most of the videos are on Youtube.
- Jury for the International Tournament of Young Mathematicians, at *école Polytechnique*, 2012
- Oral examinations in classe préparatoire, at *lycée Saint Louis, Paris*, 2010-2012

- El temario del curso : aqui



Introducción a ciencia de datos — Maestría CIMAT 2023 - Curso Trolébus

Introducción a ciencia de datos

Agosto-Diciembre 2023

Profesor: Emilien Joly (ext. 531, of. H104, emilien.joly@cimat.mx)
Ayudante: A definir (xxx@cimat.mx)
Horarios de clase: A definir, 11:00-12:20
Horarios de prácticas: a definir, 11:00-12:20

Tareas y exámenes

Fechas de Tareas:

- Tarea 1: Inicio 27 agosto $\rightarrow$ Entrega 06 septiembre
- Tarea 2: Inicio 10 septiembre $\rightarrow$ Entrega 20 septiembre
- Examen 1 : Viernes 27 septiembre.
- Tarea 3: Inicio 03 octubre $\rightarrow$ Entrega 11 octubre
- Tarea 4: Inicio 15 octubre $\rightarrow$ Entrega 25 octubre
- Examen 2 : Viernes 01 noviembre.
- Tarea 5: Inicio 05 noviembre $\rightarrow$ Entrega 15 noviembre
- Examen final : (tentativo) martes 03 diciembre.

Calificación:

Las tareas cuentan por **2/5** de la calificación final.
Los exámenes parciales cuentan por **1/5** cada uno.
El examen final cuenta por **1/5**.

Objectivos

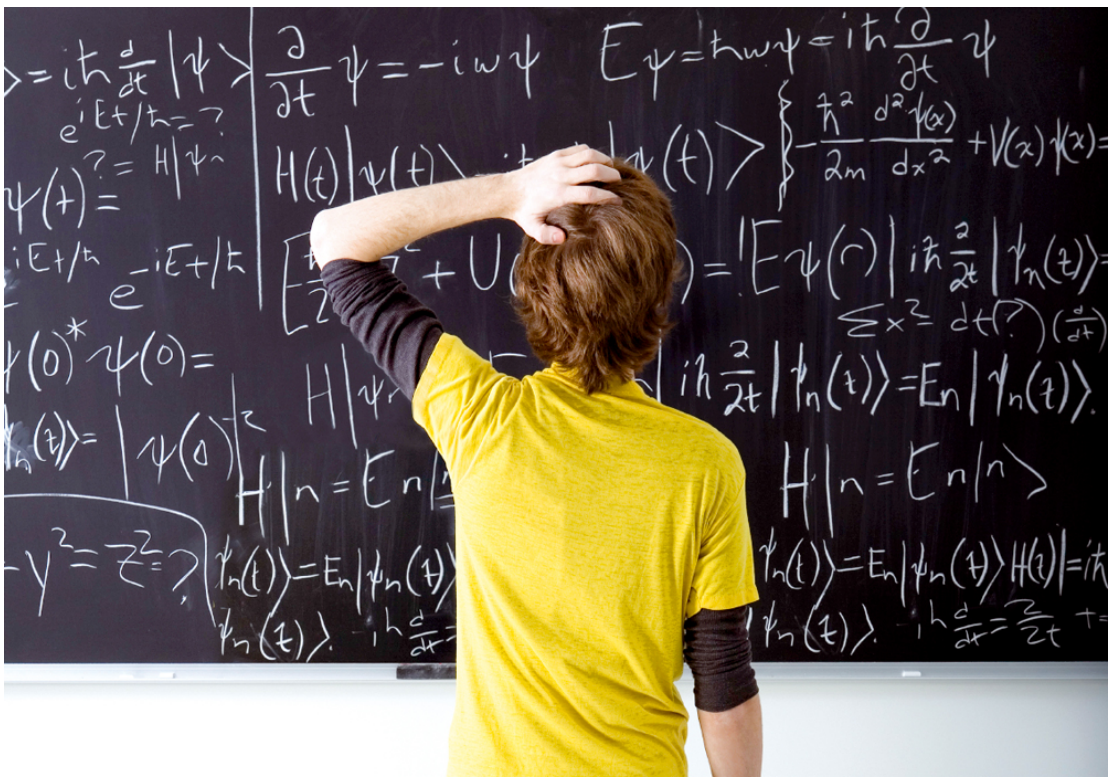
1. Introducir los conceptos clásicos de aprendizaje maquina, clasificación a agrupación de datos.
2. Evaluar la pertinencia y la calidad de algoritmos de aprendizaje maquina en función del contexto.
3. Aplicar los algoritmos del curso a algunos ejemplos de datos reales.
4. Familiarizarse con los algoritmos modernos de aprendizaje maquina.

¿Qué NO es la ciencia de datos?

¿Qué NO es la ciencia de datos?

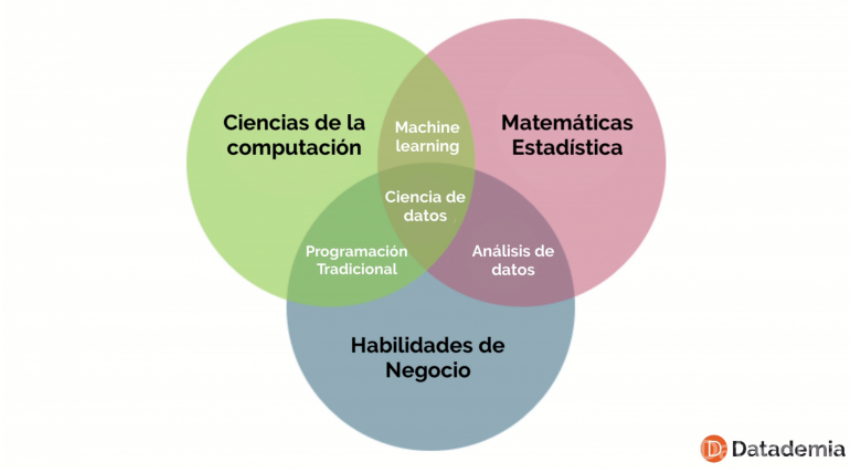
¿Qué NO es la ciencia de datos?

¿Qué NO es la ciencia de datos?

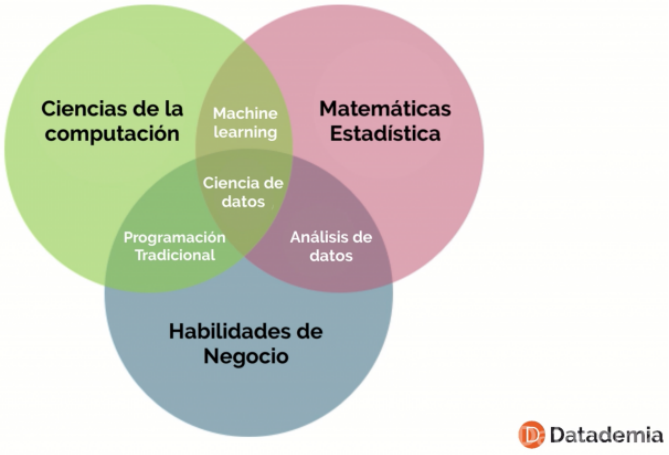


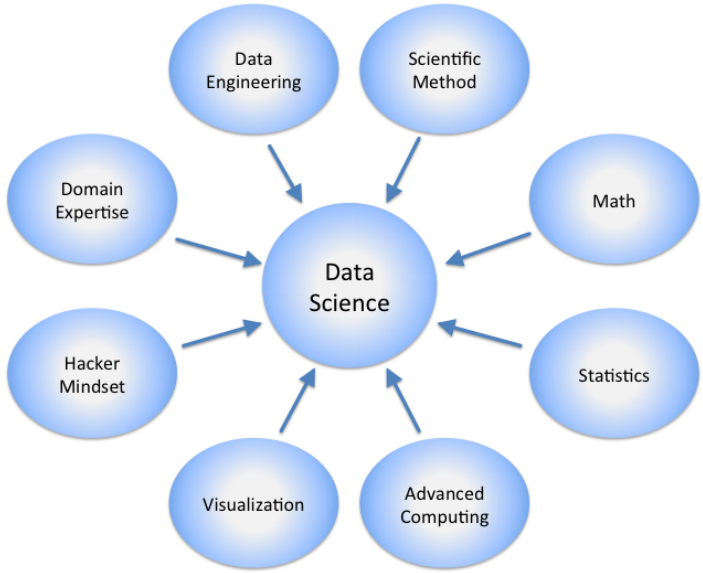
¿Qué es la ciencia de datos?

¿Qué es la ciencia de datos?

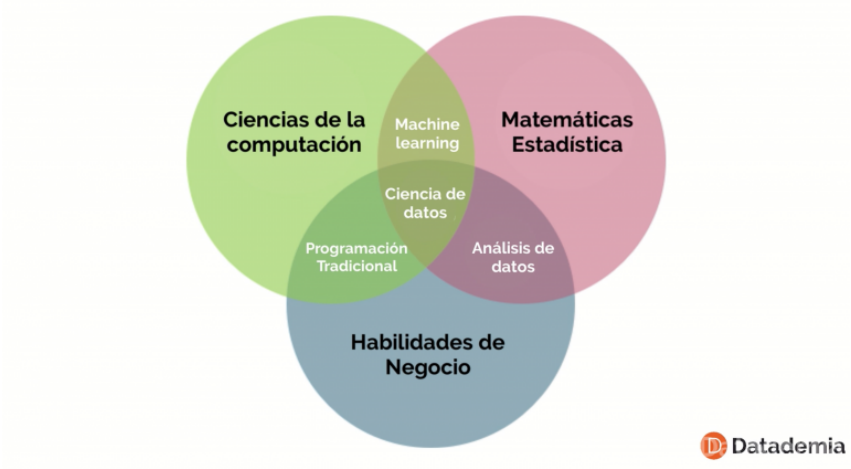


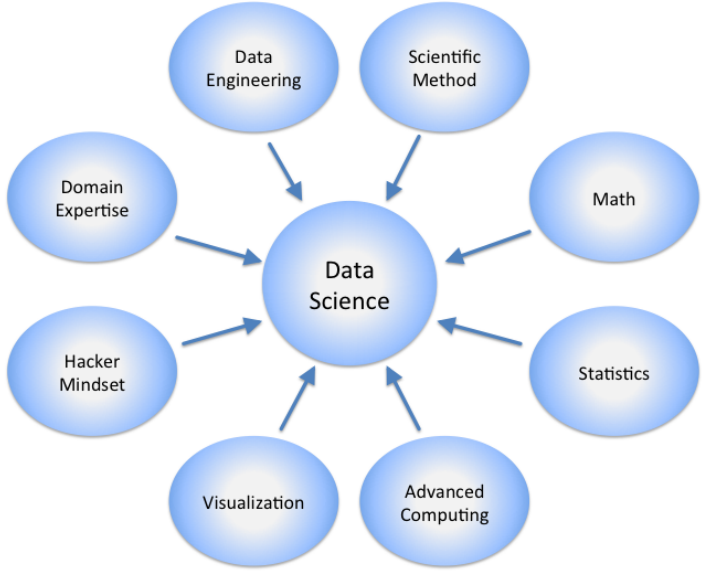
¿Qué es la ciencia de datos?



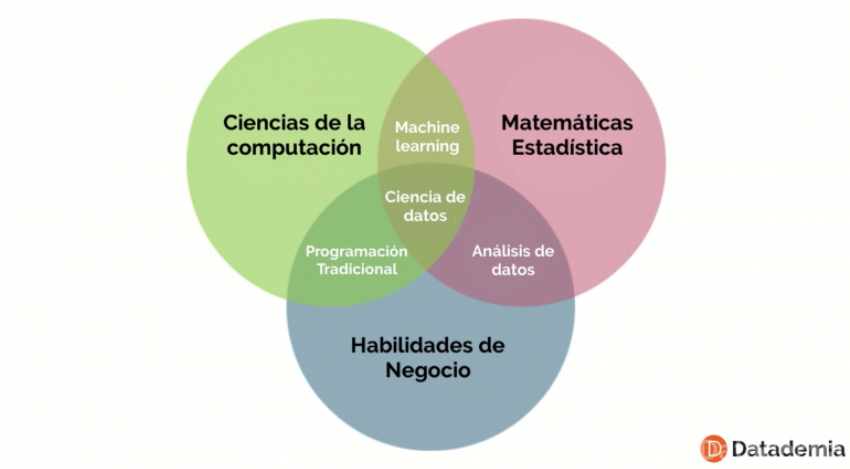


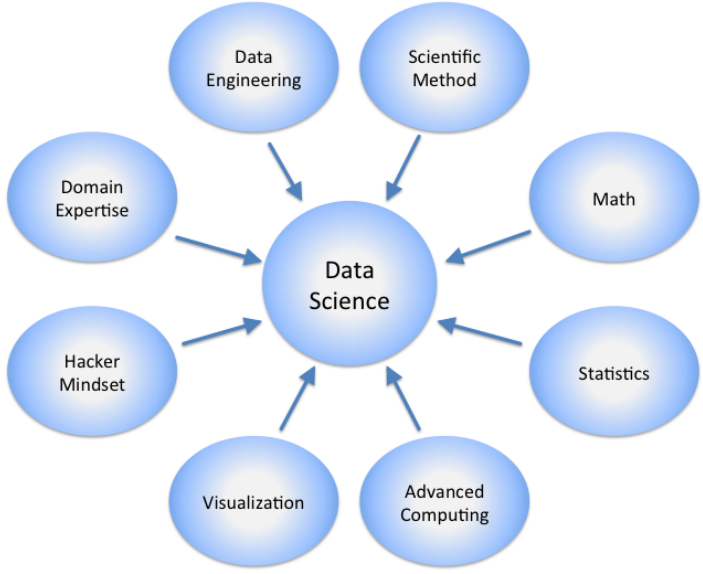
¿Qué es la ciencia de datos?

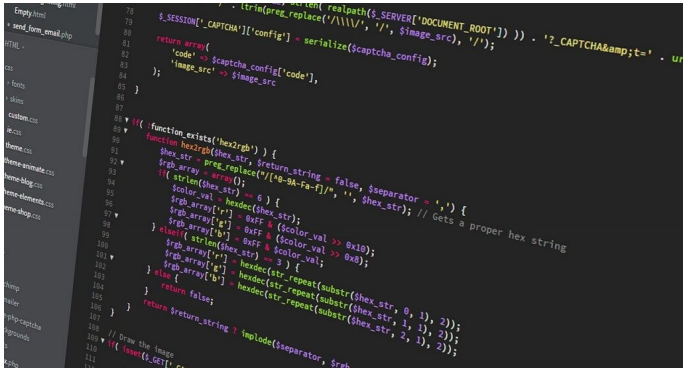




¿Qué es la ciencia de datos?







Contenido del curso

1. Métodos de clasificación.
2. Métodos de búsqueda de estructura
3. Agrupamiento de datos
4. Técnicas de aprendizaje maquina

1.Métodos de clasificación

1.1.Curso del 20 de agosto

1.1.1. ¿Que es la clasificación?

1.1.1. ¿Que es la clasificación?

Preguntas naturales:

- ¿Que son los objectos a clasificar?
- ¿En que espacio(s) viven?
- ¿Es clasificación supervisada?
- ¿Cómo medir una buena/mala tarea de clasificación?
- ¿Cómo optimizar la tarea de clasificación?
- ¿Cómo automatizar la tarea de clasificación?

1.1.2. Clasificación optima

Los datos:

Para una computadora, un dato es un vector de características. En consecuencia, un conjunto de datos es una colección de vectores en un espacio $\mathbb{R}^p$.

Denotaremos $X_1, \ldots, X_n$ los datos y el indice i vale por el i-ésimo dato. Las entradas de los datos se llaman atributos.

Cada dato tiene una etiqueta Y_i que toma valores en un conjunto $\{1, \ldots, K\}$ (con $K \in \mathbb{N}$) que representa las K categorías a clasificar.

1.1.2. Clasificación optima

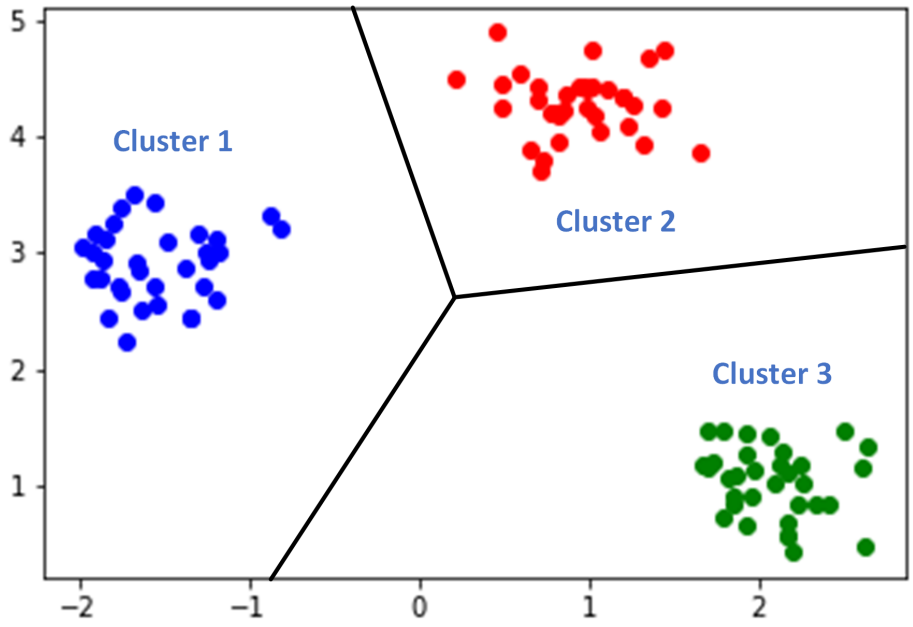
Regla de clasificación:

Una regla de clasificación es una función $g : \mathbb{R}^p \to \{1, \ldots, K\}$ que a todo $x \in \mathbb{R}^p$ asocia una de las K etiquetas.

Toda regla de clasificación g induce una partición (propia a g) del espacio $\mathbb{R}^p$ en

$$\mathbb{R}^p = R_1 \cup \cdots \cup R_K$$

que representan K regiones disjuntas y $R_i = \{x \in \mathbb{R}^p : g(x) = i\}$.



1.1.2. Clasificación optima

Un poco más de modelación:

Cada sub-conjunto de datos $C_i = \{X_j : Y_j = i\}$ se llama población i o cluster i. Denotaremos $\{X \to R_i\}$ el evento que el punto X sea categorizado en R_i.

Supongamos que los datos de la población C_i tienen una cierta distribución subyacente de densidad dada por una función f_i y que tiene una probabilidad de inclusión $\pi_i = \mathbb{P}(X \to C_i)$.

Sea E el evento de hacer un error de clasificación.

$$\begin{aligned}\mathbb{P}(E) &= \mathbb{P}(E \cap \{X \to C_1\}) + \cdots + \mathbb{P}(E \cap \{X \to C_K\}) \\ &= \sum_{i=1}^{K} \mathbb{P}(X \to C_i)\,\mathbb{P}(E|\{X \to C_i\}) = \sum_{i=1}^{K} \pi_i \mathbb{P}(E|\{X \to C_i\}) \\ &= \sum_{i=1}^{K} \pi_i (1 - \mathbb{P}(X \in R_i|\{X \to C_i\})) = 1 - \sum_{i=1}^{K} \pi_i \int_{R_i} f_i(x)dx\end{aligned}$$

1.1.2. Clasificación optima

Por otro lado vamos a calcular

$$q_i(x) = \mathbb{P}(X \to C_i | X = x).$$

Por la regla de Bayes,

$$q_i(x) = \frac{\mathbb{P}(\{X \to C_i\} \cap \{X = x\})}{\mathbb{P}(X = x)} = \frac{\pi_i \mathbb{P}(X = x | X \to C_i)}{\mathbb{P}(X = x)}$$
$$= \frac{\pi_i \mathbb{P}(X = x | X \to C_i)}{\sum_{j=1}^{K} \pi_j \mathbb{P}(X = x | X \to C_j)} = \frac{\pi_i f_i(x)}{\sum_{j=1}^{K} \pi_j f_j(x)}$$

Y tenemos también que $\mathbb{P}(X = x) = \sum_{j=1}^{K} \pi_j f_j(x)$ de tal manera que

$$\mathbb{P}(NoErr(g)) = \sum_{i=1}^{K} \int_{R_i} q_i(x) \mathbb{P}(X = x)\, dx$$
$$= \int_{\mathbb{R}^p} \mathbb{P}(X = x) \left(\sum_{i=1}^{K} \mathbb{1}_{x \in R_i} q_i(x) \right) dx$$

1.Métodos de clasificación

1.2.Curso del 22 de agosto

1.2.1. Clasificación optima

Vimos que la probabilidad de no hacer errores en una regla de clasificación g está dada por

$$\mathbb{P}(NoErr(g)) = \int \mathbb{P}(X = x)\, h_g(x) dx$$

donde $h_g(x) = \sum_{i=1}^{K} \mathbb{1}_{x \in R_i} q_i(x)$.

Consideramos la regla de clasificación g^* dada por las regiones

$$R_i^* = \{x \in \mathbb{R}^p : \forall j, q_i(x) \geq q_j(x)\},$$

y consideramos g una otra regla de clasificación arbitraria. Ahora, para un x dado tenemos $x \in R_j$ para un cierto j y $x \in R_m^*$ para un cierto m. Por definición de g^*, tenemos $q_m(x) \geq q_j(x)$

$$h_g(x) = \sum_{i=1}^{K} \mathbb{1}_{x \in R_i} q_i(x) = q_j(x) \leq q_m(x) = \sum_{i=1}^{K} \mathbb{1}_{x \in R_i^*} q_i(x) = h_{g^*}(x).$$

1.2.1. Clasificación optima

Entonces,

$$\begin{aligned}\mathbb{P}\left(NoErr(g)\right) &= \int \mathbb{P}\left(X = x\right) h_g(x) dx \\ &\leq \int \mathbb{P}\left(X = x\right) h_{g^*}(x) dx = \mathbb{P}\left(NoErr(g^*)\right).\end{aligned}$$

La regla g^* es optima para el criterio "probabilidad de errores".

Encontrar las R_i^* es comparar los valores $\pi_1 f_1(x), \ldots, \pi_K f_K(x)$. Si conocemos las π_i y f_i podemos diseñar el algoritmo:

1: **Input:** x
2: Calcular $\pi_1 f_1(x), \ldots, \pi_K f_K(x)$.
3: Calcular $k = \text{argmax}_i \, \pi_i f_i(x)$.
4: $k \to Y$
5: **Output:**Y

1.2.2. Clasificación optima de poblaciones normales

Si tenemos K poblaciones normales de proporciones π_i iguales,

$$f_i(x) = \frac{1}{(2\pi)^{p/2}|\Sigma_i|^{1/2}} \exp\left(-\frac{1}{2}(x-\mu_i)^T\Sigma_i^{-1}(x-\mu_i)\right).$$

Las fronteras de las regiones R_i^* son de la forma $f_i(x) = f_j(x)$ sujeto a $\forall k \neq i, j \; f_k(x) \leq f_i(x)$.

Ejercicio: Que es la frontera entre las dos regiones del caso $\mu_1 = (0,0)$, $\mu_2 = (0,1)$ y

$$\Sigma_1 = \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \qquad \Sigma_2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}?$$

1.2.3. Error de Bayes

En general, digamos que una regla de clasificación g^* es óptima si

$$g^* = \underset{g:\mathbb{R}^p \to \{1,\ldots,K\}}{\operatorname{argmin}} \mathbb{P}(g(X) \neq Y)$$

La cantidad $L(g) = \mathbb{P}(g(X) \neq Y)$ es la misma que en los cálculos anteriores.

El número real $L(g^*)$ se llama **error de Bayes**.

El error de Bayes es una noción teórica y no se puede calcular en la practica salvo en casos bien particulares!
$\longrightarrow$ La distribución de (X, Y) es en general desconocida.

Un clasificador real se construye en base a los datos $(X_1, Y_1), \ldots, (X_n, Y_n)$. Denotaremos g_n un clasificador así. Su error teórica es $L(g_n)$ su error estimada es $L_n(g_n) = \mathbb{P}(g(X) \neq Y | \text{“datos”})$.

1.2.4. Clasificador de Bayes para dos clases

Estamos en el contexto de dos clases $Y \in \{0, 1\}$. Denotaremos $\eta(x) = \mathbb{P}(Y = 1 | X = x)$.

Ejercicio: Mostrar que

$$g^*(x) = \begin{cases} 1 & \text{si } \eta(x) > \frac{1}{2} \\ 0 & \text{si no.} \end{cases}$$

Ejercicio: Supongamos que $\eta(x) = x/(x + c)$ con $c > 0$. Mostrar que

$$L(g^*) = \mathbb{E}\left[\min(\eta(X), 1 - \eta(X))\right] = \mathbb{E}\left[\frac{\min(c, X)}{X + c}\right].$$

Calcular $L(g^*)$ si X es constante igual a c y luego si $X \sim \text{Unif}[0, 4c]$.

1.Métodos de clasificación

1.3.Curso del 27 de agosto

1.3.1. Algoritmo Bayes "Naive"

Hemos visto que el clasificador (regla de clasificación) óptimo es

$$g^*(x) = \underset{k}{\operatorname{argmax}}\, \mathbb{P}(Y = k|X = x) = \underset{k}{\operatorname{argmax}}\, \pi_k f_k(x)$$

y $x = (x_1, \ldots, x_p)$ es el vector de atributos. Podemos usar el chain rule para escribir

$$\begin{aligned} f_k(x) =& \mathbb{P}(X_1 = x_1|Y = k)\, \mathbb{P}(X_2 = x_2|X_1 = x_1, Y = k) \ldots \\ & \mathbb{P}(X_p = x_p|X_1 = x_1, \ldots, X_{p-1} = x_{p-1}, Y = k). \end{aligned}$$

El clasificador "naive" Bayes supone que las variables de atributos son independientes de tal manera que

$$f_k(x) = \prod_{j=1}^{p} \mathbb{P}(X_j = x_j|Y = k) =: f_{k,1}(x_1) \ldots f_{k,p}(x_p)$$

1.3.1. Algoritmo Bayes "Naive"

Ventajas:

- Las probabilidades $f_{k,1}(x_1)$ se pueden estimar de forma individual (estimación de marginales).
- Se puede considerar fácilmente mezclas de variables discretas y continuas.
- En un buen "primer" clasificador que funciona en alta dimensión (e.g. clasificación de textos.)

Contra:

- Es "naive"! El supuesto puede ser invalido!

1.3.1. Algoritmo Bayes "Naive"

Resumen clasificador Naive Bayes (NB):

- En principio, la tarea de clasificación óptima requiere el conocimiento de las π_i (proporciones en cada población) y de las f_i (densidades asociadas a cada población.)
- La información de estas cantidades alrededor de la frontera tiene más importancia.
- Con información previa sobre las f_i o π_i podemos simplificar las tareas de clasificación (gaussianas, multinomiales, etc...)
- Si suponemos atributos independientes, el clasificador se llama "Naive Bayes".

1.3.2. Discriminante lineal (dos poblaciones)

Hemos visto en las clases anteriores que la separación entre dos poblaciones gaussianas con la misma matriz de covarianza Σ resulta en una separación por un hiperplano. Para dos grupos y una separación vertical:

$$g(x) = \begin{cases} y' & \text{si } x \leq x' \\ 1 - y' & \text{si no} \end{cases}$$

Los parámetros del clasificador son los x' y y'. Empezamos a estudiar este caso sencillo antes de generalizar.

Vamos a denotar

$$F_1(x) = \mathbb{P}(X \leq x | Y = 1)$$
$$F_0(x) = \mathbb{P}(X \leq x | Y = 0)$$
$$p = \mathbb{P}(Y = 1)$$

las funciones de distribución condicionales a las clases 1 o 0.

1.3.2. Discriminante lineal (dos poblaciones)

El riesgo del clasificador óptimo (a dentro de esa clase de discriminantes lineales) es

$$L = \inf_{x',y'} \big[\mathbb{1}_{y'=0}(pF_1(x') + (1-p)(1-F_0(x'))) \\ + \mathbb{1}_{y'=1}(p(1-F_1(x')) + (1-p)F_0(x'))\big]$$

Un corte óptimo (x^*, y^*) se llama corte teórico de Stoller.

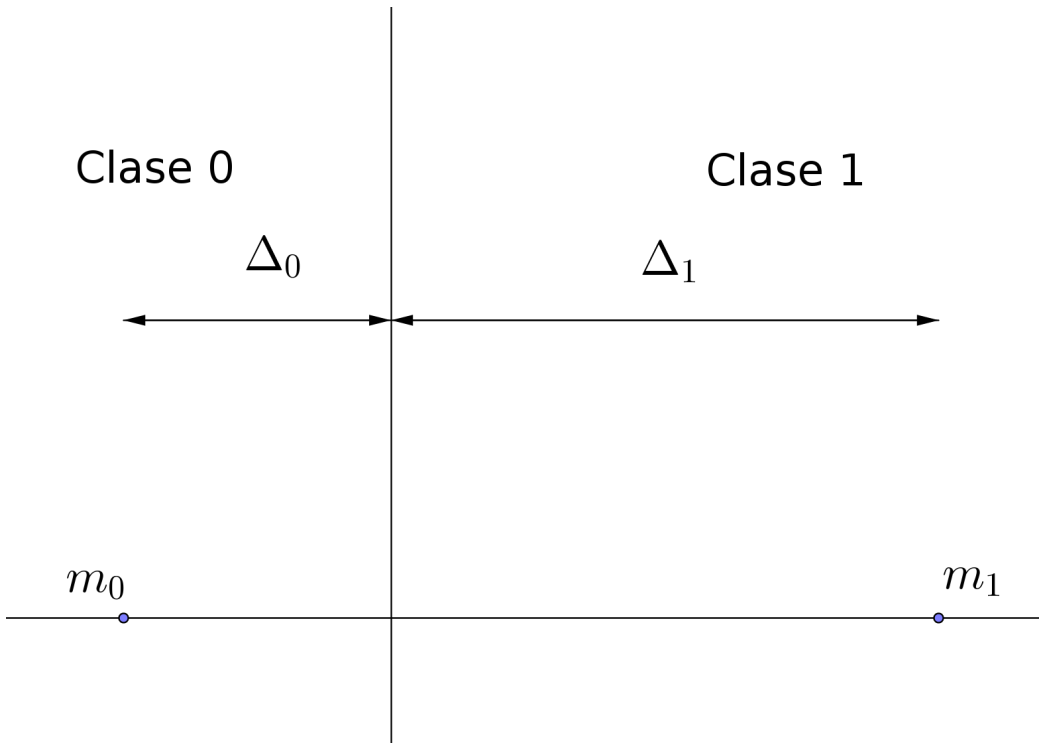
Ejercicio: Mostrar que $L^* \leq L \leq \min(p, 1-p)$. Usarlo para mostrar que $L \leq 1/2$ con igualdad si y solo si $L^* = 1/2$.

1.3.3. Cortes de Stoller

Si denotamos $m_0 = \mathbb{E}[X|Y=0]$, $m_1 = \mathbb{E}[X|Y=1]$, $\sigma_0^2 = \mathrm{Var}(X|Y=0)$ y $\sigma_1^2 = \mathrm{Var}(X|Y=1)$:

Teorema

$$L^* \leq L \leq \frac{1}{1 + \frac{(m_0 - m_1)^2}{(\sigma_0 + \sigma_1)^2}}$$



1.3.3. Cortes de Stoller

La probabilidad de error está dada por

$$
\begin{aligned}
&pF_1(m_0+\Delta_0)+(1-p)(1-F_0(m_0+\Delta_0)) \\
&\quad = p\mathbb{P}\left(X \leq m_1-\Delta_1 | Y=1\right)+(1-p)\mathbb{P}\left(X > m_0+\Delta_0 | Y=0\right) \\
&\quad \leq p\frac{\sigma_1^2}{\sigma_1^2+\Delta_1^2}+(1-p)\frac{\sigma_0^2}{\sigma_0^2+\Delta_0^2}
\end{aligned}
$$

Tomando $\Delta_1 = \frac{\sigma_1}{\sigma_0}\Delta_0$ y $\Delta_0 = |m_1-m_0|\sigma_0/(\sigma_0+\sigma_1)$ obtenemos

$$
L \leq \frac{1}{1+\frac{(m_0-m_1)^2}{(\sigma_0+\sigma_1)^2}}.
$$

Usamos que $\mathbb{P}\left(X-\mathbb{E}\left[X\right] \geq t\right) \leq \frac{\mathrm{Var}(X)}{\mathrm{Var}(X)+t^2}$.

1.Métodos de clasificación

1.4.Curso del 29 de agosto

1.4.1. Cortes de Stoller empíricos

Una manera de construir cortes en la practica es usar

$$(x', y') = \operatorname*{argmin}_{x,y} \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} (\mathbb{1}_{X_i \leq x, Y_i \neq y} + \mathbb{1}_{X_i > x, Y_i \neq 1-y}).$$

Estos cortes se llaman cortes de Stoller empíricos. Denotamos L_n su riesgo. Se puede escribir de la forma

$$(x', y') = \operatorname*{argmin}_{x,y} \nu_n(C(x, y))$$

donde ν_n es la medida empírica (i.e.
$\nu_n(A) = (1/n) \sum_{i=1}^{n} \mathbb{1}_{(X_i, Y_i) \in A})$ y
$C(x, y) = [(-\infty, x] \times \{y\}] \cup [[x, +\infty) \times \{1 - y\}]$.

Se ve directamente que $\mathbb{E}[\nu_n(C(x, y))] = \nu(C(x, y)) = L(g)$
donde g es el clasificador lineal correspondiendo a la pareja (x, y).

1.4.1. Cortes de Stoller empíricos

Entonces,

$$\begin{aligned} L_n &= \nu(C(x', y')) \\ &= \nu(C(x', y')) - \nu_n(C(x', y')) + \nu_n(C(x', y')) \\ &\leq \sup_{(x,y)} (\nu(C(x, y)) - \nu_n(C(x, y))) + \nu_n(C(x^*, y^*)) \\ &\leq 2 \sup_{(x,y)} (\nu(C(x, y)) - \nu_n(C(x, y))) + \nu(C(x^*, y^*)) \\ &= 2 \sup_{(x,y)} (\nu(C(x, y)) - \nu_n(C(x, y))) + L \end{aligned}$$

Eso permite tener el

Teorema

Sea $\epsilon > 0$,

$$\mathbb{P}(L_n - L \geq \epsilon) \leq 4e^{-n\epsilon^2/2}$$

y

$$\mathbb{E}[L_n - L] \leq \sqrt{\frac{2\log(4e)}{n}}.$$

1.Métodos de clasificación

1.5.Curso del 03 de septiembre

1.5.1. En dimensión más alta

En el caso $d > 1$, la discriminación lineal se escribe con

$$g(x) = \begin{cases} 1 & \text{si } \sum_{i=1}^{d} a_i x_i + a_0 > 0 \\ 0 & \text{si no} \end{cases}$$

Con las ideas de resultados tipo Cramér y Wold, podemos tener el

Teorema

$$L^* \leq L \leq \inf_{a \in \mathbb{R}^p} \frac{1}{1 + \frac{a^T (m_0 - m_1)^2}{((a^T \Sigma_0 a)^{1/2} + (a^T \Sigma_1 a)^{1/2})^2}}$$

La tarea principal es encontrar el buen parámetro $a = (a_1, \ldots, a_d)$ que se acercara de inf!

1.5.2. Criterio de Fisher

Es un modo de elección el vector de discriminación a. Desde la muestra, se puede calcular las medias empíricas de las clases $\hat{m}_0$ y $\hat{m}_1$.

Imagina proyectar los datos X_i sobre una linea en la dirección a. Acedemos entonces a $a^T X_1, \ldots, a^T X_n$. Podemos calcular las varianzas empíricas en esta dirección:

$$\hat{\sigma}_0 = \sum_{i:Y_i=0} (a^T X_i - a^T \hat{m}_0)^2 = a^T S_0 a$$

donde

$$S_0 = \sum_{i:Y_i=0} (X_i - \hat{m}_0)(X_i - \hat{m}_0)^T.$$

De manera similar obtenemos $\hat{\sigma}_1$ y S_1.

1.5.2. Criterio de Fisher

Se define el discriminante lineal de Fisher como

$$J(a) = \frac{(a^T(\hat{m}_0 - \hat{m}_1))^2}{\hat{\sigma}_0^2 + \hat{\sigma}_1^2} = \frac{(a^T(\hat{m}_0 - \hat{m}_1))^2}{a^T(S_0 + S_1)a}$$

y se selecciona la dirección a que maximiza este criterio de Fisher. De hecho los cálculos se pueden hacer de manera explicita y se obtiene

$$a = (S_0 + S_1)^{-1}(\hat{m}_0 - \hat{m}_1).$$

Luego para la elección de a_0, se puede hacer una discriminación lineal unidimensional con los datos $a^T X_1, \ldots, a^T X_n$.

Ejercicio: Mostrar que a es efectivamente el maximizador de $J(a)$. Mostrar de la misma manera que el maximizador de

$$J_2(a) = \frac{(a^T(\hat{m}_0 - \hat{m}_1))^2}{p\hat{\sigma}_0^2 + (1-p)\hat{\sigma}_1^2}$$

está dado por $a = (pS_0 + (1-p)S_1)^{-1}(\hat{m}_0 - \hat{m}_1)$.

1.5.3. ERM (Minimización del riesgo empírico)

Retomamos la regla de clasificación lineal

$$g(x) = \begin{cases} 1 & \text{si } a^T x + a_0 > 0 \\ 0 & \text{si no} \end{cases}$$

tal que la probabilidad de error se escribe $\mathbb{P}(g(X) \neq Y)$. El riesgo empírico está dado por la cantidad

$$L_n(g) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \mathbb{1}_{g(X_i) \neq Y_i}.$$

Para este clasificador suponemos que X tenga una densidad. Tomamos arbitrariamente d datos $X_{i_1}, \ldots, X_{i_d}$ en el conjunto de datos total. Por el supuesto de densidad, los datos definen un único hiperplano con probabilidad 1.

1.5.3. ERM (Minimización del riesgo empírico)

Corresponden dos clasificadores

$$g_1(x) = \begin{cases} 1 & \text{si } a^T x + a_0 > 0 \\ 0 & \text{si no} \end{cases}$$

y

$$g_2(x) = \begin{cases} 1 & \text{si } a^T x + a_0 < 0 \\ 0 & \text{si no} \end{cases}$$

Entonces, para cada uno de estos clasificadores se puede calcular $L_n(g_1)$ y $L_n(g_2)$.

A cada elección de d puntos, se puede asociar una par de clasificadores potenciales. Al total son $2\binom{n}{d}$. Al final se selecciona el clasificador

$$\hat{g} = \operatorname*{argmin}_g L_n(g)$$

donde la minimización se hace sobre esta clase de clasificadores lineales particulares.

1.5.3. ERM (Minimización del riesgo empírico)

Este clasificador tiene una buena garantía teórica porque satisface el

Teorema

Supongamos que $n \geq d$ (donde d es la dimensión del vector X de atributos), entonces, para cada distribución de (X, Y) y cada $2d/n \leq \epsilon \leq 1$, tenemos,

$$\mathbb{P}\left(L(\hat{g}) > L + \epsilon\right) \leq e^{2d\epsilon}\left(2\binom{n}{d} + 1\right)e^{-n\epsilon^2/2}$$

y en consecuencia,

$$\mathbb{E}\left[L(\hat{g}) - L\right] \leq \sqrt{\frac{2}{n}((d+1)\log n + (2d+2))}.$$

1.5.4. Criterio mínimos cuadrados

Este criterio está basado sobre la regresión lineal de la variable Y sobre X. Una medición natural del error de regresión está dado por los mínimos cuadrados

$$MC_n(g) = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(Y_i - a^T X_i - a_0)^2.$$

Cuando n es grande esta cantidad se acerca de

$$MC(g) = \mathbb{E}\left[(Y - a^T X - a_0)^2\right]$$

que es, en general, alejado de $L(g)$.

Pro:

- Como en regresión lineal, a y a_0 son explícitos.

Contra:

- Se pueden encontrar distribuciones tal que $L(\hat{g}) - L \sim 1$.

1.5.4. Criterio mínimos cuadrados

Justificación: Consideramos el caso de una distribución triatomica:

$$\mathbb{P}((X,Y)=(-\theta,1))=\mathbb{P}((X,Y)=(1,1))=\epsilon/2$$

y

$$\mathbb{P}((X,Y)=(0,0))=1-\epsilon$$

para $1>\epsilon>0$ y $\theta>0$. La mejor estrategia de corte lineal es asignar la clase 0 al interval $[-\theta/2,\infty)$. Eso permite calcular que $L=\epsilon/2$. Pero resolviendo el cálculo del minimizador de los mínimos cuadrados, obtenemos que

$$\begin{cases} 2a_0=2\epsilon-a_1\epsilon(1+\theta) \\ (1-\theta)-a_1(1+\theta^2)=a_0(1-\theta) \end{cases}$$

Eso da (en el regimen $\epsilon\sim 0$ y $\theta\sim\infty$), $a_1\sim -1/\theta$ y $a_0\sim 3\epsilon/2$. Entonces, $L(g)\geq \mathbb{P}\left(Y=0 \text{ y } -\theta^{-1}X+3\epsilon/2>0\right)=1-\epsilon$.

1.5.5. El criterio Perceptron

Existen otros criterios que podemos optimizar en la busqueda del buen corte. El siguiente criterio se llama **criterio perceptron**:

$$J(a, a_0) = \sum_{2Y_i - 1 \neq \text{sg}(a^T X_i + a_0)} |a^T X_i + a_0|.$$

Se puede mostrar que este criterio sufre de los mismos defectos que el criterio de los mínimos cuadrados (con ideas similares de distribuciones caóticas).

1.5.6. Criterio de regresión Sigmoid

Se puede también usar un criterio menos lineal y minimizar la cantidad

$$SC_n(g) = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(Y_i - \sigma(a^T X_i - a_0))^2$$

donde $\sigma(u)$ es una función sigmoide. Formalmente, es una función creciente de 0 hasta 1. Por ejemplo: $\sigma(u) = 1/(1 + \exp(-u))$.

De manera análoga a los casos anteriores, se puede mostrar que existen distribuciones tal que $L(\hat{g}) - L \sim 1$ pero si tomamos $\sigma_h(u) = \sigma(hu)$ y que dejamos $h \to \infty$ cuando $n \to \infty$ entonces podemos mostrar que para cualquier distribución,

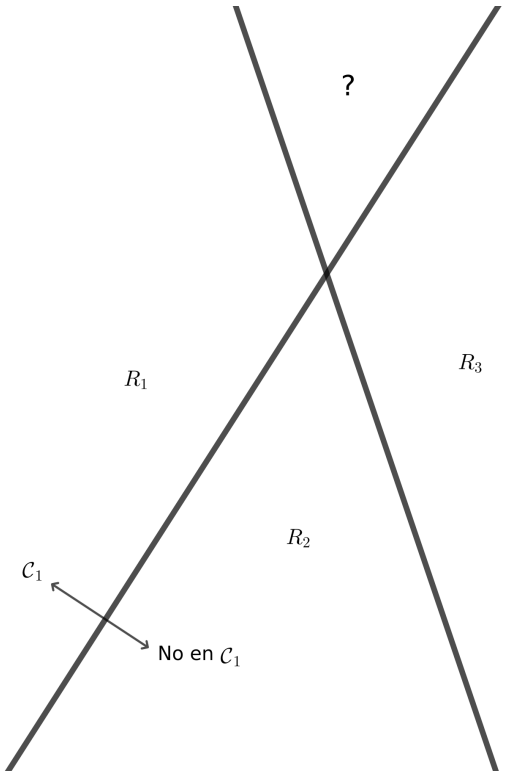
$$\mathbb{E}\left[L_n(\hat{g})\right] \longrightarrow L.$$

1.Métodos de clasificación

1.6.Curso del 5 de septiembre

1.6.1. Clasificación de K poblaciones: un problema

- En las clases anteriores vimos algunas maneras naturales para discriminar entre 2 clases.
- No es tan obvio de generalizar estas nociones de clasificación lineal a más clases.



1.6.1. Clasificación de K poblaciones: un problema

Dos ideas (no buenas...) para reducir el problema:

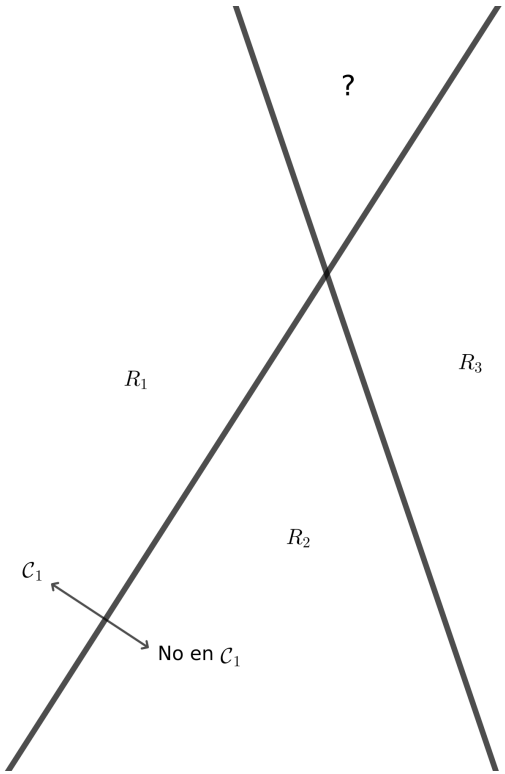
- Se consideran K clasificadores tipo **"1 vs los demas"**.
- Se consideran $K(K-1)/2$ clasificadores **"1 vs 1"**

Como agregar los clasificadores para tener una partición del espacio en zonas $R_1, \ldots, R_K$ de tal manera que las separaciones sean lineales?

1.6.1. Clasificación de K poblaciones: un problema

En el caso K clasificadores tipo **"1 vs los demas"**:

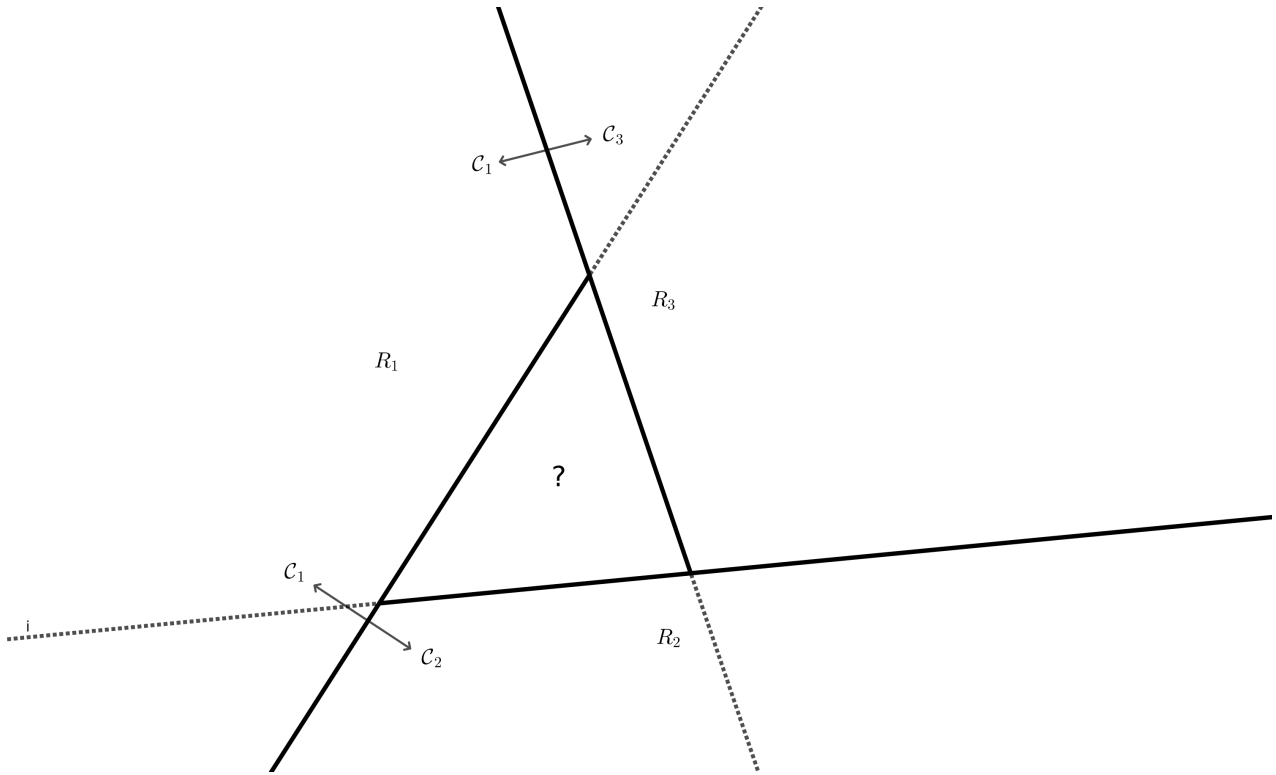
Ya tenemos un problema tratando de agregar dos clasificadores!



1.6.1. Clasificación de K poblaciones: un problema

En el caso K clasificadores tipo **"1 vs 1"**:

Un otro tipo de problema surge en este caso!



1.6.2. Clasificación de K poblaciones: Parentesis

Hemos visto que la elección de la dirección óptima es $a = (S_0 + S_1)^{-1}(m_0 - m_1)$. Como generalizar esta técnica?

En general, si tenemos dos matrices cuadradas A y B de misma dimensión y simétricas definidas positivas,

$$\max_{a \in R^d} \frac{a^T A a}{a^T B a} = \lambda_1$$

donde λ_1 es el valor propio máximo de la matriz $B^{-1}A$. Ademas la maximización se hace en el vector propio que correspondiendo a este valor propio λ_1.

Idea: Si queremos seleccionar más que una dirección para la proyección de nuestros datos $X_1, \ldots, X_n$ podemos usar el espacio dado por las r primeros valores propios $\lambda_1, \ldots \lambda_r$.

1.6.3. Clasificación de K poblaciones: Reducción de Fisher (LDA)

Que van a ser A y B?

Para simplificar vamos a denotar $x_{i,j}$ los datos tal que i designa la población y j designa el indice en $\{1, \ldots, n_i\}$ del dato adentro de la población i.

Medida de dispersión a dentro de las clases:

$$S_D = \sum_{k=1}^{K} S_i$$

$$S_i = \sum_{j=1}^{n_i} (x_{i,j} - \bar{x}_i)(x_{i,j} - \bar{x}_i)^T$$

$$\bar{x}_i = \frac{1}{n_i} \sum_{j=1}^{n_i} x_{i,j}$$

1.6.3. Clasificación de K poblaciones: Reducción de Fisher (LDA)

La medida de dispersión total es

$$S_T = \sum_{i=1}^{K} \sum_{j=1}^{n_i} (x_{i,j} - \bar{x})(x_{i,j} - \bar{x})^T$$

donde $\bar{x}$ es la media sobre todos los datos. Entonces,

$$\begin{aligned} S_T &= \sum_{i=1}^{K} \sum_{j=1}^{n_i} (x_{i,j} - \bar{x}_i + \bar{x}_i - \bar{x})(x_{i,j} - \bar{x}_i + \bar{x}_i - \bar{x})^T \\ &= \sum_{i=1}^{K} S_i + \sum_{i=1}^{K} n_i (\bar{x}_i - \bar{x})(\bar{x}_i - \bar{x})^T \\ &=: S_D + S_E \end{aligned}$$

y S_E es una "medida" de la dispersión entre clases.

1.6.3. Clasificación de K poblaciones: Reducción de Fisher (LDA)

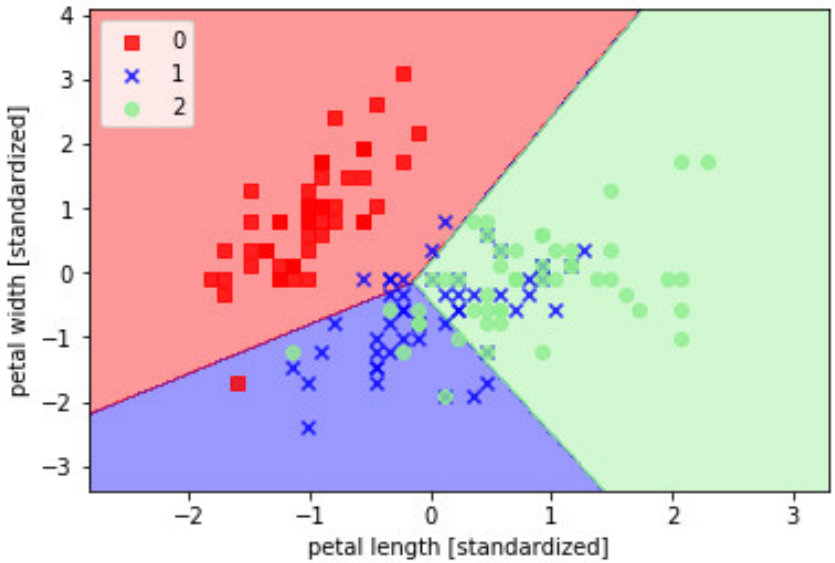
La buena noción es de tomar $A = S_E$ y $B = S_D$.

$\rightarrow$ Se reduce a un problema de algebra lineal de busqueda de valores propios y vectores propios.

En general se toman los r valores propios más grandes y se elige r de tal manera que los valores propios ignorados son de magnitud despreciable.

1.6.4. Solución para la clasificación lineal

Queremos alcanzar hacer una clasificación del tipo:



Podemos definir un solo clasificador lineal (siguiendo las ideas del Naive Bayes).

Consideramos K funciones lineales $y_1, \ldots, y_K$,

$$y_k(x) = a_k^T x + a_{k,0}$$

y se asigna la clase k si y solo si

$$\forall j \neq k, \quad y_k(x) > y_j(x).$$

1.6.4. Solución para la clasificación lineal

Las fronteras son las partes del espacio que corresponden a un subconjunto de

$$\{x \in \mathbb{R}^d : y_k(x) = y_j(x)\} = \{x \in \mathbb{R}^d : (a_k - a_j)^T x + (a_{k,0} - a_{j,0}) = 0\}.$$

Son pedazos de hiperplanos.

Las regiones R_i son completamente conectadas y convexas.

Ejercicio: Mostrar que las R_i son convexas. (Usar la linealidad de las y_j)

1.Métodos de clasificación

1.7.Curso del 10 de septiembre

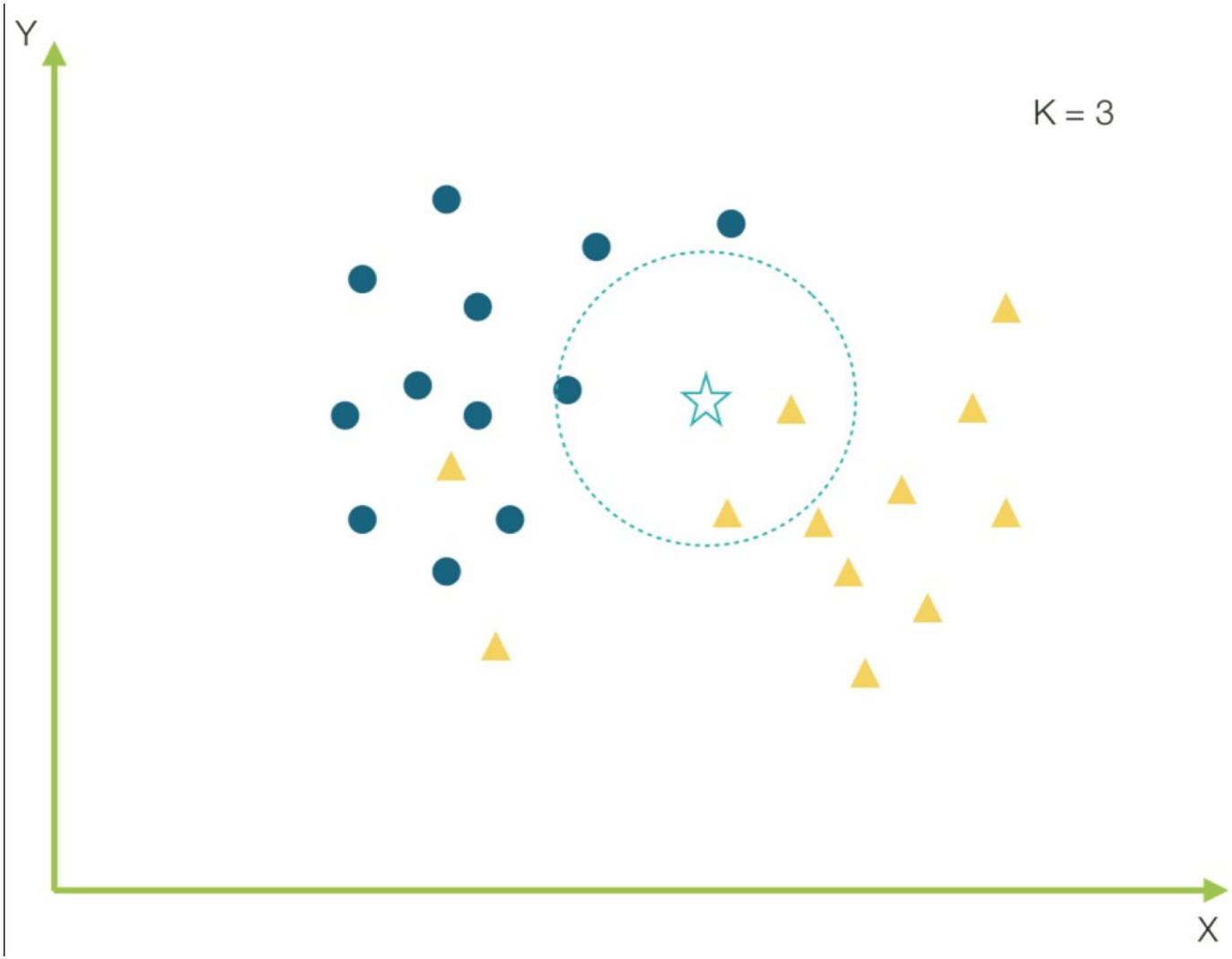
1.7.1. k-vecinos más cercanos: definición

El clasificador de k-vecinos más cercanos está basado sobre la filosofía: Los puntos cercanos se parecen.

Definición: Dado un punto del espacio x, encontramos los k puntos de entrenamiento $X_{(1)}, \ldots, X_{(k)}$ los más cercanos de x. Luego, la clasificación de $Y(x)$ está dada por el valor de Y lo más representado en los Y_i correspondientes.

- Los empates se deciden al azar entre los mayoritarios.
- Típicamente, se usa la distancia euclidiana.
- Si k es pequeño, el clasificador es muy local. Si k es grande, el clasificador es más robusto errores en los datos de entrenamiento.

1.7.1. k-vecinos más cercanos: definición



1.7.2. k-vecinos más cercanos: Problemáticas

Formalmente, podemos escribir el clasificador g_n en un formalismo kernel.

$$g_n(x) = \begin{cases} 1 & \text{si } \sum_{i=1}^{n} w_{n,i} \mathbb{1}_{Y_i=1} > \sum_{i=1}^{n} w_{n,i} \mathbb{1}_{Y_i=0} \\ 0 & \text{si no,} \end{cases}$$

donde $w_{n,i} = 1/k$ si X_i es uno de los vecinos más cercanos de x. Las problemáticas de k vecinos más cercanos:

- Consistencia universal: Que pasa si $k \to \infty$, $k/n \to 0$ y $n \to \infty$?
- Si k es finito, que podemos decir si $n \to \infty$?
- Que son los buenos pesos a poner en la definición?
- Que son los retos de programación de los k-NN?

1.7.2. k-vecinos más cercanos: Problemáticas

Denotamos $X_{(i)}(x)$ el i-ésimo vecino más cercano a x. Hay un resultado fácil a obtener:

Lema

Si $X \sim \mu$ y $k/n \to 0$ entonces para $x \in$ soporte(μ),
$\|X_{(k)}(x) - x\| \to 0$ en probabilidad.

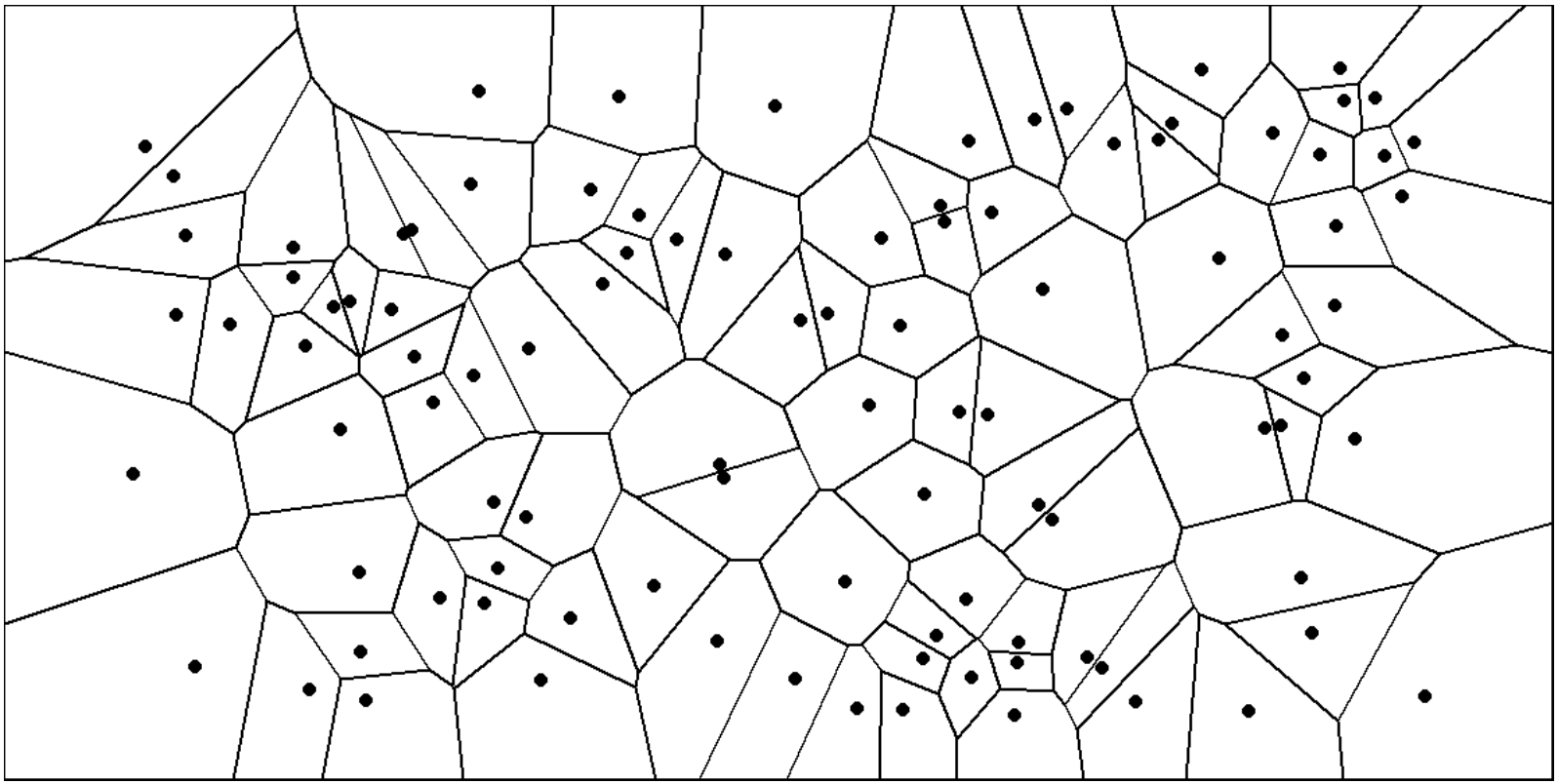
La idea es sencilla:
Si $S_{x,\epsilon}$ es la bola centrada en x y de radio ϵ,

$$\|X_{(k)}(x) - x\| > \epsilon \quad \Leftrightarrow \quad \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} \mathbb{1}_{X_i \in S_{x,\epsilon}} < \frac{k}{n}.$$

Por la ley de grandes números $\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} \mathbb{1}_{X_i \in S_{x,\epsilon}} \to \mu(S_{x,\epsilon})$ y la cantidad de la derecha tiende a 0.

1.7.3. 1-NN: el vecino más cercano

En este caso se decide de $Y(x)$ viendo únicamente el vecino más cercano de x en los datos. Las regiones son de la forma:



Esas formas son conocidas como las celdas de Voronoi.

1.7.3. 1-NN: el vecino más cercano

En sus papers teóricos, Stone, Devroye y Györfi muestran unos teoremas de convergencia y cotas superiores. Unas ideas (para dos clases) son:

- Para $x \in \mathbb{R}^d$, $Y_{(1)}(x), \ldots, Y_{(k)}(x)$ son las Y de los k-vecinos más cercanos.
- Se define $Y'_i(x) = \mathbb{1}_{U_i \leq \eta(x)}$ donde $\eta(x) = \mathbb{P}(Y = 1 | X = x)$ donde U_i es una variable uniforme independiente de las otras variables.
- Se denota g'_n el clasificador k-NN donde reemplazamos las $Y_{(i)}(x)$ por las $Y'_{(i)}(x)$.

Se muestra que $\mathbb{E}[L_n - L'_n] \to 0$ cuando $k/n \to 0$, donde $L_n = \mathbb{E}[g_n(X) \neq Y | D_n]$ y $L_n = \mathbb{E}[g'_n(X) \neq Y | D'_n]$.

1.7.3. 1-NN: el vecino más cercano

Entonces si denotamos $L_{NN} = \lim_{n\to\infty} \mathbb{E}[L_n]$ (para $k = 1$) es suficiente calcular $\mathbb{E}[L'_n]$.

- Es más fácil!
- Las variables $Y'_i(x)$ son i.i.d. Bernoulli de parámetro $\eta(x)$.
- Para $k = 1$,
  $\mathbb{E}[L'_n] = \mathbb{P}\left(Y'_{(1)}(X) \neq Y\right) = \mathbb{E}[2\eta(X)(1 - \eta(X))]$.
- Eso demuestra directamente que

$$L^* \leq L_{NN} \leq 2L^*$$

1.7.4. k general y impar

De manera general tenemos el

$$L_{kNN} = \mathbb{E}\Big[\sum_{j=0}^{k} \binom{k}{j} \eta(X)^j (1-\eta(X))^{k-j} \big(\eta(X)\mathbb{1}_{j<k/2} + (1-\eta(X))\mathbb{1}_{j>k/2}\big)\Big]$$

Ademas, tenemos que

$$L^* \leq \cdots \leq L_{(2k+1)NN} \leq L_{(2k-1)NN} \leq \cdots \leq L_{3NN} \leq L_{NN} \leq L^*$$

En particular, cuando la tarea de clasificación es fácil ($L \approx 0$), el algoritmo de k-NN da buenos resultados.

1.7.5. Complexidad del algoritmo

Hay opciones de algoritmos que estructuran (por agrupamientos) los datos para facilitar un uso repetido del clasificador.

- **Greedy**:
  - Training: Tiempo $O(1)$
  - Training: Memoria $O(1)$ (no hay entrenamiento)
  - Testing: Tiempo $O(d * k * n)$.
  - Testing: Memoria $O(1)$.
- **Método arboles k-d, Método Ball-Tree**
  - Training: Tiempo $O(d * n * \log n)$
  - Training: Memoria $O(d * n)$
  - Testing: Tiempo $O(k \log n)$.
  - Testing: Memoria $O(1)$.

1.Métodos de clasificación

1.8.Curso del 12 de septiembre

1.8.1. Arboles de decisión

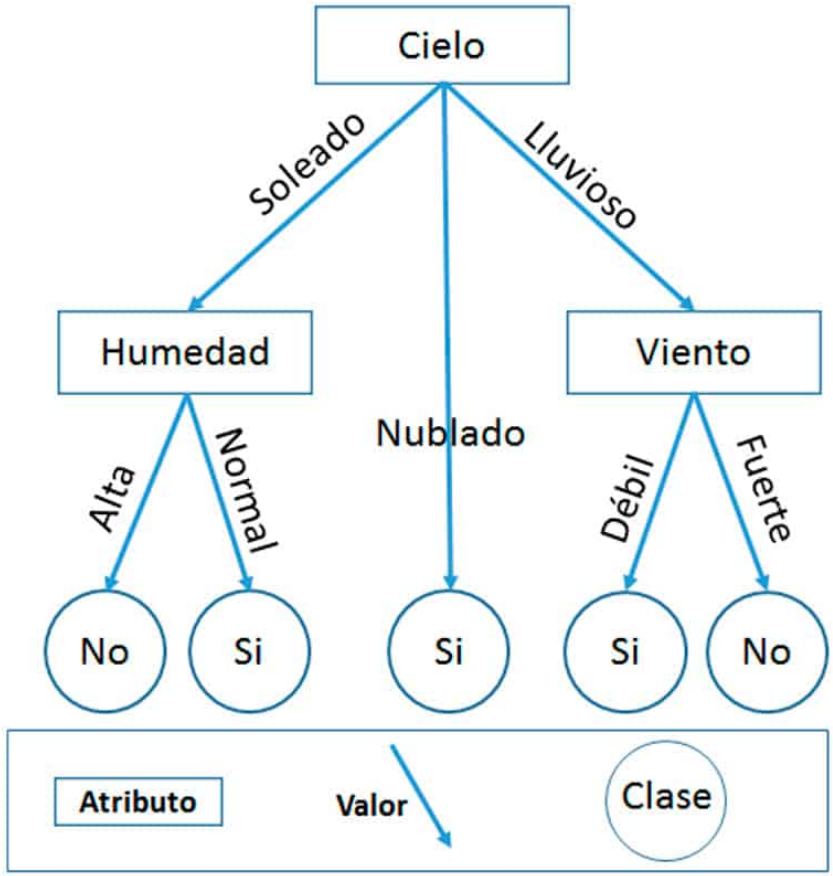
Los métodos de reducción para los k-vecinos más cercanos (k-d-trees o Ball-trees) son casos particulares de un método más general: **Arboles de decisión.**

- Un algoritmo tipo árbol de decisión construye un árbol donde las hojas del árbol corresponde a una categoría.
- Cada nodo del árbol corresponde a una decisión de clasificación.
- Clasificar un nuevo dato consiste a bajar en el árbol y contestar una serie de preguntas.

Es un algoritmo que sirve de clasificador pero también puede también cumplir con la tarea de regresión.

1.8.1. Arboles de decisión

Ejemplo de árbol de decisión construido.



1.8.2. Arboles de decisión: Definición formal

Un árbol de decisión se construye recursivamente:

1. Se elige al azar un nodo activo del árbol.
2. Se elige al azar un componente i dentro de las d posibles de los vectores de atributos (X_j) que pertenecen al nodo.
3. En base a los $X_{j,i}$ y Y_j del nodo, se separan los datos en dos grupos G_1 y G_2 en base a una regla de clasificación (sencilla).
4. Se crea dos nodo "hijos" que reciben respectivamente los datos de G_1 y de G_2.
   - Si un criterio de paro está verificado el nodo hijo se transforma en una hoja del árbol y
   - Si no, el nodo se considera activo.

- **Inicio:** El algoritmo inicia con la raíz que contiene todos los datos.
- **Fin:** El algoritmo termina cuando no hay más nodo activos.

1.8.2. Arboles de decisión: Definición formal

- En la etapa 3, en general se usa una clasificación muy sencilla: lineal unidimensional.
- En general se trata de tener dos grupos lo más separados posibles.

Gini Impurity:
Es un indice que mide que tanto se parecen los datos a dentro de un cierto grupo G. Denotamos $p_1, \ldots, p_K$ las proporciones de cada población a dentro de G..

- Para una población i, la impuridad está dada por $p_i(\sum_{j \neq i} p_j) = p_i(1 - p_i)$.
- La impuridad global está dada por $I_G = \sum_{i=1}^{K} p_i(1 - p_i) = 1 - \sum_{i=1}^{K} p_i^2$

1.8.2. Arboles de decisión: Definición formal

Entropia de información:
De la misma manera se consideran $p_1, \ldots, p_K$ y se calcula $H_G = -\sum_{i=1}^{K} p_i \log(p_i)$.

Varianza:
Se considera sencillamente la varianza dentro del grupo G con $V_G = \sum_{i \in G} (y_i - \bar{y}_G)^2$.

Para una decisión de clasificación y una medida de disparidad I, se maximiza el criterio siguiente:

$$C = I_{\text{nodo padre}} - I_{\text{nodo hijo}_1} - I_{\text{nodo hijo}_2}$$

1.8.3. Criterios de paro

Los criterios de paro son mayormente de dos categorías:

- Si un grupo tiene menos datos que un cierto número n_0.
- Si el criterio C máximo (de la etapa de corte) está abajo de un cierto nivel C_0.

A veces, se consideran criterios de paro híbridos.

Ventajas:

- Los arboles de decisión son fácilmente interpretables.
- Pueden funcionar para datos que mezclan atributos continuos y discretos.

Contra:

- Tiene la tendencia de sobre ajustar las regiones a los datos.
- Las fronteras de separaciones entre las clases son principalmente paralelas a los ejes.

1.8.4. Bosques aleatorios

Los bosques aleatorios son conjuntos de arboles $\mathcal{T}_1, \ldots, \mathcal{T}_m$ de decisión, nada más.

- Para clasificar, se hace una votación entre las respuestas de clasificación de cada árbol de decisión de la clase.
- Los diferentes arboles de decisión se construyen de la manera la más independiente posible.
- Por ejemplo, se puede seleccionar al azar un sub-conjunto de los datos y crear un árbol de decisión sobre estos datos.

2.Busqueda de estructura:Cambio de espacio

2.1.Clase del 17 de septiembre

2.1.1. Contexto

La busqueda de estructura en un conjunto de datos es generalmente un trabajo **anterior** a cualquier tipo de estimación, predicción, etc... sobre los datos.

Idea principal: Supongamos tener a disposición un conjunto de datos $X_1, \ldots, X_n$ en un espacio $\mathcal{X}$. En general tendremos que $\mathcal{X}$ sea un espacio lineal. Aquí podemos consideramos que cada X_i contiene toda la información del dato i (variables atributos o explicativas y variables de categorías o de respuesta).

Queremos hacer una modificación de los datos $T : \mathcal{X} \to \mathcal{X}'$ de tal manera que los variables $T(X_1), \ldots, T(X_n)$ contengan la mayoria de la información. La transformación T es *buena* si es más **facil** de hacer el estudio de datos sobre los $T(X_1), \ldots, T(X_n)$.

2.1.1. Contexto

Hay dos formas de considerar que el estudio es más fácil.

1. El espacio $\mathcal{X}'$ es un espacio más *chico* de $\mathcal{X}$.
   - En general, la dimensión del espacio $\mathcal{X}'$ es menor (idealemente mucho menor) que la dimensión del espacio $\mathcal{X}$.
   - La complejidad de los algoritmos es más baja en $\mathcal{X}'$. Por ejemplo, el espacio nuevo tiene una estrucura topologica adicional (convexidad, compacidad, datos sparse, etc...)
2. La tarea de estudio de datos es *más potente* en $\mathcal{X}'$.
   - Los datos son más separados en el nuevo espacio.
   - Las tecnicas a usar luego son más sencillas (algoritmos lineales, etc...)

2.1.2. Descomposición en valores singulares (SVD)

Nos ponemos en el contexto de un espacio vectorial $\mathcal{X} = \mathbb{R}^d$.
La primera idea es de considerar una proyección lineal $T : \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}^s$ con s más chico de que d. Una idea muy popular es la **descomposición en valores singulares (SVD)**.

Consideramos una matriz A. Esta matriz será de tamaño $n \times d$ (denotamos $A \in \mathcal{M}_{n,d}(\mathbb{R})$) pero supongamos que A no es de rango completo si no que es de rango r (denotado $\text{rg}(A) = r$) con $r < \min(n, d)$.

Teorema (Descomposición (SVD))

Existen matrices ortogonales $U \in \mathcal{O}_n(\mathbb{R})$ y $V \in \mathcal{O}_d(\mathbb{R})$ y una matriz $\Lambda \in \mathcal{M}_r(\mathbb{R})$ diagonal de valores diagonales $\lambda_1, \ldots, \lambda_r$ positivos tal que

$$A = UDV^T, \qquad D = \begin{pmatrix} \Lambda & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

y $D \in \mathcal{M}_{n,d}(\mathbb{R})$.

2.1.2. Descomposición en valores singulares (SVD)

La construcción se hace considerando la matriz cuadrada $A^T A$. Es una matriz de tamaño $d \times d$ simetrica y positiva. Entonces, existe una matriz ortogonale $V \in \mathcal{M}_d(\mathbb{R})$ tal que

$$A^T A = V \Gamma V^T \qquad \Gamma = \begin{pmatrix} \Lambda^2 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

donde $V = (V_1 \ V_2)$ con $V_1 \in \mathcal{M}_{d,r}(\mathbb{R})$. Completamos la definición poniendo $U_1 = AV_1\Lambda^{-1}$ y $U = (U_1 \ U_2)$ con una compleción de base por Gram-Schmidt.

Esta descomposición es importante para poder reducir la complejidad de muchos problemas a problemas de dimensión r.

Ejercicio: Mostrar que $A = UDV^T$ y que $A = U_1 \Lambda V_1^T$.

2.1.2. Descomposición en valores singulares (SVD)

Ejercicio: Mostrar que existen matrices G y H de rango r (de las cuales daremos las dimensiones) tal que

$$A = GH^T$$

Mostrar también que A es una suma de r matrices de rango 1 dada por

$$A = \sum_{i=1}^{r} \lambda_i u_i v_i^T .$$

Por fin, mostrar que las columnas de U son vectores propios de AA^T y que las columnas de V son vectores propios de $A^T A$.

2.Busqueda de estructura:Cambio de espacio

2.2.Curso 19 septiembre

2.2.1. Descomposición en valores singulares (SVD)

Solución Ejercicio: Se tiene que verificar los cálculos matriciales por bloques. Por definición, tenemos

$$A^T A = V \Gamma V^T \qquad \text{entonces,} \quad V^T A^T A V = \Gamma.$$

Por bloques eso da,

$$\begin{pmatrix} V_1^T \\ V_2^T \end{pmatrix} A^T A \begin{pmatrix} V_1 & V_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \Lambda^2 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix},$$

en particular, tenemos $V_1^T A^T A V_1 = \Lambda^2$ y también $V_2^T A^T A V_2 = 0$. Eso implica directamente $AV_2 = 0$. Ahora para terminar, podemos calcular la matriz $U^T AV$. De nuevo, por bloques tenemos

$$U^T AV = \begin{pmatrix} U_1^T \\ U_2^T \end{pmatrix} A \begin{pmatrix} V_1 & V_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} U_1^T A V_1 & U_1^T A V_2 \\ U_2^T A V_1 & U_2^T A V_2 \end{pmatrix}$$

2.2.1. Descomposición en valores singulares (SVD)

Entonces tenemos (como $AV_1 = U_1\Lambda$)

$$U^T AV = \begin{pmatrix} U_1^T AV_1 & U_1^T AV_2 \\ U_2^T AV_1 & U_2^T AV_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \Lambda & 0 \\ U_2^T U_1 \Lambda & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \Lambda & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Como tenemos $U^T AV = D$, obtenemos $A = UDV^T$. En la definición, tenemos directamente $A = U_1 \Lambda V_1^T$.

Para el **segundo ejercicio**, podemos tomar por ejemplo $G = U_1 \in \mathcal{M}_{n,r}(\mathbb{R})$ y $H = V_1\Lambda \in \mathcal{M}_{d,r}(\mathbb{R})$. Para terminar, podemos denotar $u_1, \ldots, u_r$ los vectores columna de U_1 y $v_1, \ldots, v_r$ los vectores columna de V_1. Abusamos la notación

$$u_i = (0 \mid u_i \mid 0)$$

de tal manera que $U_1 = \sum_i u_i$ y $V_1 = \sum_i v_i$. Finalmente tenemos $U_1 \Lambda V_1^T = (\sum_i u_i)\Lambda(\sum_i v_i)^T = \sum_i \lambda_i u_i v_i^T$.

2.2.2. SVD: aplicación

Una propiedad simpática es la siguiente:

Teorema (Eckart-Young)

Sea A una matriz de $\mathcal{M}_{n,d}(\mathbb{R})$ y sea $k < \min(n, d)$. Denotamos $A = \sum_{i=1}^{d} \lambda_i u_i v_i^T$ su descomposición en valores singulares donde los valores singulares están ordenados de manera decreciente $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \cdots \geq \lambda_d$. Entonces, la mejor aproximación de rango menor

$$A_k = \underset{rango(B)=k}{\operatorname{argmin}} \|A - B\|$$

está dada por

$$A_k = \sum_{i=1}^{k} \lambda_i u_i v_i^T$$

donde la norma $\|\cdot\|$ es la norma de Frobenius o la norma espectral.

2.2.2. SVD: aplicación

Recordatorio:

- Norma de Frobenius: $\|A\|_F = (\mathrm{tr}(A^T A))^{1/2}$.
- Norma espectral: $\|A\|_2^2 = \sup_{u:\|u\|=1}(A^T A u, u)$.

Se pueden calcular las distancias de error por ejemplo:

$$\|A - A_k\|_2 = \lambda_{k+1}$$

- Se puede aproximar matrices de $\mathcal{M}_{n,d}(\mathbb{R})$ que requiere $n \times d$ parámetros por k productos de vectores. Eso requiere $k \times (1 + n + d)$ valores.
- Si k es pequeño, $k \times (1 + n + d)$ es mucho menor que $n \times d$ $\Rightarrow$ Compresión de datos!

2.2.3. SVD:Compleción de matrices de rango bajo

Imaginamos el contexto siguiente:

2.2.3. SVD:Compleción de matrices de rango bajo

Tenemos una matriz A de rango pequeño de la cual no observamos todas las entradas.
Existe un conjunto Ω que corresponde a los pares de indices (i, j) donde la matriz A está observada y una proyección P_Ω asociada.

Entonces la matriz $P_\Omega(A)$ tiene las entradas $p_{i,j} = a_{i,j}$ cuando $(i, j) \in \Omega$ y $p_{i,j} = 0$ si no. La propuesta de la compleción de A es la siguiente:

$$\underset{M}{\text{minimize}}\ H(M) := \frac{1}{2}\|P_\Omega(A - M)\|_F^2 + \lambda\|M\|_*$$

donde $\|\cdot\|_*$ es la norma nuclear (la suma de los valores singulares).

2.2.3. SVD:Compleción de matrices de rango bajo

Se propone el algoritmo iterativo siguiente:

1. Reemplazar las entradas de A faltantes por las entradas de la estimación corriente $\hat{M}$.

$$\hat{A} = P_\Omega(A) + P_\Omega^\perp(\hat{M})$$

2. Update de la matriz $\hat{M}$ con el soft-threshold:

$$\hat{A} = UDV^T$$
$$\hat{M} = US_\lambda(D)V^T$$

donde S_λ opera sobre cada elemento de la diagonal con la función $x \mapsto (x - \lambda)_+$.

Por ejemplo, si λ es muy grande, muchos de los valores diagonales de D se fijan en 0.

2.Busqueda de estructura:Cambio de espacio

2.3.Curso del 24 de Septiembre

2.3.1. Factorización no-negativa:intuición

Vimos la factorización SVD importante $A = UDV^T$ para cualquier tamaño $n \times d$ de matriz.

- Permite una descomposición en matrices de rango 1.
- Permite una aproximación por matrices de rango menor.
- Se puede escribir $A = GH^T$ donde las matrices G y H tienen el rango de A.

De vez en cuando se necesita una otra aproximación parecida pero diferente: **Aproximación por matrices no-negativas**.

2.3.1. Factorización no-negativa:intuición

Contexto: Imaginamos que A es una matriz de entradas no-negativas: $a_{i,j} \geq 0$. Supongamos que A se escriba $A = UV^T$ donde las entradas de $U \in \mathcal{M}_{n,k}(\mathbb{R}_+)$ y $V \in \mathcal{M}_{d,k}(\mathbb{R}_+)$ sean no-negativas.

Los vectores reglones $(a_i^T)_i$ de A se escriben

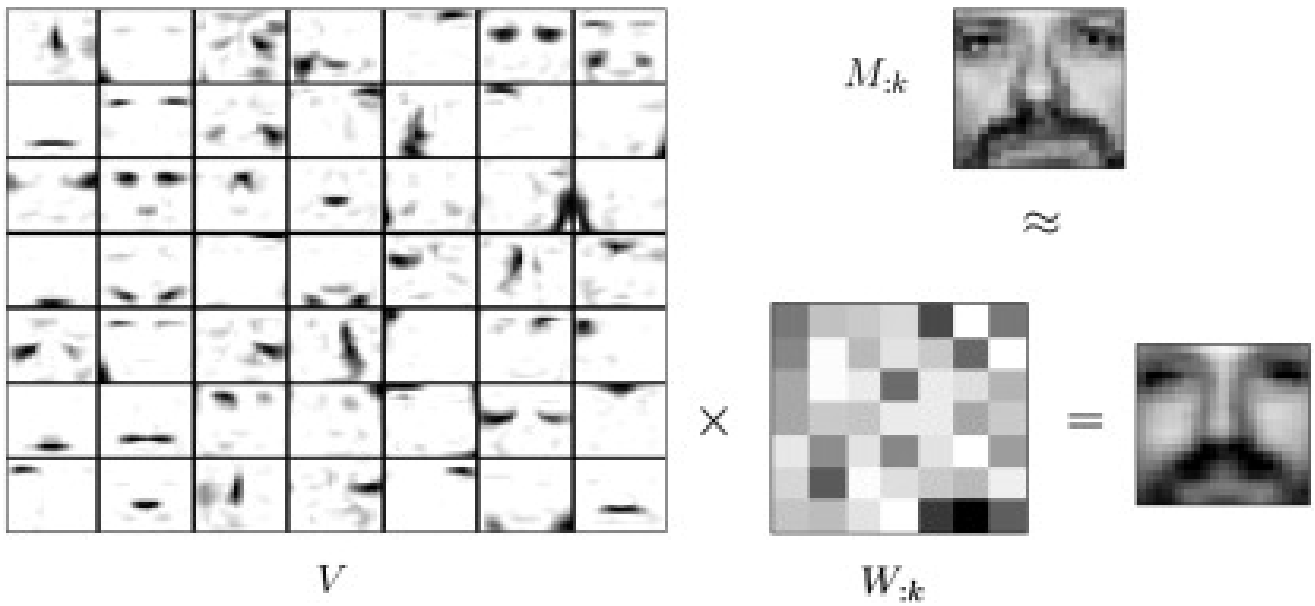
$$A = \begin{pmatrix} a_1^T \\ \dots \\ a_n^T \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_1^T \\ \dots \\ u_n^T \end{pmatrix} \times V^T$$

Entonces, cada a_i se escribe como una combinación lineal de vectores columna de V:

$$a_i = u_{i,1} v_1 + \cdots + u_{i,k} v_k$$

2.3.1. Factorización no-negativa:intuición

Los $u_{i,j}$ se interpretan como pesos de una base de vectores de atributos dado por $v_1, \ldots, v_k$.



Cada vector a_i corresponde a una imagen y se combinan vectores de referencia v_j para obtener la imagen final.

$\Rightarrow$ Es una aproximación!

2.3.2. Factorización no negativa (NMF):definición

En general no existen matrices con entradas no negativas tal que $A = UV^T$. Se hace la aproximación

$$(U^*, V^*) = \underset{U,V\geq 0}{\operatorname{argmin}} \frac{1}{2}\|A - UV^T\|_F^2 =: \underset{U,V\geq 0}{\operatorname{argmin}} J(U, V).$$

La cantidad J se puede escribir

$$J(U, V) = \frac{1}{2}\mathrm{tr}(AA^T + UV^TVU^T - AVU^T - UV^TA^T).$$

El truco habitual para minimizar una funcional bajo restricciones es considerar el Lagrangiano:

$$L(U, V) = J(U, V) - \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{k}\alpha_{i,j}u_{i,j} - \sum_{i=1}^{d}\sum_{j=1}^{k}\beta_{i,j}v_{i,j}$$

2.3.2. Factorización no negativa (NMF):definición

Si consideramos la notación $P_\alpha = (\alpha_{i,j})_{i,j}$ y $P_\beta = (\beta_{i,j})_{i,j}$ entonces el Lagrangiano se escribe

$$L(U, V) = J(U, V) - \text{tr}(P_\alpha U^T) - \text{tr}(P_\beta V^T).$$

Ahora la tarea se reduce a minimizar la funcional L. Para eso, podemos considerar una noción extendida de derivación: la derivación matricial.

2.3.3. Paréntesis : Derivación matricial

Por definición formal se considera la derivación de una función a valores reales de una matriz A como la matriz de derivadas al respecto de cada entrada de A. Formalmente,

$$\frac{df(A)}{dA} = \left(\frac{df(A)}{da_{i,j}}\right)_{i,j}$$

For example,

$$\frac{d\text{tr}(AB)}{dA} = B^T, \qquad \frac{d\text{tr}(A^TA)}{dA} = 2A, \qquad \frac{d\text{tr}(A^TBA)}{dA} = (B+B^T)A$$

Ejercicio: Mostrar esas formulas.

2.3.4. (NMF) fin de calculo

La derivación de L al respecto de U y V da las dos ecuaciones matriciales:

$$-AV + UV^T V - P_\alpha = 0$$
$$-A^T U + VU^T U - P_\beta = 0$$

y las condiciones de positividad dan

$$\alpha_{i,j} u_{i,j} = 0 \quad \forall i, j$$
$$\beta_{i,j} v_{i,j} = 0 \quad \forall i, j.$$

La combinación de esas ecuaciones permite obtener las relaciones

$$(AV)_{ij} u_{ij} = (UV^T V)_{ij} u_{ij}$$
$$(A^T U)_{ij} v_{ij} = (VU^T U)_{ij} v_{ij}$$

2.3.4. (NMF) fin de calculo

Para resolver este sistema, se considera una aproximación iterativa:

1. Inicialización: Tomar U_0 y V_0 positivas (al azar por ejemplo)
2. A cada iteración se calculan todos los

$$u_{ij}^{(t+1)} = \frac{(U^{(t)}(V^{(t)})^T V^{(t)})_{ij} u_{ij}^{(t)}}{(AV^{(t)})_{ij}}$$

$$v_{ij}^{(t+1)} = \frac{(V^{(t)}(U^{(t)})^T U^{(t)})_{ij} v_{ij}^{(t)}}{(A^T U^{(t)})_{ij}}$$

3. Usar un criterio de paro para terminar el algoritmo.

Los valores $U^{(t)}$ y $V^{(t)}$ de salida forman la factorización aproximada de A.
Para una referencia de convergencia ver:
Algorithms for Non-negative Matrix Factorization - Lee, Seung

2.Busqueda de estructura:Cambio de espacio

2.4.Curso del 03 de octubre

2.4.1. PCA: Análisis en componentes principales

Supongamos una vez más tener una matriz de datos $A \in \mathcal{M}_{n,p}(\mathbb{R})$ donde n es el número de individuos de la muestra y p el número de atributos.

En general podemos tener todos los casos: $n \gg p$, $n > p$, $n \approx p$, $n < p$ o $n \ll p$.

Las herramientas vistas en las clases anteriores permiten hacer una reducción de dimensionalidad (Eckart-Young, Factorización no negativa, Criterio de Fisher,...).

Vamos a ver una otra técnica (como caso particular de Eckart-Young).

2.4.1. PCA: Análisis en componentes principales

Aquí se supone que las variables correspondiendo a las filas son i.i.d. (idénticamente distribuidas según una distribución desconocida y independientes). La matriz de varianza de A está dado por $\Sigma = A^T A \in \mathcal{M}_p(\mathbb{R})$.

Queremos "proyectar" los datos X_i (las filas) sobre un espacio de dimensión más bajo que p (su dimensión natural) de tal manera que se guarda la mayor variación posible dentro de los datos.

Entonces, si G corresponde a la matriz de proyección, los nuevos datos son $y_i = GX_i^T$. La matriz G es de tamaño $k \times p$ con $k \leq p$. La nueva matriz de varianza está dada por

$$\text{Var}(y) = G\Sigma G^T$$

Para tener una cantidad en $\mathbb{R}_+$, se considera la varianza total dada por $\text{tr}(G\Sigma G^T)$.

2.4.1. PCA: Análisis en componentes principales

Para una k dada, definemos la transformación G óptima como la matriz de proyección que maximize la varianza total. Formalmente, queremos resolver el problema de optimización siguiente:

$$\max_{G:GG^T=I_k} \operatorname{tr}(G\Sigma G^T) = \lambda_1 + \cdots + \lambda_k$$

donde las $\lambda_1, \ldots, \lambda_k$ corresponden a los k valores propios más grandes de la matriz Σ.

La solución está dada por la matriz $G^T = [t_1, \ldots, t_k]$ de los vectores propios (ortogonales) correspondiendo a los valores propios $\lambda_1, \ldots, \lambda_k$.

2.4.2. PCA: Un lemma importante

Al final la cosa a mostrar es el

Teorema

Sea A una matriz simétrica $n \times n$ con descomposición espectral

$$A = T \Delta T^T \qquad \Delta = diag(\delta_1, \ldots, \delta_n)$$

donde supongamos que los valores $\delta_1, \ldots, \delta_n$ están ordenados de manera decreciente. Tenemos $TT^T = T^T T = I_n$. Sea $k \leq n$, entonces

$$\max_{GG^T = I_k} tr\left(GAG^T\right) = \delta_1 + \cdots + \delta_k.$$

Y la cota superior se alcanza para $G^T = [t_1, \ldots, t_k]$ la matriz de los vectores propios (ortogonales) correspondiendo a los k valores propios más grandes.

2.4.2. PCA: Un lemma importante

- Sea $P = T^T G^T G T$, entonces

$$\text{tr}(GAG^T) = \text{tr}(GT\Delta T^T G^T) = \text{tr}(T^T G^T GT\Delta) = \text{tr}(P\Delta)$$

- Tenemos

$$P^2 = T^T G^T GTT^T G^T GT = T^T G^T GG^T GT = T^T G^T GT = P$$

entonces P es un proyector.

- Fácilmente, tenemos $P^T = P$ entonces el proyector es ortogonal.
- En particular sabemos que $\text{tr}(P) = \text{rango}(P)$ lo que implica $p_{11} + \cdots + p_{nn} = k$ y que $0 \leq p_{ii} \leq 1$ (Usar $P = P^T P$).
- Finalmente,

$$\text{tr}(GAG^T) = p_{11}\delta_1 + \cdots + p_{nn}\delta_n \leq \delta_1 + \cdots + \delta_k$$

2.4.2. PCA: Un lemma importante

Al final si se elige $G^T = [t_1, \ldots, t_k]$, tenemos la proyección $P = T^T G^T G T$ que se reduce a

$$P = \begin{pmatrix} I_k & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

y entonces tenemos que $p_{11} = \cdots = p_{kk} = 1$ y $p_{jj} = 0$ para $j > k$. Entonces, encontramos una matriz que alcanza la cota superior.

2.4.3. PCA: Solución general

Además de maximizar $\text{tr}(G\Sigma G^T)$ vimos que la descomposición en componentes principales tiene las propiedades:

Sea $y = Gx^T$ la transformación de la variable x en un espacio de dimensión k. Denotamos $y_1, \ldots, y_k$ los componentes de y.

1. Tenemos $\text{Var}(y_1) \geq \cdots \geq \text{Var}(y_k)$.
2. Las variables y_i y y_j son descorrelacionadas.

Ejercicio: Mostrar esas dos propiedades.

2.Busqueda de estructura:Cambio de espacio

2.5.Curso del 08 de octubre

2.5.1. Proyecciones aleatorias

Como en el caso de PCA, queremos modificar los datos $x_1, \ldots, x_n$ por una matriz P de tal manera que los datos $y_i = Px_i$ conservan la mayoría de la información.

El enfoque de esta parte es de conservar algo de las distancias $\|x_i - x_j\|$: aspecto geometrico.

Solución: Lema de Johnson-Lindenstrauss.

La mayoria de las proyecciones (al azar) van a funcionar. Hay una restricción sobre la dimensión más baja sobre la cual se hace la proyección.

2.5.1. Proyecciones aleatorias

Lema (Johnson-Lindenstrauss)

Sean $u_1, \ldots, u_n$ *puntos arbitrarios de* $\mathbb{R}^p$. *Definemos la matriz* $P \in \mathcal{M}_{p,k}(\mathbb{R})$ *como*

$$p_{ij} = \frac{1}{\sqrt{k}} z_{ij} \quad \textit{donde} \quad z_{ij} \sim \mathcal{N}(0,1)$$

Sean $v_1, \ldots, v_n$ *los n puntos obtenidos por* $v_i = P^T u_i$. *Entonces con probabilidad al menos* $1/2$,

$$(1-\epsilon)\|u_i - u_j\|^2 \leq \|v_i - v_j\|^2 \leq (1+\epsilon)\|u_i - u_j\|^2$$

con $\epsilon \in (0, 1/2)$ *y* $k \geq 9\frac{\log n}{\epsilon^2 - \epsilon^3}$.

2.5.2. Prueba del lema de J-L

Si denotamos $u \in \mathbb{R}^p$ y $v = P^T u$. Entonces $\mathbb{E}\left[\|v\|^2\right] = \|u\|^2$.
Denotamos $P = [p_1, \ldots, p_k]$ en columnas. Entonces,

$$\mathbb{E}\left[\|v\|^2\right] = \mathbb{E}\left[\sum_{j=1}^{k} v_j^2\right] = \mathbb{E}\left[\sum_{j=1}^{k} (p_j^T u)^2\right] = \mathbb{E}\left[\sum_{j=1}^{k}\left(\sum_{i=1}^{p} p_{ij} u_i\right)^2\right]$$

$$= \frac{1}{k}\mathbb{E}\left[\sum_{j=1}^{k}\left(\sum_{i=1}^{p} z_{ij} u_i\right)^2\right] = \frac{1}{k}\sum_{j=1}^{k}\mathbb{E}\left[\left(\sum_{i=1}^{p} z_{ij} u_i\right)^2\right]$$

$$= \frac{1}{k}\sum_{j=1}^{k}\mathrm{Var}\left(\sum_{i=1}^{p} z_{ij} u_i\right) = \frac{1}{k}\sum_{j=1}^{k}\sum_{i=1}^{p} u_i^2 = \|u\|^2$$

2.Busqueda de estructura:Cambio de espacio

2.6.Curso del 10 de octubre

2.6.1. Prueba del lema de J-L

Para $j = 1, \ldots, k$ defimanos

$$x_j = \frac{\sqrt{k}}{\|u\|} p_j^T u = \frac{\sqrt{k}}{\|u\|} v \quad \Longrightarrow \quad \|x\|^2 = \frac{k}{\|u\|^s} \|v\|^2$$

Denotamos $y = \|x\|$.

$$\begin{aligned}
\mathbb{P}\left(\|v\|^2 \geq (1+\epsilon)\|u\|^2\right) &= \mathbb{P}\left(y \geq (1+\epsilon)k\right) \\
&= \mathbb{P}\left(e^{\lambda y} \geq e^{\lambda(1+\epsilon)k}\right) \\
&\leq \frac{\mathbb{E}\left[e^{\lambda y}\right]}{e^{\lambda(1+\epsilon)k}} \\
&\leq \frac{\mathbb{E}\left[\exp(\lambda \sum_j x_j^2)\right]}{e^{\lambda(1+\epsilon)k}} = \frac{1}{e^{\lambda(1+\epsilon)k}} \prod_j \mathbb{E}\left[e^{\lambda x_j^2}\right] \\
&\leq \frac{1}{e^{\lambda(1+\epsilon)k}} \frac{1}{(1-2\lambda)^{k/2}} = \left(\frac{e^{-2\lambda(1+\epsilon)}}{1-2\lambda}\right)^{k/2}
\end{aligned}$$

2.6.1. Prueba del lema de J-L

Sabemos que $\mathbb{P}\left(\|v\|^2 \geq (1+\epsilon)\|u\|^2\right) \leq \left(\frac{e^{-2\lambda(1+\epsilon)}}{1-2\lambda}\right)^{k/2}$ entonces si $\lambda = \epsilon/2(1+\epsilon)$ tenemos que

$$\mathbb{P}\left(\|v\|^2 \geq (1+\epsilon)\|u\|^2\right) \leq \left((1+\epsilon)e^{-\epsilon}\right)^{k/2}$$

y debido a que $(1+\epsilon) \leq e^{\epsilon-(\epsilon^2-\epsilon^3)/2}$ (cuidado no tenemos $(1+\epsilon) \leq e^{\epsilon-\epsilon^2/2}$),

$$\mathbb{P}\left(\|v\|^2 \geq (1+\epsilon)\|u\|^2\right) \leq e^{-k(\epsilon^2-\epsilon^3)/4}.$$

De la misma manera tenemos que

$$\mathbb{P}\left(\|v\|^2 \leq (1-\epsilon)\|u\|^2\right) \leq e^{-k(\epsilon^2-\epsilon^3)/4}$$

En particular, si resumimos las dos desigualdades, tenemos que

$$\mathbb{P}\left((1-\epsilon)\|u\|^2 \leq \|v\|^2 \leq (1+\epsilon)\|u\|^2\right) \geq 1 - 2e^{-k(\epsilon^2-\epsilon^3)/4}$$

2.6.1. Prueba del lema de J-L

Resumimos: Mostramos que para cualquier u, y para $v = P^T u$.

Si lo aplicamos para una diferencia $u_i - u_j$, podemos denotar $\Delta_{i,j}$ el evento "malo"

$$(1-\epsilon)\|u_i-u_j\|^2 \geq \|v_i-v_j\|^2 \qquad \text{o} \qquad \|v_i-v_j\|^2 \leq (1+\epsilon)\|u_i-u_j\|^2$$

tenemos $\mathbb{P}(\Delta_{i,j}) \leq 2e^{-k(\epsilon^2-\epsilon^3)/4}$. Podemos usar la desigualdad para las $n(n-1)/2$ pares de puntos. Entonces,

$$\mathbb{P}\left(\bigcup_{i,j} \Delta_{i,j}\right) \leq n(n-1)e^{-k(\epsilon^2-\epsilon^3)/4} \leq n^2 e^{-k(\epsilon^2-\epsilon^3)/4}$$

Entonces, si tomamos $k \geq 4\log(2n^2)/(\epsilon^2 - \epsilon^3)$ tenemos $\mathbb{P}(\cup_{i,j}\Delta_{i,j}) \leq 1/2$.

2.6.2. Ventajas de las proyecciones de J-L

Resumimos lo visto:

- Es un resultado de reducción de dimensionalidad. Nos dice que si repetimos el experimento de lanzar al azar P, muy rapidamente (con esperanza $\mathbb{E}[\mathcal{E}(1/2)] = 2$) obtendremos una P que satisface la casi-isometría.
- La dimensión del espacio reducido es del orden $\log(n)$ y **no** depende de la dimensión de origen p del espacio ambiante.

2.6.3. Resumen global de reducción de dimensionalidad

Hemos estudiado varias técnicas que permiten pre-procesar los datos:

1. SVD (descomposición en valores singulares)
2. Complementación de matrices de rango bajo.
3. Factorización no-negativa (NMF)
4. PCA : analisis en componentes principales.
5. Proyecciones aleatorias (Lema de J-L)

Cada técnica tiene un rol preciso y tiene su lista de ventajas-desventajas.

3.Agrupamiento de datos (Clustering)

3.1.Clase del 10 de Octubre

3.1.1. k-medias:definición

El contexto estadístico es identico a la problematica de classificación. Se supone que tengamos $x_1, \ldots, x_n$ datos de un espacio ambianta $\mathbb{R}^p$.

- Queremos k clusters $C_1, \ldots, C_k$ que forman una partición de los datos $x_1, \ldots, x_n$.
- En k-medias nos referimos a los centroides de las clases:

$$\mu(C_i) = \underset{\mu \in \mathbb{R}^p}{\operatorname{argmin}} \sum_{x \in C_i} d^2(x, \mu)$$

- La solución es explicita para cada una de las k clases y dada por

$$\mu(C_i) = \frac{1}{|C_i|} \sum_{x \in C_i} x \qquad (k\text{-medias})$$

Ejercicio: Demostrar este hecho.

3.1.1. k-medias:definición

- La función de riesgo que se considera es

$$G(C_1, \ldots, C_k) = \sum_{i=1}^{k} \sum_{x \in C_i} d^2(x, \mu(C_i)).$$

- El objectivo de k-medias es encontrar la mejor partición $C_1, \ldots, C_k$ en el sentido de la minimización de $G(C_1, \ldots, C_k)$.
- Dado el centroide, el C_i que minimiza

$$\sum_{x \in C_i} d^2(x, \mu(C_i))$$

está dado por

$$C_i = \{x : i = \text{argmin}_j d^2(x, \mu(C_j))\}$$

3.1.2. El algoritmo k-medias

1. Inicialización: Escoger aleatoriamente k centroides $\mu_1^0, \ldots, \mu_k^0 \in \mathbb{R}^d$.
2. Hasta que los centroides no cambien:
   2.1 En la iteración t, para $i = 1, \ldots, k$ definir los clusters

$$C_i^t = \left\{ x : i = \underset{j}{\operatorname{argmin}} \|x - \mu_j^{t-1}\|^2 \right\}$$

   2.2 Para cada cluster C_i calcular

$$\mu_i^t = \frac{1}{|C_i^t|} \sum_{x \in C_i^t} x$$

La propiedad importante es que la función de riesgo es decreciente.

3.1.3. Convergencia de k-medias

- Supongamos construidos los clusters $C_1^{t-1}, \ldots, C_k^{t-1}$ y los centroides $\mu_1^{t-1}, \ldots, \mu_k^{t-1}$ de la etapa $t-1$.
- Entonces,

$$G(C_1^t, \ldots, C_k^t) = \sum_{i=1}^{k} \sum_{x \in C_i^t} \|x - \mu_i^t\|^2 \leq \sum_{i=1}^{k} \sum_{x \in C_i^t} \|x - \mu_i^{t-1}\|^2$$

- Por otro lado, los clusters C_i^{t-1} minimizan la cantidad

$$\sum_{i=1}^{k} \sum_{x \in C_i} \|x - \mu_i^{t-1}\|^2$$

sobre la clase de todos los clusters posibles. Entonces,

$$\sum_{i=1}^{k} \sum_{x \in C_i^t} \|x - \mu_i^{t-1}\|^2 \leq \sum_{i=1}^{k} \sum_{x \in C_i^{t-1}} \|x - \mu_i^{t-1}\|^2$$

3.1.3. Convergencia de k-medias

Mostramos que $\forall t$,

$$G(C_1^t, \ldots, C_k^t) \leq G(C_1^{t-1}, \ldots, C_k^{t-1}).$$

Entonces $t \mapsto G(C_1^t, \ldots, C_k^t)$ es decreciente. Como las particiones de los datos forma un conjunto finito, a partir de una cierta etapa $G(C_1^t, \ldots, C_k^t)$ es constante.

El algoritmo es convergente.

3.1.4. Una alternativa: k-medoides

- La idea principal es de reemplazar la distancia euclidianna por una medida de disimilaridad D entre puntos de la muestra.
- Se pierde la noción de centroides iguales a las medias empíricas de cada cluster.
  Los medioides serán siempre elementos de la muestra misma.
- Algoritmo PAM (Partition Around Medoids).
  1. Se inicia con una partición dada $C_1, \ldots, C_k$.
  2. Hasta la convergencia se hace:
     2.1 Se encuentran los mediodes según la formula

$$m_i = \underset{x \in C_i}{\operatorname{argmin}} \sum_{y \in C_i} D(x, y)$$

     2.2 Se actualizan los clusters asignando los datos más cercanos (en el sentido de D) a los medioides.

3.1.5. Una otra alternativa: k-centros

- La idea es optimizar una otra función de riesgo

$$G(C_1, \ldots, C_k) = \max_j \max_{x \in C_j} d(\mu_j, x)$$

- En general es un problema difícil si permitimos que los centros μ_j sean elementos genéricos de $\mathbb{R}^d$.
- El algoritmo de aproximación es más sencillo que k-means. Los centroides se pueden elegir sucesivamente.

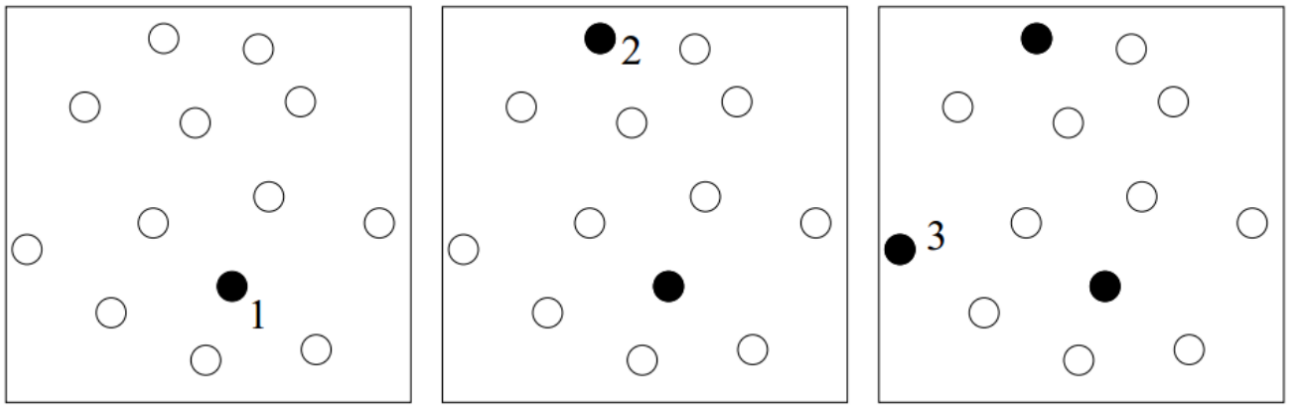
Farthest-First Traversal

1. Inicio con un punto μ_1 arbitrario.
2. Para cada punto de los datos $x \in \mathcal{D}$, calcular $d(\mu_1, x)$ y elegir el punto μ_2 el más alejado.
3. A la i ésima interación se identifica el punto μ_i realizando el

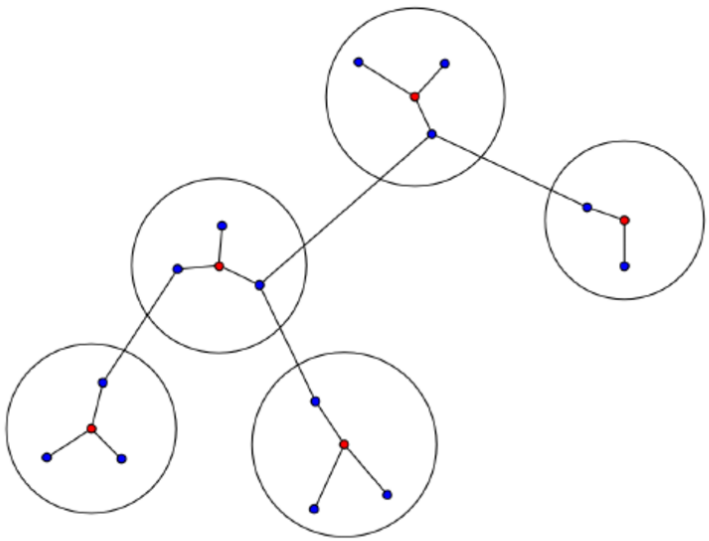
$$\operatorname*{argmax}_{x \in \mathcal{D}} \min_{j<i} d(x, \mu_j).$$

3.1.5. Una otra alternativa: k-centros

Una visualización del algoritmo:



Al final se obtiene una partición:



3.Agrupamiento de datos (Clustering)

3.2.Clase del 15 de octubre

3.2.1. Agrupamiento jerárquico: definición

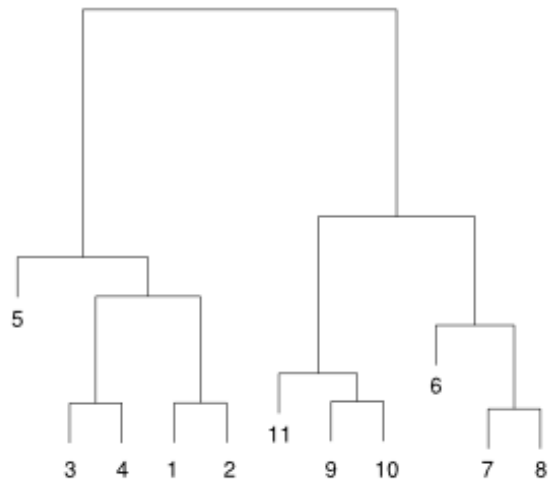
Entramos en una nueva manera de agrupar: Agrupamiento jerárquico.

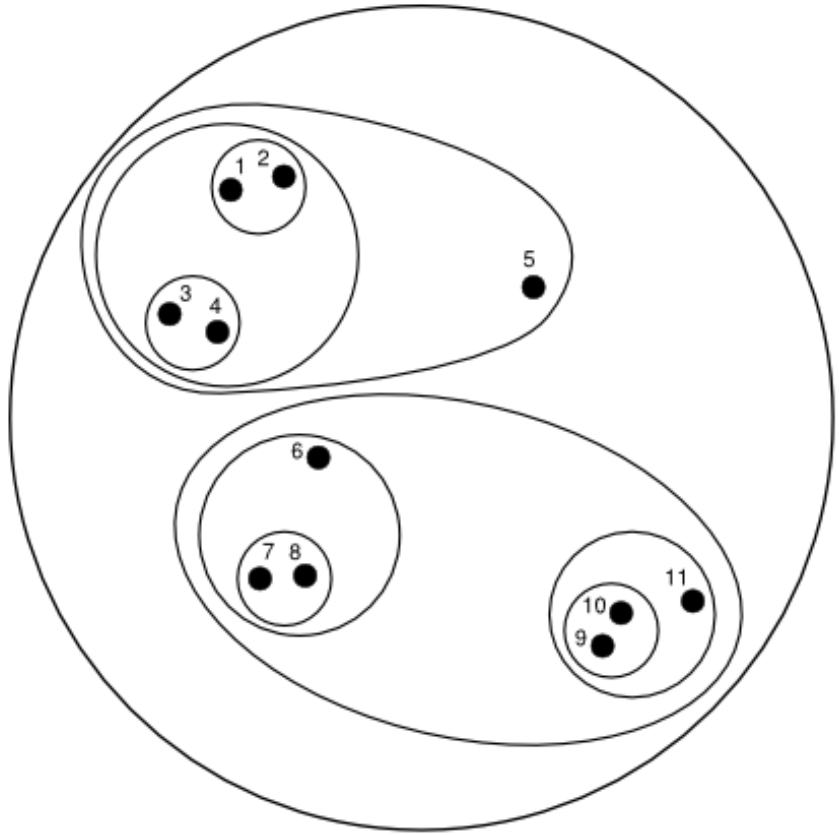
- Son agrupamientos sucesivos. Al tiempo $t = 1$ los clusters corresponden a la partición las más fina $\{1\}, \ldots, \{n\}$. Para simplificar las notaciones confudimos los clusters sobre los indices con los clusters sobre los datos $x_1, \ldots, x_n$.
- Si $C_1^t, \ldots, C_k^t$ es la partición de los datos al tiempo t entonces al tiempo $t + 1$ la nueva partición es tal que

$$\left(C_i^t\right)_i \text{ es más fina que } \left(C_i^{t+1}\right)_i$$

- Al terminar el proceso, obtenemos un único cluster $C_1^n = \{1, \ldots, n\}$ que contiene todos los datos.

3.2.1. Agrupamiento jerárquico: definición





3.2.1. Agrupamiento jerárquico: definición

Supongamos que tenemos aceso a las distancias $d(x_i, x_j)$ entre parejas de datos.

Una vez que se agruparon datos, tenemos distancias entre clusters. Eso da luz a varias maneras de proceder.

El agrupamiento jerárquico tiene *cuatro* versiones populares:

- Simple linkage: la distancia mínima entre puntos de cada cluster.

$$\rho(C, D) = \inf_{x \in C, y \in D} d(x, y)$$

- Complete linkage: la distancia máxima entre puntos de cada cluster.

$$\rho(C, D) = \sup_{x \in C, y \in D} d(x, y)$$

(diametro del cluster $C \cup D$)

3.2.1. Agrupamiento jerárquico: definición

- Average linkage: la distancia promedia entre los clusters.

$$\rho(C, D) = \frac{1}{|C||D|} \sum_{x \in C} \sum_{y \in D} d(x, y)$$

- Ward linkage: la varianza promedia dentro de la unión de dos clusters.

$$\rho(C, D) = \frac{1}{|C| + |D|} \sum_{x,y \in C \cup D} d(x, y)^2$$

En cada tiempo t, se agrupan clusters que corresponden a la distancia mínima entre clusters,

$$C, D = \underset{C,D \in (C_i^t)_i}{\operatorname{argmin}} \ \rho(C, D)$$

Los clusters al tiempo $t + 1$ son $((C_i^t)_i \backslash \{C, D\}) \cup \{C \cup D\}$

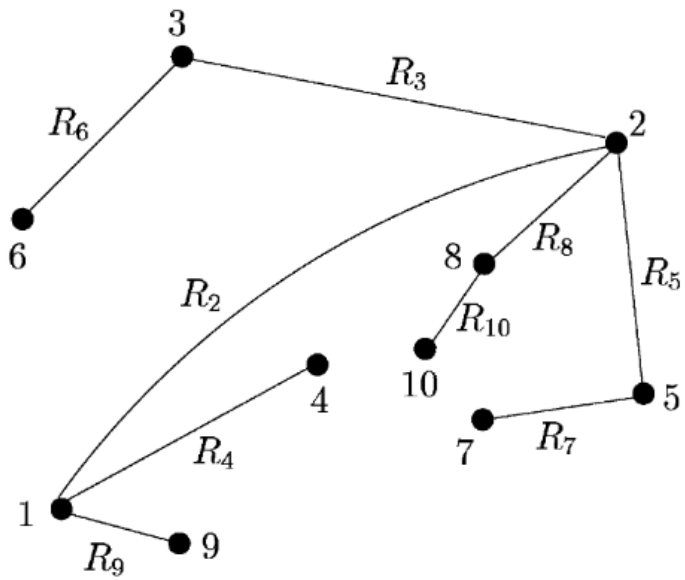
3.2.2. Un algoritmo basado en FFT

Retomamos el algoritmo FFT:

Input: n puntos con sus distancias respectivas $d(x_i, x_j)$.

1. Al azar elegir un punto x_i y etiquetarlo 1.
2. Para $i = 2, \ldots, n$
   - Buscar el punto el más alejado de $\{1, \ldots, i-1\}$ y etiquetarlo i.
   - Sea $\pi(i) = \text{argmin}_{j<i}\, d(i,j)$.
   - Sea $R_i = d(i, \pi(i))$.

Output:



3.2.2. Un algoritmo basado en FFT

Para definir el agrupamiento,

- Definimos los centros $\mu_1, \ldots, \mu_k$ como los puntos x_j que corresponden a las etiquetas $1, \ldots, k$.
- Los puntos se asignan a su centroide el más cercano. (Es k-centros)
- Los R_i son las distancias de i a su padre $\pi(i)$.

Si denotamos $R(C_i) = \max_{x \in C_i} d(x, \mu_i)$ el riesgo, tenemos

Lema

Tenemos

- $R_2 \geq \cdots \geq R_n$
- *Para cada* k, $R(C_k) = R_{k+1}$.

3.2.2. Un algoritmo basado en FFT

Prueba:

Tomando $i < j$,

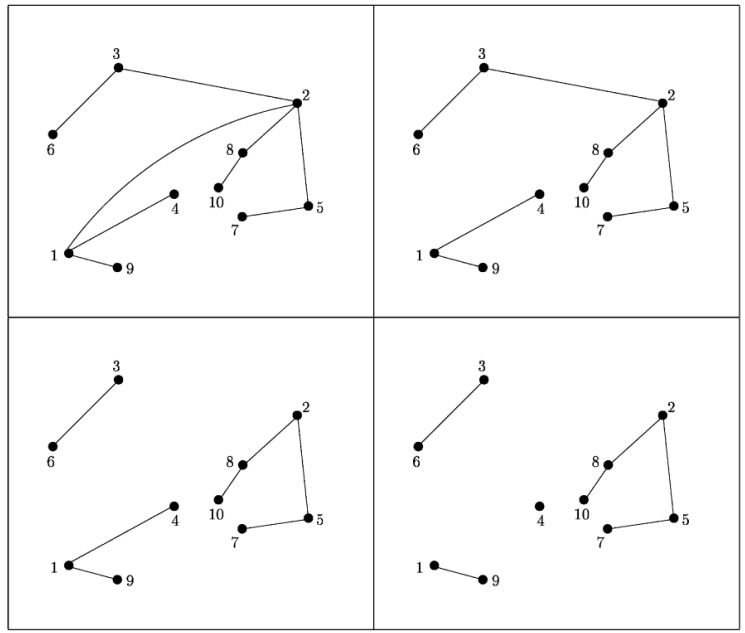
$$\begin{aligned} R_j &= d(j, \pi(j)) \\ &= d(j, \{1, \ldots, j-1\}) \\ &\leq d(j, \{1, \ldots, i-1\}) \\ &\leq d(i, \{1, \ldots, i-1\}) = R_i \end{aligned}$$

Para el segundo punto, la distancia de un punto $i > k$ a su punto más cercano es

$$d(i, \{1, \ldots, k\}) \leq d(k+1, \{1, \ldots, k\}) = R_{k+1}$$

3.2.3. Agrupamiento jerárquico con FFT

- Sea $\rho : \{2, \ldots, n\} \to \{1, \ldots, n\}$ tal que $\rho(i) < i$.
- La gráfica con vertices $\{1, \ldots, n\}$ y aristas $\{(i, \rho(i)) : 2 \leq i \leq n\}$ es un árbol denotado T_ρ.
- Para cada k, el agrupamiento está definido:
  - Quitamos las $k - 1$ aristas $(2, \rho(2)), \ldots, (k, \rho(k))$ de T_ρ. Eso deja k componentes.
  - Cada grupo es uno de las componentes restantes.



3.Agrupamiento de datos (Clustering)

3.3.Curso 17 de octubre

3.3.1. Agrupamiento espectral: definición

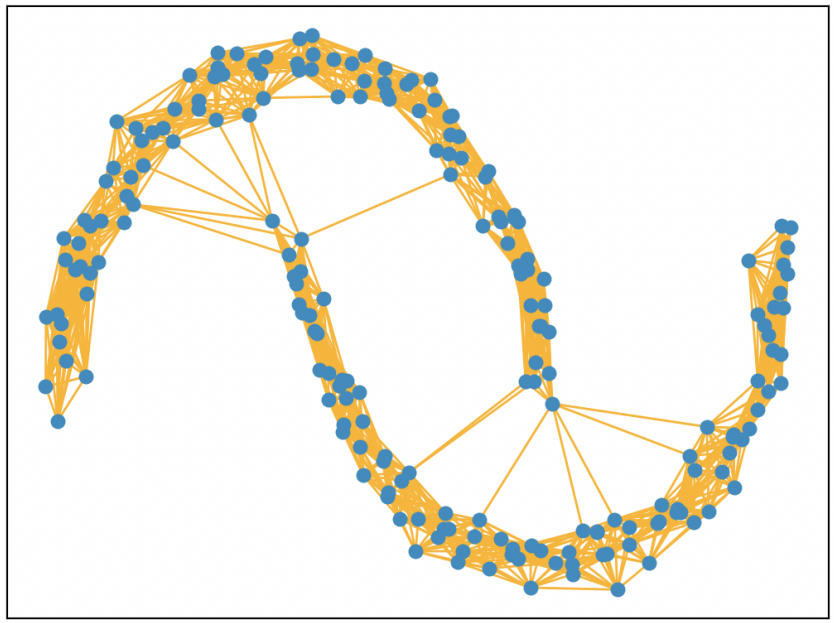
En este tipo de agrupamiento, usaremos una vez más las ideas de descomposición espectral de una matriz. Supongamos que tenemos aceso a una matriz de similaridad simetrica $S \in \mathcal{M}_n(\mathbb{R})$.

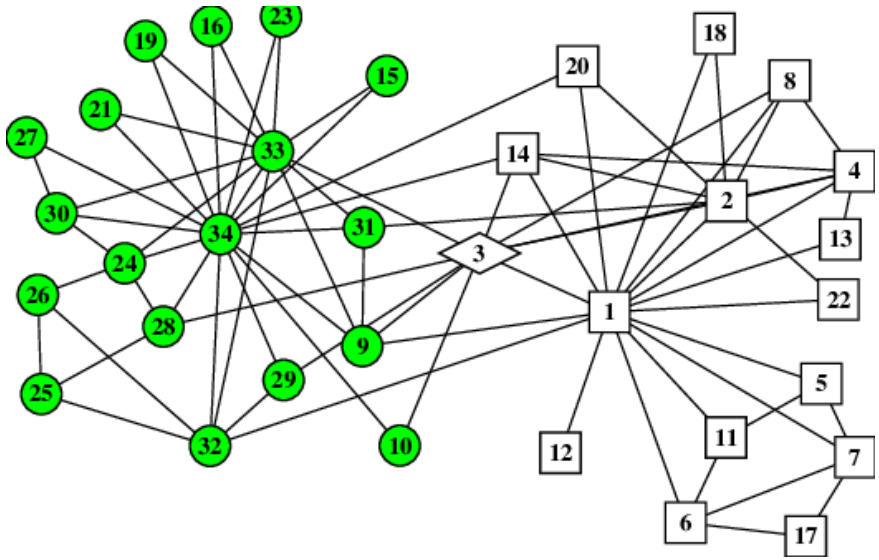
- Imaginamos que podemos organizar los datos en una forma de grafo $G = (V, E)$ donde los vertices $V = \{v_1, \ldots, v_n\}$ son los datos.
- El grafo es ponderado en el sentido de que existe una matriz $W = (w_{i,j})_{1 \leq i,j \leq n}$ de tal manera que si $w_{i,j} = 0$ los vertices v_i y v_j no están conectados.
- Consideramos la noción siguiente de grado para el vertice i:

$$d_i = \sum_{j=1}^{n} w_{i,j}$$

y la matriz de grados D está definida como la matriz diagonal con los $(d_i)_i$ en la diagonal.

3.3.1. Agrupamiento espectral: definición





3.3.2. Grafos populares

ϵ-vecindad: Dos vertices v_i y v_j se conectan si su distancia es menor a ϵ. El peso $w_{i,j}$ asociado es 1 si están conectados y zero si no.

k-vecinos más cercanos: (*k-vecinos más cercanos*) Un vertice v_i se conecta a v_j si es uno de sus k vecinos más cercanos. El peso $w_{i,j}$ asociado es $d(v_i, v_j)$ (o su disimilaridad $D(v_i, v_j)$ en el caso generalizado) la distancia entre los dos puntos.
(*k-vecinos más cercanos mutual*) Dos vertices v_i y v_j se conectan si v_j es un k vecinos más cercanos de v_i y v_i es un k vecinos más cercanos de v_j.

Grafos completos: Cada par de vertices están conectados. El peso $w_{i,j}$ asociado es una función de similaridad. Por ejemplo,

$$w_{i,j} = \exp(-\|x_i - x_j\|^2/2\sigma^2).$$

3.3.3. Noción de tamaño en un grafo

Vamos a tener que considerar sub-grafos de G.

- Para A, un subconjunto de V, $i \in A$ es el conjunto de indices $\{i | v_i \in A\}$.
- El tamaño de un conjunto A se puede definir como:

$$|A| = \sum_{i \in A} 1 = \text{ el número de elementos de } A.$$

$$\text{vol}(A) = \sum_{i \in A} d_i$$

- Para dos sub-conjuntos A, B de V, definimos

$$W(A, B) = \sum_{i \in A, j \in B} w_{i,j}$$

3.3.4. El Laplaciano

Definimos la matriz $L = D - W$. Se llama **Laplaciano no normalizado**.

Proposición

Tenemos los siguiente

1. *L es simétrico y definido positivo.*
2. *Para un vector $u \in \mathbb{R}^n$,*

$$u^T L u = \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{n} w_{i,j}(u_i - u_j)^2$$

3. *0 es valor propio de L y el vector $\mathbf{1}$ (con 1 en cada entrada) es vector propio asociado.*

Ejercicio: Demostrar la proposición.

3.3.4. El Laplaciano

El Laplaciano es importante por el lema siguiente:

Lema (fundamental)

Sea G un grafo con pesos $(w_{i,j})$ no negativos. Denotamos k la multiplicidad del valor propio 0 de L. Entonces, el número de componentes conectadas $A_1, \ldots, A_k$ de G es igual a k. Además, el espacio propio asociado al valor propio 0 está generado por los vectores $\mathbb{1}_{A_1}, \ldots, \mathbb{1}_{A_k}$,

$$\mathbb{1}_{A_i} = (u_1, \ldots, u_n) \qquad \text{donde } u_j = 1 \text{ si y solo si } v_j \in A_i.$$

3.3.4. El Laplaciano

Prueba: Los pesos $w_{i,j}$ tal que $i \in A_s$ y $j \in A_t$ son todos iguales a 0 por definición. En efecto, A_s y A_t no se conectan por ninguna arista. Entonces, para cualquier $u \in \mathbb{R}^n$ podemos escribir,

$$u^T L u = \sum_{i,j=1}^{n} w_{i,j}(u_i - u_j)^2 = \sum_{t=1}^{k} \sum_{i,j \in A_t} w_{i,j}(u_i - u_j)^2.$$

Si u es un vector propio para el valor 0, entonces $u^T L u = 0$. Pero como $u^T L u$ es una suma de valores no negativos, todos los términos valen 0. Entonces, tenemos

$$\forall t = 1, \ldots, k, \ \forall i, j \in A_t, \quad u_i = u_j.$$

Resulta que u es constante sobre cada componente A_t. Entonces u es de la forma $u = a_1 \mathbb{1}_{A_1} + \cdots + a_k \mathbb{1}_{A_k}$.

3.3.5. El Laplaciano normalizado

Se definen dos otras nociones de Laplaciano que son

$$L_{sym} = D^{-1/2} L D^{-1/2} = I - D^{-1/2} W D^{-1/2}$$
$$L_{rw} = D^{-1} L = I - D^{-1} W.$$

Proposición

Tenemos los siguiente

1. *L_{sym} y L_{rw} son simétricos y definido positivo.*
2. *Para un vector $u \in \mathbb{R}^n$,*

$$u^T L_{sym} u = \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{n} w_{i,j} \left(\frac{u_i}{\sqrt{d_i}} - \frac{u_j}{\sqrt{d_j}} \right)^2$$

3. *0 es valor propio de L_{sym} y L_{rw} y el vector $D^{-1/2}\mathbf{1}$ es vector propio asociado (para L_{sym}), el $\mathbf{1}$ es vector propio asociado (para L_{rw})*

3.3.5. El Laplaciano normalizado

Además de lo anterior tenemos algo ligeramente más general para los valores propios esas matrices:

$$\lambda \text{ es v.p. de } L_{rw} \text{ con v.p. } u \Leftrightarrow \lambda \text{ es v.p. de } L_{sym} \text{ con v.p. } D^{1/2}u$$
$$\Leftrightarrow Lu = \lambda Du \text{ (pb de v. p. generalizado)}$$

La grande ventaja de esas definiciones alternativas proviene de la ponderación de los u_i por el grado d_i.

Es un problema más robusto! (Pensar en el caso de outliers)

3.3.6. El algoritmo

Input: La matriz S. El número de clusters k.

1. Construir el grafo de similaridades.
2. Calcular el Laplaciano L.
3. Calcular los primeros k vectores propios $u_1, \ldots, u_k$ de L.
4. Definir $U = (u_1 | \ldots | u_k) \in \mathcal{M}_{n,k}(\mathbb{R})$.
5. Definir les vectores $(y_i)_{i \leq n}$ de $\mathbb{R}^k$ como la i-ésima fila de U.
6. Hacer k clusters $C_1, \ldots, C_k$ con los datos $(y_i)_{i \leq n}$ por el medio de k-medias.

Output: Los clusters $A_1, \ldots, A_k$ tal que $A_i = \{j | y_j \in C_i\}$.

3.Agrupamiento de datos (Clustering)

3.4.Curso del 24 de noviembre

3.4.1. Interpretación del algoritmo

Para una descomposición $A_1, \ldots, A_k$, tenemos varias maneras de medir la calidad del corte.

$$\text{cut}(A_1 \ldots, A_k) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{k} W(A_i, \overline{A}_i)$$

$$\text{RatioCut}(A_1 \ldots, A_k) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{k} \frac{W(A_i, \overline{A}_i)}{|A_i|}$$

$$\text{NCut}(A_1 \ldots, A_k) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{k} \frac{W(A_i, \overline{A}_i)}{\text{Vol}(A_i)}$$

El factor $1/2$ es de pura normalización (para contar una sola vez cada arista).
En los dos últimos criterios, no se permite tener A_i demasiado "pequeños".

3.4.2. Interpretación del algoritmo ($k = 2$)

En el caso $k = 2$. Queremos optimizar el corte en del tipo RatioCut. Es Formalmente,

$$\min_{A \subset V} \text{RatioCut}(A, \overline{A}).$$

Tomando el vector $u = (u_1, \ldots, u_n)^T$ tal que $u_i = \sqrt{|\overline{A}|/|A|}$ si $v_i \in A$ y $u_i = -\sqrt{|A|/|\overline{A}|}$ si $v_i \notin A$, vemos que

$$u^T L u = \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{n} w_{i,j}(u_i - u_j)^2$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{i \in A, j \in \overline{A}}^{n} w_{i,j} \left(\sqrt{\frac{|\overline{A}|}{|A|}} + \sqrt{\frac{|A|}{|\overline{A}|}} \right)^2 + \frac{1}{2} \sum_{i \in \overline{A}, j \in A}^{n} w_{i,j} \left(-\sqrt{\frac{|\overline{A}|}{|A|}} - \sqrt{\frac{|A|}{|\overline{A}|}} \right)^2$$

3.4.2. Interpretación del algoritmo ($k = 2$)

$$
\begin{aligned}
u^T L u &= \text{cut}(A, \overline{A}) \left(\frac{|\overline{A}|}{|A|} + \frac{|A|}{|\overline{A}|} + 2 \right) \\
&= \text{cut}(A, \overline{A}) \left(\frac{|\overline{A}| + |A|}{|A|} + \frac{|\overline{A}| + |A|}{|\overline{A}|} \right) \\
&= |V| \text{RatioCut}(A, \overline{A})
\end{aligned}
$$

Adicionalmente, tenemos

$$
\sum_{i=1}^{n} u_i = \sum_{i \in A} \sqrt{\frac{|\overline{A}|}{|A|}} - \sum_{i \in \overline{A}} \sqrt{\frac{|A|}{|\overline{A}|}} = \sqrt{|\overline{A}||A|} - \sqrt{|\overline{A}||A|} = 0
$$

El vector u es ortogonal al vector $\mathbf{1}$.

3.4.2. Interpretación del algoritmo ($k = 2$)

También tenemos

$$\|u\|^2 = \sum_{i \in A} \frac{|\overline{A}|}{|A|} + \sum_{i \in \overline{A}} \frac{|A|}{|\overline{A}|} = |\overline{A}| + |A| = n$$

Podemos reescribir el problema de mínimización de la manera siguiente

$$\begin{aligned} &\text{Minimizar} && \text{RatioCut}(A, \overline{A}) \\ &\textbf{Subject to} && A \subset V \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} &\text{Minimizar} && u^T L u \\ \Leftrightarrow\ &\textbf{Subject to} && u_i \in \{\sqrt{|\overline{A}|/|A|}, -\sqrt{|A|/|\overline{A}|}\}, \\ & && \|u\| = \sqrt{n}, u \perp \mathbf{1} \end{aligned}$$

Un problema más fácil es resolver

$$\begin{aligned} &\text{Minimizar} && u^T L u \\ &\textbf{Subject to} && \|u\| = \sqrt{n}, u \perp \mathbf{1} \end{aligned}$$

3.4.2. Interpretación del algoritmo ($k = 2$)

El problema de minimización

$$\begin{aligned} \text{Minimizar} \quad & u^T L u \\ \textbf{Subject to} \quad & \|u\| = \sqrt{n}, u \perp \mathbf{1} \end{aligned}$$

se resuelve teoricamente con la teoría espectral.

- La solución está dada por un vector propio asociado al segundo valor propio más chico de L. O equivalentemente por el primer valor propio no nulo.
- Falta transformar el vector u obtenido en un vector que toma los dos valores permitidas:

$$u_i \in \{\sqrt{|\overline{A}|/|A|}, -\sqrt{|A|/|\overline{A}|}\}$$

Idea : Si $\text{sgn}(u_i) = +$ entonces $u_i \leftarrow \sqrt{|\overline{A}|/|A|}$ si no $u_i \leftarrow -\sqrt{|A|/|\overline{A}|}$

3.4.3. Interpretación del algoritmo ($k > 2$)

En el caso $k > 2$, la partición del espacio no se hace tan facilmente.

- Consideramos los vectores $h_j = (h_{j,i})_i$ tal que

$$h_{j,i} = \begin{cases} 1/\sqrt{|A_j|} & \text{if } v_i \in A_j \\ 0 & \text{si no} \end{cases} \qquad \text{con } i = 1, \ldots, n \;\; j = 1, \ldots, k$$

- Definimos la matriz $H \in \mathcal{M}_{n,k}(\mathbb{R})$ poniendo en columna los vectores h_j. Tenemos $H^T H = I_k$.
- Entonces,

$$(H^T L H)_{jj} = h_j^T L h_j = \frac{\text{cut}(A_j, \overline{A}_j)}{|A_j|} = \frac{1}{2} \frac{W(A_j, \overline{A}_j)}{|A_j|}.$$

Lo que da

$$\text{Tr}(H^T L H) = \text{RatioCut}(A_1 \ldots, A_k)$$

3.4.3. Interpretación del algoritmo ($k > 2$)

De la misma manera que en el caso $k = 2$, podemos relajar el problema en

$$\begin{aligned} \text{Minimizar} \quad & \text{Tr}(H^T L H) \\ \textbf{Subject to} \quad & H^T H = I_k \end{aligned}$$

- De nuevo la solución es explicita y dada por la matriz de los k primeros vectores propios.
- Luego tenemos que modificar los vectores h_j de tal manera que los $h_{j,i}$ tomen los k valores posibles $1/\sqrt{|A_j|}$.

  Es una tarea de clustering!
- En la etapa de clustering de los $(h_{j,i})_j$ (vectores filas) se usa un método de clustering ingenuo (por ejemplo k-means).

3.4.4. Formas alternativas del algoritmo

Podemos hacer una versión que usa el Laplaciano renormalizado.

Input: La matriz S. El número de clusters k.

1. Construir el grafo de similaridades.
2. Calcular el Laplaciano L.
3. **Calcular los primeros k vectores propios (generalizados) $u_1, \ldots, u_k$ correspondiendo al problema $Lu = \lambda Du$.**
4. Definir $U = (u_1 | \ldots | u_k) \in \mathcal{M}_{n,k}(\mathbb{R})$.
5. Definir les vectores $(y_i)_{i \leq n}$ de $\mathbb{R}^k$ como la i-ésima fila de U.
6. Hacer k clusters $C_1, \ldots, C_k$ con los datos $(y_i)_{i \leq n}$ por el medio de k-medias.

Output: Los clusters $A_1, \ldots, A_k$ tal que $A_i = \{j | y_j \in C_i\}$.

3.4.5. Interpretación probabilista: Random Walk sobre G

Una interpretación natural de la disimilaridad *NCut* viene de las caminatas aleatorias sobre el grafo G.

- Estando en un punto v_i, definimos la probabilidad de transición a v_j como

$$p_{i,j} = \frac{w_{i,j}}{d_i}$$

  La matriz de transición formada $P = (p_{i,j})_{i,j=1,\dots,n}$ está dada por

$$P = D^{-1}W$$

- La teoría de cadenas de Markov dice que existe una única medida estable π cuando el grafo es conectado y no-bipartito,

$$\pi_i = \frac{d_i}{\mathrm{Vol}(V)}.$$

3.4.5. Interpretación probabilista: Random Walk sobre G

- Supongamos que el grafo es conectado y no-bipartito. Y denotamos X_0 una variable a valor en V con distribución π.
- Denotamos $(X_t)_{t\geq 1}$ la caminata aleatoria con estado inicial X_0.
- Para $A, B \subset V$ disjuntos, denotamos $\mathbb{P}(B|A) = \mathbb{P}(X \in B | X_0 \in A)$

Proposición

En esas condiciones,

$$NCut(\overline{A}, A) = \mathbb{P}\left(\overline{A}|A\right) + \mathbb{P}\left(A|\overline{A}\right)$$

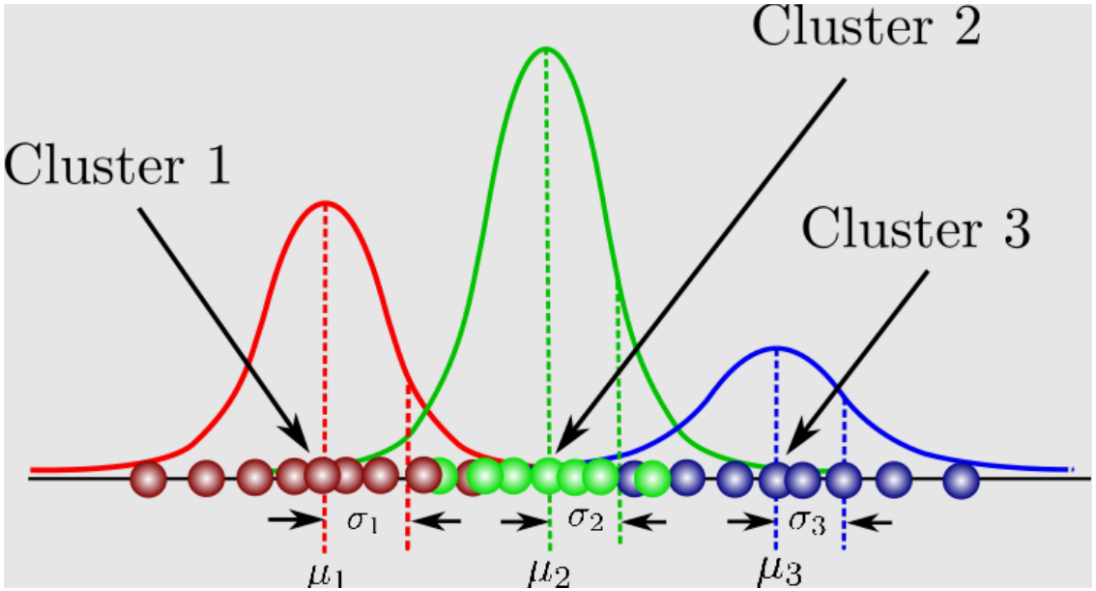
Ejercicio: Probar esa igualdad. (Pista: Calcular primero $\mathbb{P}(X_0 \in A, X_1 \in B)$)

3.Agrupamiento de datos (Clustering)

3.5.Curso del 29 de octubre

3.5.1. Clustering con estimación de densidad

Nos interesamos a la clase de algoritmos que estiman una densidad en una etapa.



El caso popular es pensar que los datos son mezclas de variables gaussianas.

3.5.2. Algoritmo EM:Principio

- El algoritmo EM (por Expectation-Maximisation) está diseñado originalmente para poder encontrar iterativamente un máximo de verosimilitud.
- Consideramos una muestra $X_1, \ldots, X_n \in \mathbb{R}^d$ de densidad común $f(\cdot|\theta_0)$ donde θ_0 es un (vector de) parámetro(s).
- Para encontrar el parámetro θ_0 se define la log-verosimilitud

$$L_x(\theta) = \sum_{i=1}^{n} \log f(X_i|\theta)$$

- En general la maximización de L puede ser muy compleja.

3.5.2. Algoritmo EM:Principio

Ejemplo: Si consideramos variables que son mezclas de 2 gaussianas en dimensión 3.

$$X_i = \lambda_i Y_i + (1 - \lambda_i) Z_i$$

donde

$$\begin{aligned} Y_i &\sim \mathcal{N}(\mu_1, \sigma_1^2) \\ Z_i &\sim \mathcal{N}(\mu_2, \sigma_2^2) \\ \lambda_i &\sim \mathcal{B}(\pi) \quad \text{con } \pi \in (0,1) \end{aligned}$$

y si $\phi_{\mu,\sigma}(x)$ representa la densidad de una variable normal con parámetros (μ, σ^2), tenemos

$$f(x, \theta) = \pi \phi_{\mu_1,\sigma_1}(x) + (1 - \pi)\phi_{\mu_2,\sigma_2}(x)$$

y $\theta = (\pi, \mu_1, \sigma_1, \mu_2, \sigma_2)$ (9 parámetros reales!).

3.5.2. Algoritmo EM:Principio

Idea: Se inventa una variable (escondida) que auxilia para la maximización.

- Imaginamos $(Z_1, \ldots, Z_n)$ variables desconocidas de las cuales imaginamos que las X_i dependen... (Ideas de cadenas de Markov escondida)
- Calculando la verosimilitud

$$L_{x,z}(\theta) = \sum_{i=1}^{n} \log f(X_i, Z_i|\theta) = \sum_{i=1}^{n} \log f(Z_i|X_i, \theta) + \log f(X_i|\theta)$$
$$= \sum_{i=1}^{n} \log f(Z_i|X_i, \theta) + L_x(\theta)$$

- La diferencia entre las dos log-verosimilitud está contenida en la función $f(z|x, \theta)$ (la distribución de Z dado X y θ)

3.5.2. Algoritmo EM:Principio

- Fijamos el parámetro $\theta^{(c)}$ (como si fuera conocido).
- Entonces tomando la esperanza a través del operador $\mathbb{E}\left[\cdot|X,\theta^{(c)}\right]$ (significa esperanza en Z con respecto a $f(z|x,\theta^{(c)})$) en la igualdad anterior,

$$\begin{aligned}\mathbb{E}\left[L_x(\theta)|X,\theta^{(c)}\right] =& \mathbb{E}\left[L_{x,z}(\theta)|X,\theta^{(c)}\right] \\ & - \mathbb{E}\left[\sum_{i=1}^{n}\log f(Z_i|X_i,\theta)\middle|X,\theta^{(c)}\right]\end{aligned}$$

Que volvemos a escribir

$$L_x(\theta) = Q(\theta,\theta^{(c)}) - H(\theta,\theta^{(c)})$$

donde $Q(\theta,\theta^{(c)}) = \mathbb{E}\left[L_{x,z}(\theta)|X,\theta^{(c)}\right]$ y
$H(\theta,\theta^{(c)}) = \mathbb{E}\left[\sum_{i=1}^{n}\log f(Z_i|X_i,\theta)\middle|X,\theta^{(c)}\right]$.

3.5.3. Algoritmo EM: La magia

- Magia: Solo vamos a considerar $Q(\theta, \theta^{(c)})$ en el algoritmo.

1. Inicialización: $\theta^{(0)}$ se elige al azar, $t = 0$
2. Hasta que el algoritmo converja:
   - 2.1 Etapa E: Evaluación de la esperanza:

$$Q(\theta, \theta^{(t)}) = \mathbb{E}\left[L_{x,z}(\theta)|X, \theta^{(t)}\right]$$

   - 2.2 Etapa M: Maximización:

$$\theta^{(t+1)} = \underset{\theta}{\text{argmax}}\ Q(\theta, \theta^{(t)})$$

Proposición

El algoritmo EM converge a un máximo local de $L_x(\theta)$.

En la practica se corre muchas veces el algoritmo para acercarse del máximo global.

3.5.3. Algoritmo EM: La magia

Prueba: Haciendo la misma descomposición que antes para $\theta = \theta^{(t)}$, tenemos

$$L_x(\theta^{(t)}) = Q(\theta^{(t)}, \theta^{(t)}) - H(\theta^{(t)}, \theta^{(t)})$$

Entonces,

$$\begin{aligned} L_x(\theta) - L_x(\theta^{(t)}) = Q(\theta, \theta^{(t)}) - Q(\theta^{(t)}, \theta^{(t)}) \\ + \Big(H(\theta^{(t)}, \theta^{(t)}) - H(\theta, \theta^{(t)}) \Big) \end{aligned}$$

Pero $H(\theta^{(t)}, \theta^{(t)}) \geq H(\theta, \theta^{(t)})$ (desigualdad de Gibbs) en efecto, si denotamos $p(z) = f(z|x, \theta^{(t)})$ y $q(z) = f(z|x, \theta)$, tenemos

$$H(\theta^{(t)}, \theta^{(t)}) - H(\theta, \theta^{(t)}) = \sum_{i=1}^{n} \int \log(p(z_i))p(z_i) - \log(q(z_i))p(z_i)dz_i$$

3.5.3. Algoritmo EM: La magia

Para cada i,

$$\begin{aligned}\int \log(p(z_i))p(z_i) - \log(q(z_i))p(z_i)dz_i &= -\int \log\frac{q(z_i)}{p(z_i)}p(z_i)dz_i \\ &\geq -\int \left(\frac{q(z_i)}{p(z_i)} - 1\right)p(z_i)dz_i \\ &= \int p(z_i)dz_i - \int q(z_i)dz_i \\ &= 1 - 1 = 0\end{aligned}$$

Finalmente tenemos que

$$L_x(\theta) - L_x(\theta^{(t)}) \geq Q(\theta, \theta^{(t)}) - Q(\theta^{(t)}, \theta^{(t)})$$

Entonces $\theta^{(t)}$ converge a un máximo local de L_x.

3.5.4. EM para mezclas

Retomamos el modelo de mezclas.

- Supongamos que los datos $X_1, \ldots, X_n$ son mezclas de k densidades $g(\cdot|\theta_1), \ldots, g(\cdot|\theta_k)$. Con probabilidad π_j una variable X_i proviene de un grupo G_j (que corresponde a tener la densidad $g(\cdot|\theta_j)$.)
- Entonces

$$f(x|\Phi) = \sum_{i=1}^{k} \pi_i g(x|\theta_i)$$

  donde el parámetro $\Phi = (\pi_1, \ldots, \pi_k, \theta_1, \ldots, \theta_k)$.
- Se "inventa" la variable $Z_i = (z_{i,1}, \ldots, z_{i,k})$ tal que $z_{i,j} = \mathbb{1}_{X_i \in G_j}$
- Entonces,

$$L_{x,z}(\Phi) = \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{k} z_{i,j} \log(\pi_j g(X_i|\theta_j))$$

3.5.4. EM para mezclas

- Como consecuencia, tenemos

$$Q(\Phi, \Phi^{(c)}) = \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{k} \mathbb{E}\left[z_{i,j} | X_i, \Phi^{(c)}\right] \log(\pi_j g(X_i|\theta_j))$$

y solo se tiene que estimar

$$t_{i,j} = \mathbb{E}\left[z_{i,j} | X_i, \Phi^{(c)}\right].$$

Esa cantidad se estima con un estimador de Bayes

$$\hat{t}_{i,j} = \frac{\pi_j^{(c)} g(X_i|\theta_j^{(c)})}{\sum_{\ell=1}^{k} \pi_\ell^{(c)} g(X_i|\theta_\ell^{(c)})}$$

3.5.4. EM para mezclas

El algoritmo se puede escribir explicitamente

1. Inicialización: $\Phi^{(0)}$ se elige al azar, $t = 0$
2. Hasta que el algoritmo converja:
   2.1 Etapa E: Evaluación de la esperanza:

$$\hat{Q}(\Phi, \Phi^{(t)}) \qquad \text{con} \quad \hat{t}_{i,j}$$

   2.2 Etapa M: Maximización:

$$\Phi^{(t+1)} = \underset{\Phi}{\text{argmax}}\ \hat{Q}(\Phi, \Phi^{(t)})$$

3. Output: El dato i se clasifica en el grupo j tal que

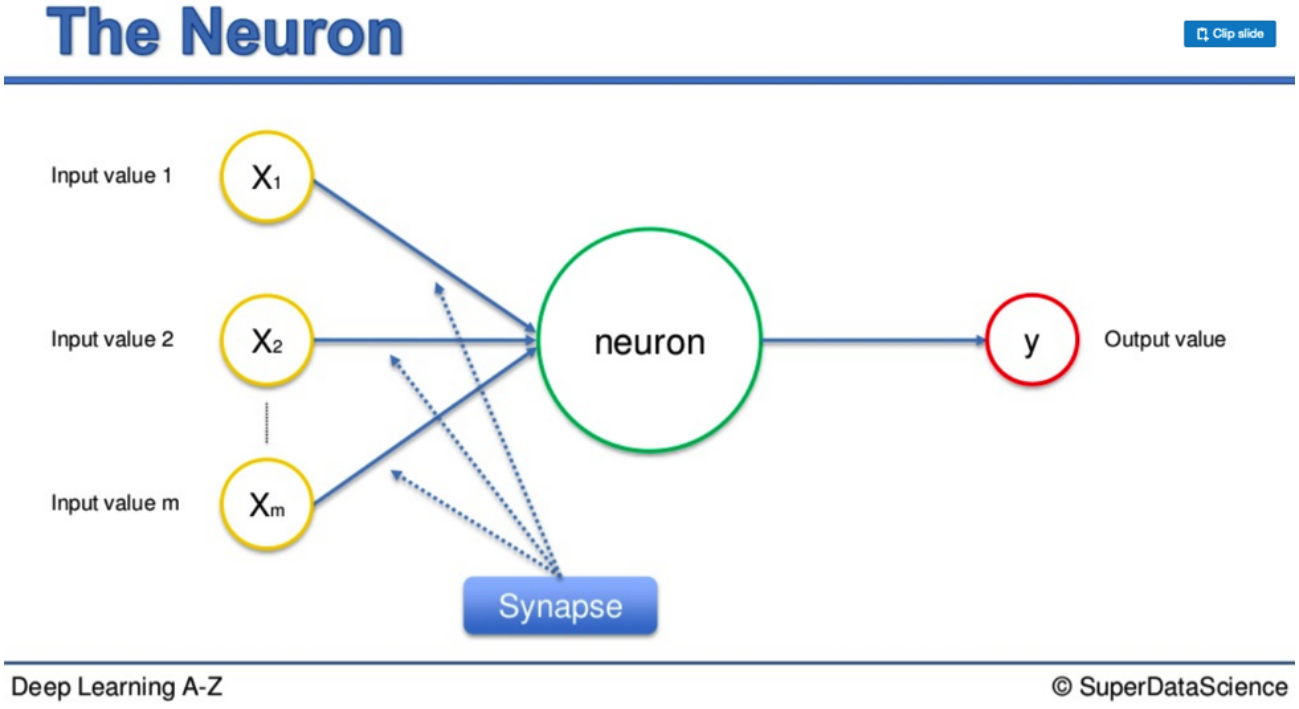
$$j = \underset{j}{\text{argmax}}\, \hat{t}_{i,j}$$

4. Nociones de redes neuronales

4.1. Curso del 31 de octubre

4.1.1. El neurona

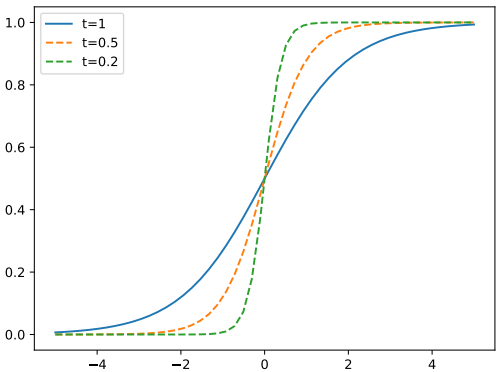
Es un objecto de programación que recibe una lista de valores $x_1, \ldots, x_n$ y contesta un valor de salida.



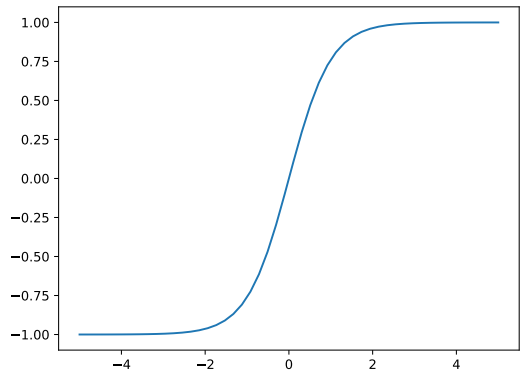
En aprendizaje maquina la salida tiene la forma $y = \sigma(w^T x + v)$, donde σ es una función llamada de **activación**.

4.1.1. El neurona

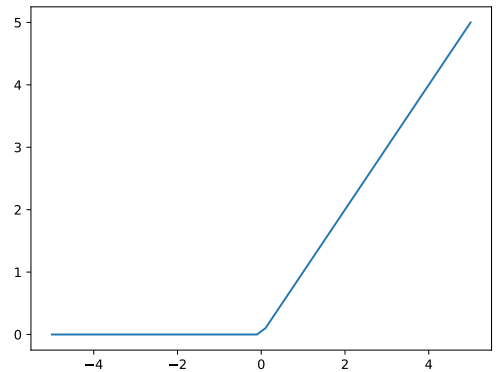
Algunas funciones de activación famosas.



(a) Sigmoid : $\sigma(x) = (1 + \exp(-x/t))^{-1}$



(b) Tanh: $\sigma(x) = \tanh(x)$



(c) ReLU : $\sigma(x) = \max(0, x)$

La función ReLU (Rectifier Linear Unit) es la función de activación la mas popular en aprendizaje maquina aplicado.

4.1.2. Perceptron (Rosenblatt - 1958)

El perceptron es un algoritmo (viejo!) que permite hacer una tarea de estimación de w y v cuando

$$\sigma(x) = \begin{cases} -1 & x < 0 \\ 1 & x \geq 0 \end{cases}$$

y $f(x) = \sigma(w^T x + v)$ para $w \in \mathbb{R}^d$ y $v \in \mathbb{R}$.

Los datos son variables $(X_1, Y_1), \ldots, (X_n, Y_n) \in \mathbb{R}^d \times \{-1, 1\}$.

La idea es encontrar w y v tal que para cada i, $Y_i = f(X_i)$.

4.1.2. Perceptron (Rosenblatt - 1958)

Input: La muestra $((X_i, Y_i))_{i \leq n}$.

1. Inicialización : (w, v) al azar.
2. Mientras Mis executar:
   Si existe i tq $f(x_i) \neq Y_i$ **entonces**
   $w = w + Y_i X_i$
   $v = v + Y_i$
   Si no,
   Mis = False

Output: w, v.

- Si existe un hiperplano separador, el algoritmo encuentra la solución en tiempo finito.
- Si no, el algoritmo no termina!
- Con las herramientas de este curso, podemos hacer cosas mucho mejor!

4.1.2. Perceptron (Rosenblatt - 1958)

La teoría dice que si iniciamos con (w_0, v_0), el algoritmo tomará a lo más

$$(\|w_*\|^2 + v_*^2)\frac{\|w_* - w_0\|^2 + (v_* - v_0)^2 + 2\max_i \|X_i\|^2 + 2}{L^2}$$

donde

$$L = \min_i |w_*^T X_i + v_*|$$

Problema: Para funciones tan sencillas como XOR, el algoritmo no termina!

4.1.3. Shallow Neural Network

La función es de la forma

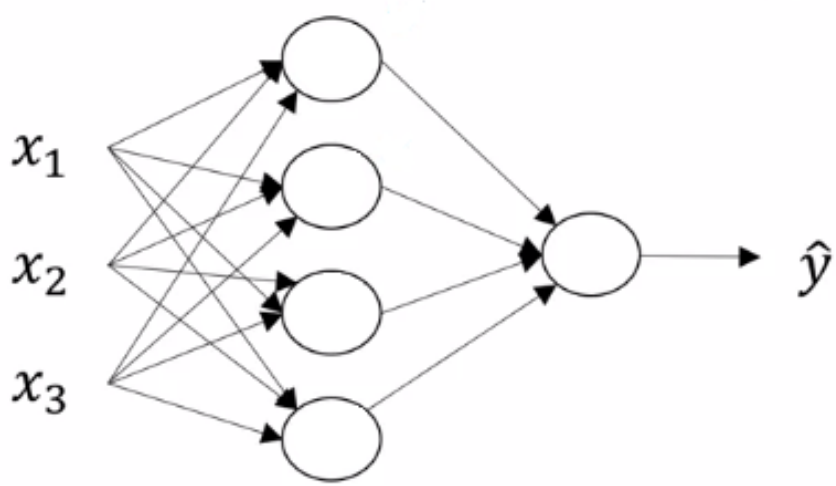
$$f(x) = \sum_{k=1}^{K} \alpha_k \sigma(w_k^T x + v_k)$$

Es una combinación lineal de neuronas (o perceptrons). Entonces la clase de funciones que podemos construir son

$$\mathcal{F}_{K,\sigma} = \left\{ x \mapsto \sum_{k=1}^{K} \alpha_k \sigma(w_k^T x + v_k) : w_k \in \mathbb{R}^d, v_k, \alpha_k \in \mathbb{R} \right\}$$

4.1.3. Shallow Neural Network

- El número de terminos en la suma $=$ número de neuronas.
- Vocubulario:
  - w_k : inner weights
  - v_k : inner biases
  - α_k : outer weights
- La función de activación σ y el número de neuronas K son fijos y conocidos.
- Se tiene que estimar los w_k, v_k, α_k.



4.1.4. Architectura general (multicapas)

Arquitectura Red Neuronal (L, k):

- Un entero L que denota el número de capas escondidas (hidden layers).
- Un vector $k = (k_1, \ldots, k_L) \in \mathbb{N}^L$.

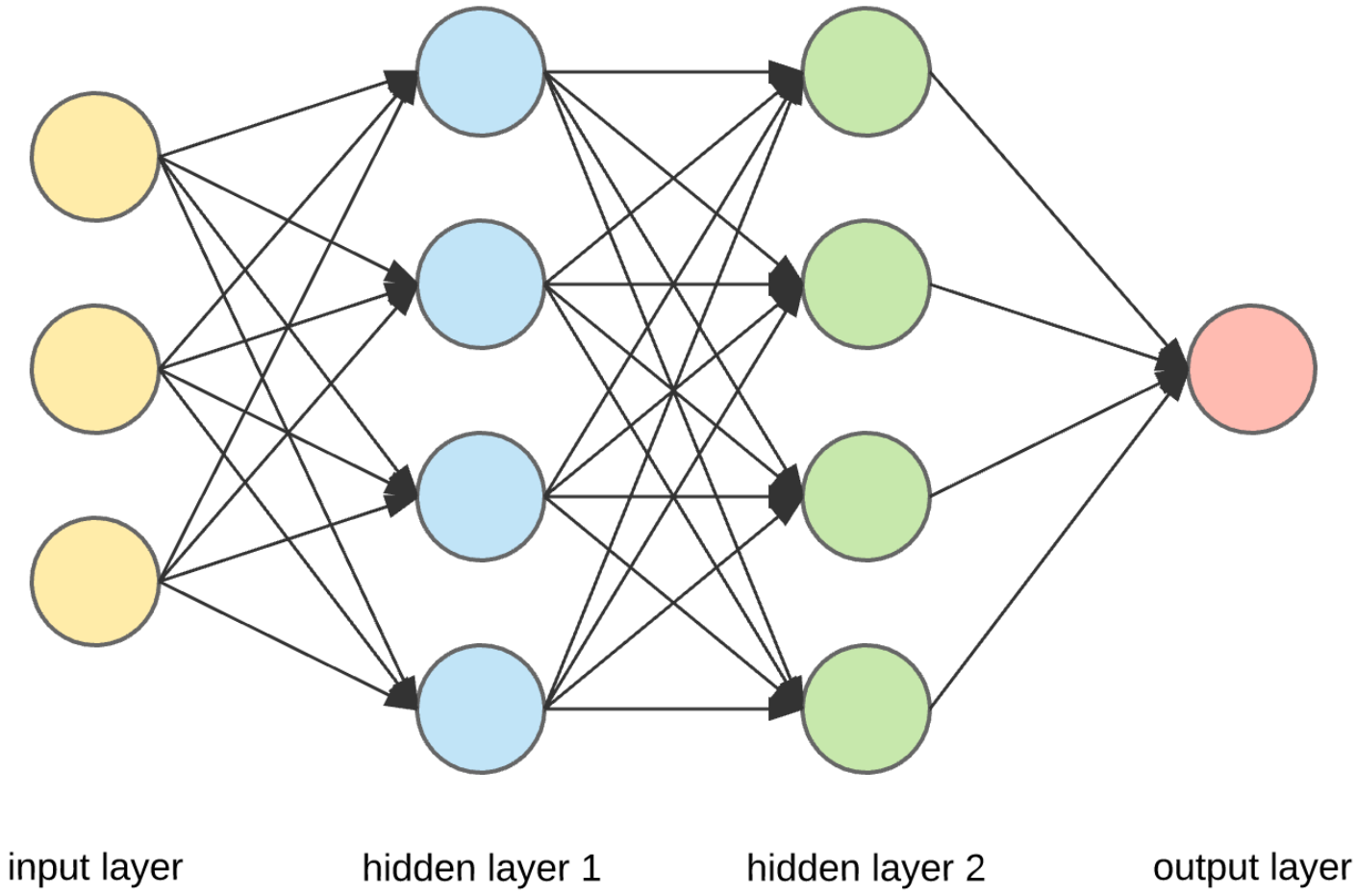
Red Neuronal con Arquitectura de Red Neuronal (L, k):

$$f : x \mapsto W_{L+1}\sigma_{v_L} W_L \sigma_{v_{L-1}} \ldots W_2 \sigma_{v_1} W_1 x$$

Parámetros de la Red Neuronal:

- Matrices W_i de tamaño $k_i \times k_{i-1}$. (Sup: $k_0 = d$, $k_{L+1} = 1$)
- Sesgos $v_i \in \mathbb{R}^{k_i}$.

4.1.4. Architectura general (multicapas)



4.1.4. Architectura general (multicapas)

- Para distinguir con otras estructuras, esas redes neuronales se llaman **Multilayer Feedforward Neural Networks**.
- La arquitectura está **dada**.

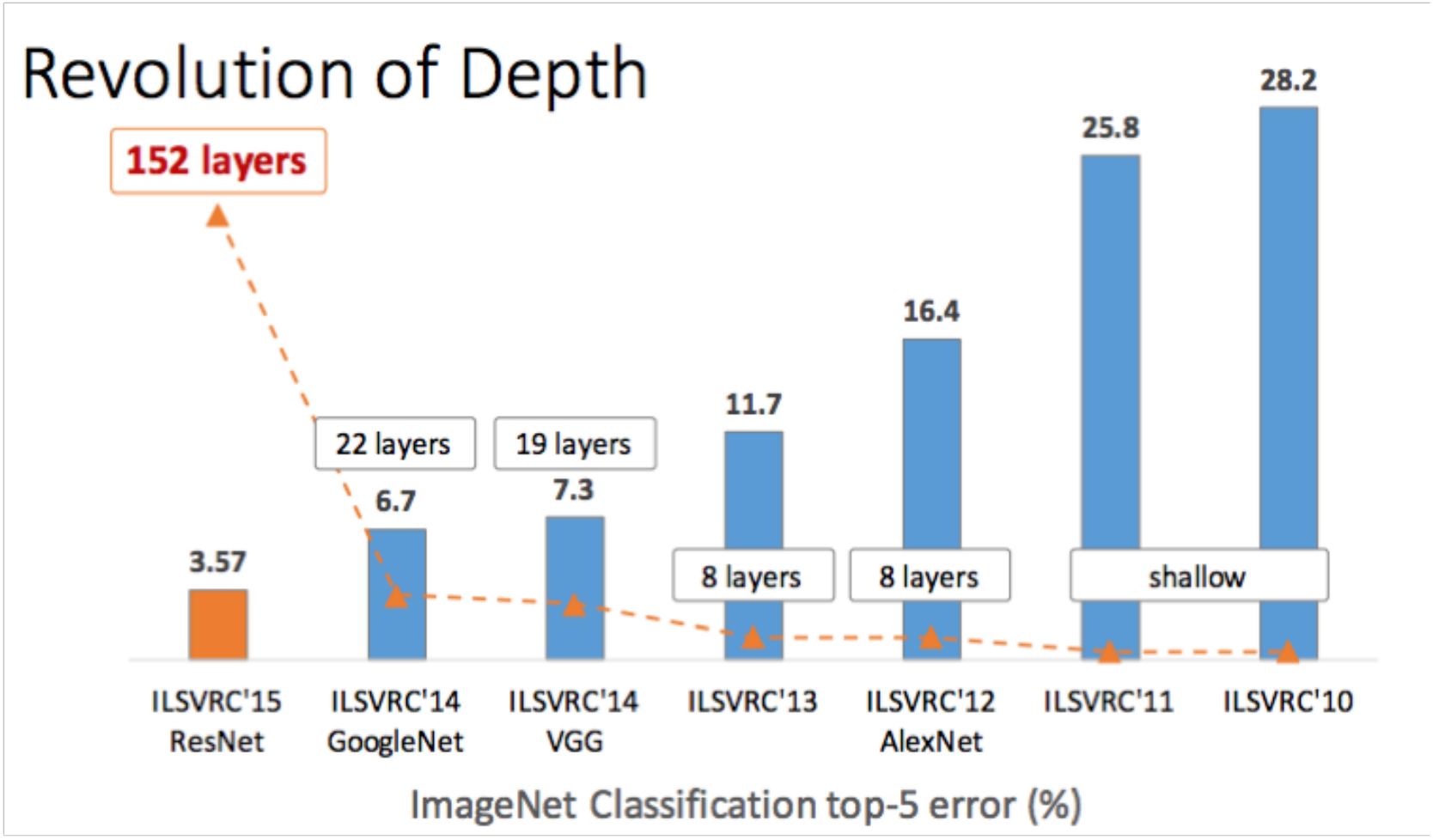
Casos particulares:

- $L = 1$, **Shallow neural network** (poco profundos, llanos).
- $L \geq 2$, **Deep neural network**.
- Si un parámetro $s \in \mathbb{N}$ acota el número de pesos en la red entonces se habla de **Sparse neural networks**.
- Sin restricción sobre la conectividad, se llaman **Fully connected neural networks.**

Otras estructuras populares:

- **Convolutional neural networks**
- **Transformers**, **Autoencoders**

4.1.4. Architectura general (multicapas)



4.1.5. Aproximación univariada

Retorno a las Redes Neuronales poco profundas

Las funciones son

$$\mathcal{F}_{K,\sigma} = \left\{ x \mapsto \sum_{k=1}^{K} \alpha_k \sigma(w_k^T x + v_k) : w_k \in \mathbb{R}^d, v_k, \alpha_k \in \mathbb{R} \right\}$$

- Para determinar una función hay que determinar $K(d+2)$ parámetros.
- Los espacios son crecientes en K en el sentido

$$\mathcal{F}_{K,\sigma} \subset \mathcal{F}_{K',\sigma} \qquad \text{cuando } K \leq K'.$$

4.1.5. Aproximación univariada

Hay un resultado importante para la validación de las redes neuronales:

Proposición

Sea $g : [0,1] \to \mathbb{R}$ *una función* ρ*-lipschitz. Entonces, para cualquier* $\epsilon > 0$*, existe una red neuronal* f *poco profunda* ($L = 1$) *tal que* $f \in \mathcal{F}_{K,\sigma}$ *con* $\sigma(x) = \mathbb{1}_{x \geq 0}$ *y* $K = \lceil \rho/\epsilon \rceil$ *tal que*

$$\sup_{x \in [0,1]} |f(x) - g(x)| \leq \epsilon.$$

4.1.5. Aproximación univariada

Prueba:

Podemos discretizar el intervalo $[0,1]$ de manera regular. Sean $K = \lceil \rho/\epsilon \rceil$, $b_i = i\epsilon/\rho$ para $i \in \{0, \ldots, K-1\}$, $a_0 = g(0)$ y $a_i = g(b_i) - g(b_{i-1})$. Definimos la función

$$f(x) = \sum_{i=0}^{K-1} a_i \mathbb{1}_{x \geq b_i}.$$

Es una función "red neuronal". Para $x \in [0,1]$ sea k el indice máximo tal que

$$x \geq b_k$$

y entonces f es constante sobre el intervalo $[b_k, x]$. Entonces,

$$|g(x) - f(x)| \leq |g(x) - g(b_k)| + |g(b_k) - f(b_k)| + |f(b_k) - f(x)|$$

$$\leq \rho|x - b_k| + |g(b_k) - \sum_{i=0}^{k} a_i| \leq \rho\frac{\epsilon}{\rho} = \epsilon$$

4. Nociones de redes neuronales

4.2. Curso del 5 de noviembre

4.2.1. Aproximación universal

De hecho, el resultado es más general. Hay una propiedad de aproximación universal.

Teorema

Las redes neuronales poco profundas definidas con una función de activación $\sigma \in \mathcal{C}_\infty$ tal que σ **no** *es un polinomio tiene la propiedad de aproximación universal:*
Para cada $\epsilon > 0$ y cada función g continua sobre $[0,1]^d$, existe un $K = K(g, \epsilon)$, tal que

$$\inf_{f \in \mathcal{F}_{K,\sigma}} \|f - g\|_\infty \leq \epsilon.$$

4.2.1. Aproximación universal

Prueba: Tratamos el caso $d = 1$.
Definimos $\Delta_h^1\sigma(t) = (\sigma(t + xh) - \sigma(t))/h$ y de manera recursiva $\Delta_h^k\sigma(t) = \Delta_h^1(\Delta_h^{k-1}\sigma)(t)$.
Por definición de las derivadas de orden k, tenemos, $\forall t \in [0, 1]$,

$$\left|\Delta_h^k\sigma(t) - x^k\sigma^{(k)}(t)\right| \to 0, \quad \text{cuando } |h| \to 0.$$

Como σ no es un polinomio, existe un valor $t_k \in [0, 1]$ tq

$$\sigma^{(k)}(t_k) \neq 0$$

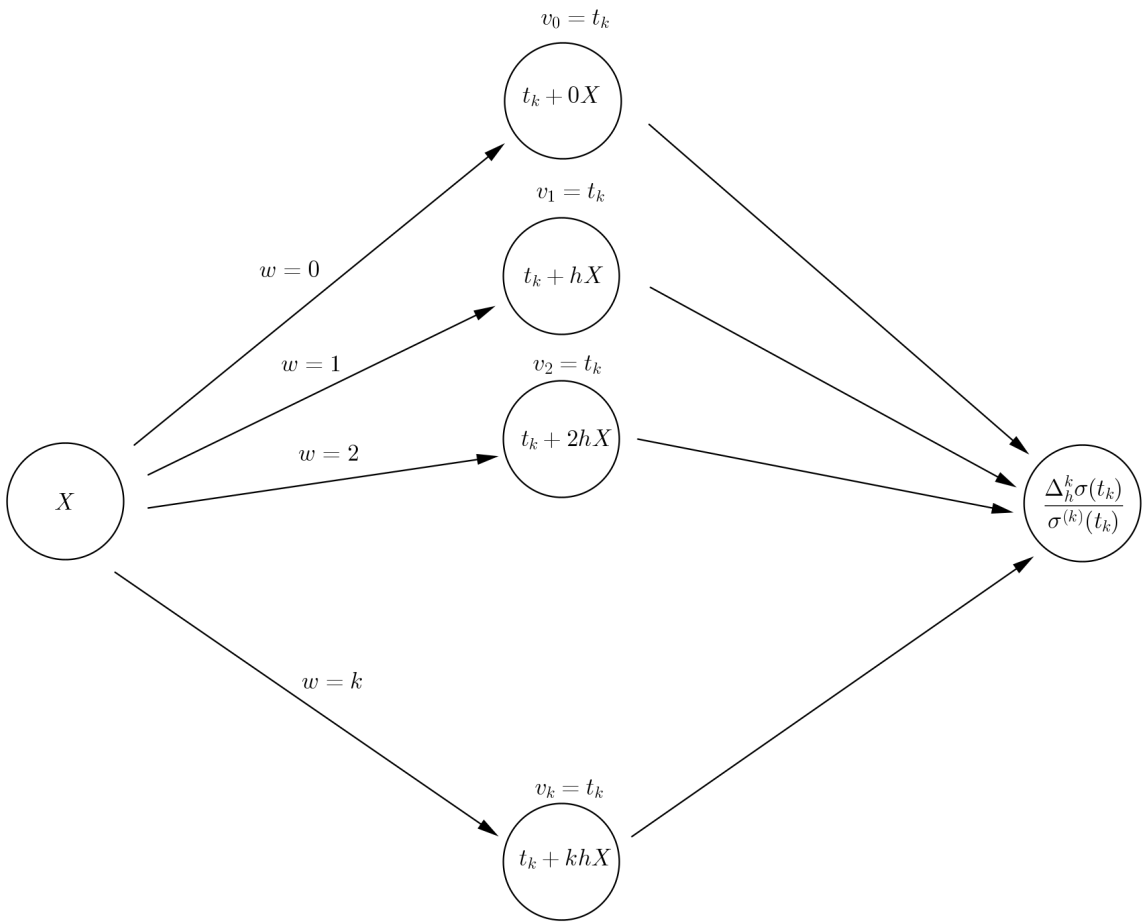
y entonces

$$\left|\frac{\Delta_h^k\sigma(t_k)}{\sigma^{(k)}(t_k)} - x^k\right| \to 0, \quad \text{cuando } |h| \to 0.$$

4.2.1. Aproximación universal

Pero, como función de x la función $\Delta_h^k \sigma(t_k)$ es una combinación lineal de los $\sigma(t), \sigma(t+hx), \sigma(t+2hx), \ldots, \sigma(t+khx)$. Entonces, para cualquier h,

$$f_h : x \mapsto \Delta_h^k \sigma(t_k) \in \mathcal{F}_{k+1,\sigma}$$



4.2.1. Aproximación universal

Entonces la función $x \mapsto x^k$ se aproxima por las funciones f_h. La convergencia ocurre uniformemente en x. (Convergencia de funciones continuas en un compacto.)

Por el teorema de aproximación de Weierstrass, sabemos que cualquier función continua f se puede aproximar uniformemente por funciones polinomio

$$P_K(f) \underset{K\to\infty}{\longrightarrow} f$$

Entonces tenemos

$$(P_K(f))_h \underset{h\to 0}{\longrightarrow} P_K(f) \underset{K\to\infty}{\longrightarrow} f$$

y $(P_K(f))_h$ es una función de red neuronal poco profunda con $K+1$ neuronas.

4.2.1. Aproximación universal

Comentarios:

- Vemos porque σ no puede ser un polinomio. En efecto, las combinaciones lineales de polinomios de grado r son polinomios de grado a lo más r.
- Más capas de neuronas ayuda en este caso! Ayuda a generar polinomios de grados crecientes!
- La construcción es explicita en función de las derivadas de las funciones.

4.2.2. Caso multivariado: Prueba

El resultado de la prueba es que

$$\overline{\bigcup_K \mathcal{F}_{K,\sigma}} = \mathcal{C}[0,1]$$

Para el resultado de dimensión general, se usa que la clase de funciones Ridge

$$x \mapsto \sum_{j=1}^{K} f_j(w_j^T x)$$

son densas en la clase de funciones continuas, donde cada $f_j : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ es una función continua. El caso unidimensional de la aproximación da que

$$f_j \approx \sum_{i=1}^{K'} \sigma(a_{ji} \cdot + b_{ji})$$

4.2.2. Caso multivariado: Prueba

Entonces para una función continua $f : [0,1]^d \to \mathbb{R}$,

$$f \approx \sum_{j=1}^{K} f_j(w_j^T \cdot) \approx \sum_{i=1}^{K'} \sum_{j=1}^{K} \sigma(a_{ji} w_j^T \cdot + b_{ji}).$$

La aproximación se hace con una red neuronal poco profunda con $K \times K'$ neuronas.

4.2.3. Un teorema general de aproximación universal

En general hay un teorema importante para la aproximación de funciones:

Teorema

Sea $\mathcal{F}$ una clase de funciones que satisface las condiciones:

1. *Cada función $f \in \mathcal{F}$ es continua.*
2. *Para cada x, $\exists f \in \mathcal{F}$ tal que $f(x) \neq 0$.*
3. *Para cada $x \neq x'$, $\exists f \in \mathcal{F}$ tal que $f(x) \neq f(x')$. (Separación de los puntos)*
4. *$\mathcal{F}$ es una algebra.*

Entonces $\mathcal{F}$ es una clase de aproximación universal.

4.2.3. Un teorema general de aproximación universal

Entonces tenemos fácilmente

Proposición

La clase

$$\mathcal{F}_{\cos,d} = \{x \in \mathbb{R}^d \mapsto \sum_i \alpha_i \cos(w_i^T x)\}$$

es una clase de aproximación universal.

- Entonces una red neuronal poco profunda con $\sigma = \cos$ es una clase de aproximación universal.

4.2.4. Estimación de los pesos

- La estimación de los pesos W_i es el reto mayor para la estimación de las redes neuronales (profundas o poco profundas).
- El problema de estimación es no-lineal (altamente no-lineal para redes profundas).
- Se basa sobre la técnica general de minimización de función de perdida.

$$L(\theta) = \sum_{i=1}^{n} \ell(Y_i, f_\theta(X_i)).$$

- Una manera general de solucionar este problema es el famoso **descenso del gradiente**.
  1. Elegir un parámetro $\theta_0 \in \mathbb{R}^d$ y un taza de aprendizaje $\eta > 0$.
  2. Secuencialmente, mover

$$\theta_{t+1} = \theta_t - \eta \nabla_{\theta_t} L(\theta_t)$$

4.2.4. Estimación de los pesos

- El aprendizaje de una red neuronal require muchos datos y en general es (extremadamente) costoso de calcular

$$\nabla_{\theta_t} L(\theta) = \sum_{i=1}^{n} \nabla_{\theta_t} \ell(Y_i, f_\theta(X_i))$$

- Una alternativa es SGD (Stochastic gradient descent), descenso del gradiente aleatorio. Se elige un dato $(X_{t(i)}, Y_{t(i)})$ al azar y se calcula

$$\theta_{t+1} = \theta_t - \eta \nabla_{\theta_t} \ell(Y_{t(i)}, f_\theta(X_{t(i)}))$$

  donde $t(i)$ es el indice aleatorio del dato seleccionado.
- Es computacionalmente mucho más ligero pero introduce mucho ruido.
- En la practica se utiliza el compromiso:

$$\theta_{t+1} = \theta_t - \eta \sum_{i \in B_t} \nabla_{\theta_t} \ell(Y_i, f_\theta(X_i))$$

  con B_t aleatorio y $|B_t| \ll n$.

4. Nociones de redes neuronales

4.3. Curso del 7 de noviembre

4.3.1. Derivaciones de composiciones de funciones

En las redes neuronales de Feedforward, la estructura de la función respuesta es una composición de muchas funciones sencillas.

Recordamos la formula fundamental para la composición de funciones para $f : F \to G$ y $g : E \to F$,

$$\boxed{d(f \circ g)(x) = df(g(x)) \circ dg}$$

o entras notaciones

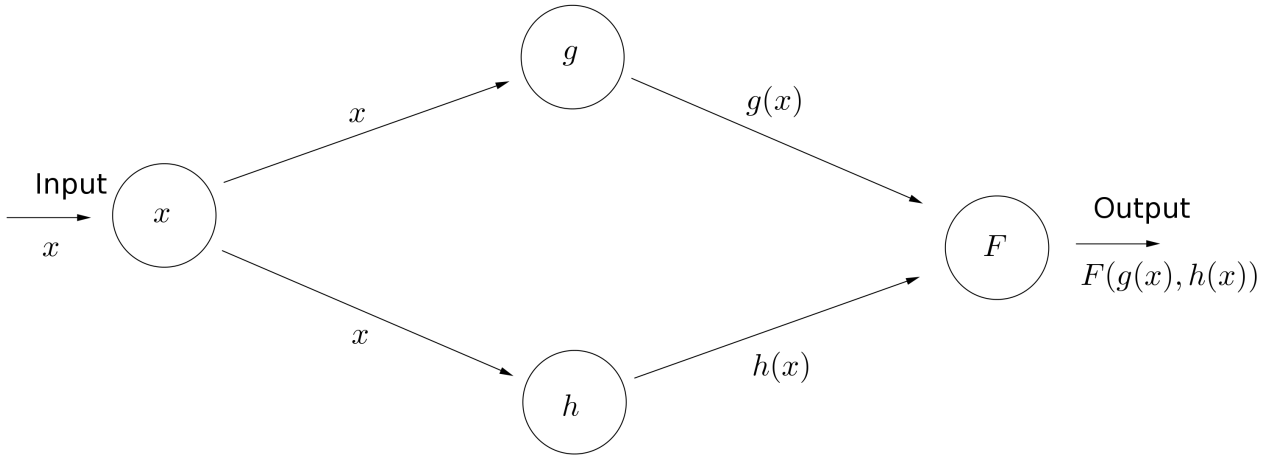
$$\frac{\partial f(g(x))}{\partial x} = \frac{\partial f(g(x))}{\partial g(x)} \frac{\partial g(x)}{\partial x}.$$

La formula fundamental permite también derivar la formula para funciones multivariadas. Para derivar una función de la forma $f(x) = F(g(x), h(x))$ seguimos la formula

$$\frac{\partial f(x)}{\partial x} = \frac{\partial F(g(x), h(x))}{\partial g(x)} \frac{\partial g(x)}{\partial x} + \frac{\partial F(g(x), h(x))}{\partial h(x)} \frac{\partial h(x)}{\partial x}$$

4.3.1. Derivaciones de composiciones de funciones

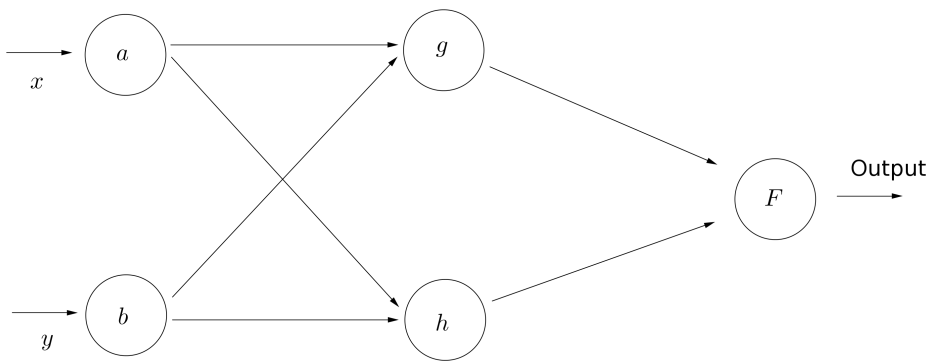
El ultimo ejemplo se puede representar por el grafo siguiente:



Un grafo que corresponde a unas composiciones de funciones permite conocer la formula de derivación!

Ejercicio Derivar el output (en función de cada variable de input) del grafo siguiente donde

$a(u) = u, b(u) = u, g(u, v) = u^2+v, h(u, v) = u-v, F(u, v) = u/v$



4.3.1. Derivaciones de composiciones de funciones

En general podemos considerar un grafo orientado (sin ciclos) y generalizar la idea.

Lema

Sea $G = (V, E)$ un grafo orientado sin ciclos. El nudo $i \in V$ contiene la variable $y(i)$. Consideramos la derivada parcial en la arista orientada (i, j) dada por $z(i, j) = \frac{\partial y(j)}{\partial y(i)}$. Denotamos $\mathcal{P}$ el conjunto de caminos (orientados) saliendo de un nudo x y terminando en el output o. Entonces,

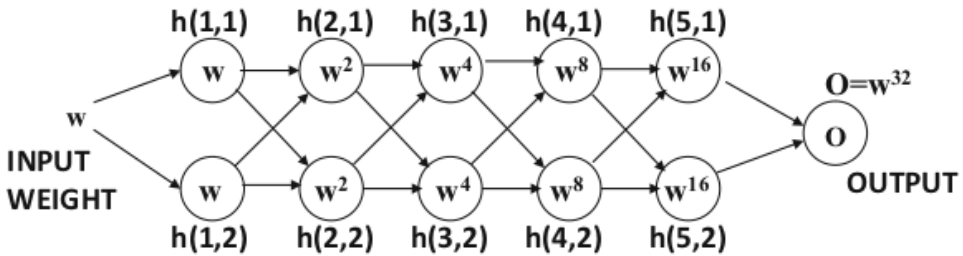
$$\frac{\partial o}{\partial x} = \sum_{P \in \mathcal{P}} \prod_{(i,j) \in P} z(i, j)$$

4.3.2. Programación dinámica

Un algoritmo posible es

1. Calcular el valor de $y(i)$ en todo los nudos del grafo.
2. Calcular el valor de $z(i,j)$ para todas las aristas del grafo.
3. Para cada camino de $\mathcal{P}$, calculamos el producto de los $z(i,j)$ correspondientes.
4. Calcular la suma de ellos.

Hay un problema algoritmico grande! En general el número de caminos que tendremos en un grafo crece de manera exponencial!
Ejercicio: Calcular con la formula la derivada $\frac{\partial O}{\partial w}$ de



Usamos ideas de programación dinámica

4.3.2. Programación dinámica

Consideramos un grafo $G = (V, E)$ con el valor $z(i, j)$ ligado a cada arista (i, j) orientada. El objectivo es calcular de manera eficiente la cantidad

$$S(x, o) = \sum_{P \in \mathcal{P}} \prod_{(i,j) \in P} z(i, j)$$

Hay una manera recursiva de calcular $S(i, o)$ para $i \in V$. En efecto, tenemos

$$S(i, o) = \sum_{j:(i,j) \in E} S(j, o) z(i, j)$$

Ejercicio: Probar la formula.

Da el nombre de backpropagation

4.3.3. Calculo de la backpropagation

El objectivo será de calcular el gradiente de una función de perdida

$$R : w \mapsto \sum_{i=1}^{n} L(Y_i, f_w(X_i))$$

Entonces,

$$\nabla_w R = \sum_{i=1}^{n} \frac{\partial L}{\partial f_w(X_i)} \nabla_w f_w(X_i)$$

Una red neuronal Feedforward es tal que los pesos w se encuentran en las aristas del grafo. Consideramos un camino $h_1, \ldots, h_k, o$ entre neuronas escondidas seguido por el output o. El peso $w_{(h_r, h_{r+1})}$ corresponde al pesos de la arista entre h_r y h_{r+1}. En fin,

$$\frac{\partial R}{\partial w_{(h_{r-1}, h_r)}} = \sum_{i=1}^{n} \frac{\partial L}{\partial f_w(X_i)} \frac{\partial f_w(X_i)}{\partial h_r} \frac{\partial h_r}{\partial w_{(h_{r-1}, h_r)}}$$

4.3.3. Calculo de la backpropagation

El termino

$$\frac{\partial f_w(X_i)}{\partial h_r} = \sum_{[h_r,\ldots,h_k,o]\in\mathcal{P}} \frac{\partial f_w(X_i)}{\partial h_k} \prod_{i=r}^{k-1} \frac{\partial h_{i+1}}{\partial h_i}$$

se calcula por backpropagation! Entonces toma la forma recursiva

$$\boxed{S(h_r, o) = \sum_{h:(h_r,h)\in E} \frac{\partial h}{\partial h_r} S(h, o)}$$

Solo nos falta saber calcular las derivadas $\frac{\partial h}{\partial h_r}$:

$$\boxed{\frac{\partial h}{\partial h_r} = \sigma'(a_h) w_{h_r,h}}$$

donde a_h es el valor dentro del neurona h antes de calcular la función de activación (la combinación lineal).

4.3.3. Calculo de la backpropagation

Entonces podemos escribir el algoritmo de backpropagation:

1. Evaluación de los valores escondidas h de todos los nudos, del output o y de la perdida L por una etapa forward.
2. Inicialización $S(o, o) = \frac{\partial L}{\partial o}$.
3. Calcular $S(h, o)$ para todos los nudos con la formula

$$S(h_r, o) = \sum_{h:(h_r,h)\in E} \sigma'(a_h) w_{h_r,h} S(h, o)$$

4. Calcular para todos los pesos w_{h_{r-1},h_r}

$$\frac{\partial L}{\partial w_{h_{r-1},h_r}} = S(h_r, o) h_{r-1} \sigma'(a_{h_r})$$

(En particular la derivación con respecto a los sesgos se hace evaluando la ultima ecuación en $h_{r-1} = 1$)

4.3.3. Calculo de la backpropagation

- En la etapa del descenso del gradiente, el calculo se adapta muy facilmente. Podemos ver la perdida como

$$L = \sum_{i \in B} L_i$$

Tenemos que sumar las contribuciones de cada punto (X_i, Y_i).

- En la mayoría de los algorítmos modernos de redes neuronas, la salida es multi-dimensional. Es un vector

$$o = (o_1, \ldots, o_m)$$

De nuevo, la contribución (al grafiente) de cada output se suma. En efecto, en la regla de cadena, tendremos

$$\frac{\partial L}{\partial w} = \sum_{i=1}^{m} \frac{\partial L}{\partial o_i} \frac{\partial o_i}{\partial w}$$

4.3.3. Calculo de la backpropagation

Caso Softmax:

La red neuronal tiene outputs dados por

$$o_i = \frac{\exp(v_i)}{\sum_j \exp(v_j)}$$

En general la etapa de Softmax solo se aplica en la última capa y en general la perdida elegida para evaluar la perdida es

$$L = -\sum_{i=1}^{k} y_i \log(o_i)$$

donde las $y_i \in \{0, 1\}$ corresponden a una información de clase : $y_i = 1 \Leftrightarrow x \in \mathcal{C}_i$.

4.3.3. Calculo de la backpropagation

A priori, tenemos que calcular las derivadas $\frac{\partial L}{\partial o_i}$ y $\frac{\partial o_i}{\partial v_j}$. De hecho los calculos son mucho más sencillos si uno usa que

$$\frac{\partial L}{\partial v_i} = \sum_{j=1}^{k} \frac{\partial L}{\partial o_j} \frac{\partial o_j}{\partial v_i} = o_i - y_i$$

Ejercicio: Mostrar esta formula. (Pista: Expresar las derivadas $\frac{\partial o_j}{\partial v_i}$ solo en función de o_i y o_j.)

Ejercicio: Qué será la formula de backpropagation para la función de activación sigmoid ($\sigma(x) = 1/(1 + \exp(-x))$)?