

EL CLASIFICADOR BAYESIANO ÓPTIMO II

ALAN REYES-FIGUEROA
APRENDIZAJE ESTADÍSTICO

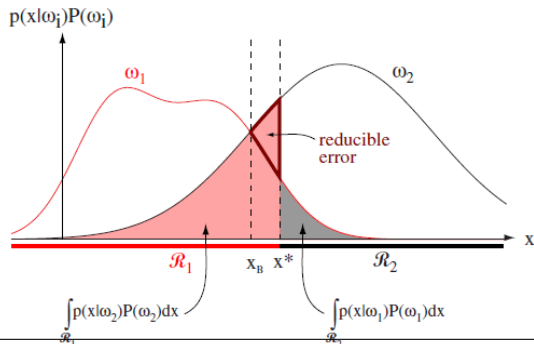
(AULA 21) 24.ABRIL.2024

Clasificador bayesiano óptimo

Teorema (Optimalidad del clasificador Bayesiano)

Dada la información $(X, Y) \sim \mathbb{P}_{X,Y}$, sea $\hat{y}$ la asignación del clasificador Bayesiano óptimo, y sea $\tilde{y}$ cualquier otro clasificador. Entonces

$$\mathbb{P}_{\hat{y}}(\text{error} \mid \mathbf{x}) \leq \mathbb{P}_{\tilde{y}}(\text{error} \mid \mathbf{x}), \quad \forall \tilde{y} : S \rightarrow \Omega.$$



Clasificador bayesiano óptimo

Si denotamos con L^* el error (promedio) del clasificador Bayesiano óptimo, y $\tilde{y}_n$ es un clasificador basado en un conjunto finito de datos $\{(\mathbf{x}_i, y_i)\}_{i=1}^n$, con $L(\tilde{y}_n) = \mathbb{E}(L(Y; \tilde{y}_n(X)))$, se pueden demostrar las siguientes:

Propiedad

Si $\tilde{y}_n$ es el clasificador 1-NN, entonces

$$L^* \leq \lim_{n \rightarrow \infty} \mathbb{E} L(\tilde{y}_n) \leq 2L^*.$$

En general, Si $\tilde{y}_n$ es el clasificador 1-NN para $M > 1$ clases, entonces

$$L^* \leq \lim_{n \rightarrow \infty} \mathbb{E} L(\tilde{y}_n) \leq \frac{M}{M-1} L^*.$$

Clasificador bayesiano óptimo

Propiedad

Si $n, k \rightarrow \infty$ son tales que $\frac{k}{n} \rightarrow 0$ y $\tilde{y}_n$ es el clasificador k -NN, entonces

$$\lim_{n, k \rightarrow \infty} \mathbb{E} L(\tilde{y}_n) = L^*.$$

- Las demostraciones de las propiedades anteriores se pueden ver en L. Devroye, L. Györfi, G. Lugosi (1996). *A Probabilistic Theory of Pattern Recognition*.

Clasificador bayesiano óptimo

Por otro lado: D.H. Wolpert, W.G. Macready (1997), *No Free Lunch Theorems for Optimization*, IEEE Transactions on Evolutionary Computation 1, 67.

Teorema (No Free Lunch)

Para n finito, sin ningún supuesto adicional sobre $\mathbb{P}$, ningún clasificador es mejor que otro.

Las prueba del *No Free Lunch Theorem* se pueden ver en

- S. Shalev-Shwartz, S. Ben-David (2014). *Understanding Machine Learning: From Theory to Algorithms*. Cambridge U. Press.
- <https://mlu.red/muse/52449366310.html>

Clasificador bayesiano ingenuo

Recordemos que en el clasificador Bayesiano óptimo

$$\hat{y}(\mathbf{x}) = \mathbf{1}\left(\frac{\mathbb{P}(\mathbf{x} \mid Y = 1)}{\mathbb{P}(\mathbf{x} \mid Y = 0)} > \theta_\lambda\right), \quad \text{donde } \theta_\lambda = \frac{(\lambda_{10} - \lambda_{00})\mathbb{P}(Y = 0)}{(\lambda_{01} - \lambda_{11})\mathbb{P}(Y = 1)}.$$

¿Cómo definir (estimar) $\mathbb{P}(X = \mathbf{x} \mid Y = y)$ en general?

- No evidente si X es de alta dimensión.
- El **clasificador Bayesiano ingenuo** (*Naive Bayes*) se basa en la simplificación (supuesto) que las componentes de $X = (X_1, \dots, X_d) \mid Y$ son v.a. independientes:

$$\mathbb{P}(X = \mathbf{x} \mid Y = j) = \prod_{i=1}^d \mathbb{P}(X_i = x_i \mid Y = j).$$

- Llevamos 1 problema d -dimensional, a d problemas 1-dimensionales.

Ejemplo

En la práctica, el clasificador *Naive Bayes* es uno de los más utilizados (talvez no es el mejor, pero el clasificador más simple de construir).

Se basa en el hecho de estimar la distribución conjunta de (X, Y) , a partir de la distribución conjunta empírica (la tabla de datos).

Ejemplo 3: Considera la distribución conjunta de (X, Y) dada por

	$X = 0$	$X = 1$	$X = 2$
$Y = 0$	0.15	0.1	0.3
$Y = 1$	0.15	0.2	0.1

Ejemplo

	$X = 0$	$X = 1$	$X = 2$
$Y = 0$	0.15	0.1	0.3
$Y = 1$	0.15	0.2	0.1

Calcular el clasificador bayesiano óptimo si

- a) la función de costo es la indicadora (falso positivo tiene el mismo costo 1 que un falso negativo).
- b) si predecir mal un 1 (falso negativo) cuesta el doble que predecir mal un 0 (falso positivo).

Para ambos casos, calcula la probabilidad de cometer un error.

Ejemplo

Solución:

Vamos a tomar las probabilidades a priori de la tabla de datos: $\mathbb{P}(Y = 0) = 0.55$, $\mathbb{P}(Y = 1) = 0.45$. Además los costos son $\lambda_{ij} = 1 - \delta_{ij}$.

- $X = 0$:

$$\left. \begin{aligned} \lambda \mathbb{P}(Y = 0 \mid X = 0) &= \lambda \frac{\mathbb{P}(X=0|Y=0) \mathbb{P}(Y=0)}{\mathbb{P}(X=0)} = 1 \frac{0.15}{0.55} (0.55) = 0.15 \\ \lambda \mathbb{P}(Y = 1 \mid X = 0) &= \lambda \frac{\mathbb{P}(X=0|Y=1) \mathbb{P}(Y=1)}{\mathbb{P}(X=0)} = 1 \frac{0.15}{0.45} (0.45) = 0.15 \end{aligned} \right\} \Rightarrow \boxed{\hat{y}(0) = 0}.$$

- $X = 1$:

$$\left. \begin{aligned} \lambda \mathbb{P}(Y = 0 \mid X = 1) &= \lambda \frac{\mathbb{P}(X=1|Y=0) \mathbb{P}(Y=0)}{\mathbb{P}(X=1)} = 1 \frac{0.1}{0.55} (0.55) = 0.1 \\ \lambda \mathbb{P}(Y = 1 \mid X = 1) &= \lambda \frac{\mathbb{P}(X=1|Y=1) \mathbb{P}(Y=1)}{\mathbb{P}(X=1)} = 1 \frac{0.2}{0.45} (0.45) = 0.2 \end{aligned} \right\} \Rightarrow \boxed{\hat{y}(1) = 1}.$$

Ejemplo

- $X = 2$:

$$\left. \begin{aligned} \lambda \mathbb{P}(Y = 0 \mid X = 2) &= \lambda \frac{\mathbb{P}(X=2|Y=0) \mathbb{P}(Y=0)}{\mathbb{P}(X=2)} = 1 \frac{0.3}{0.55} (0.55) = 0.3 \\ \lambda \mathbb{P}(Y = 1 \mid X = 2) &= \lambda \frac{\mathbb{P}(X=2|Y=1) \mathbb{P}(Y=1)}{\mathbb{P}(X=2)} = 1 \frac{0.1}{0.45} (0.45) = 0.1 \end{aligned} \right\} \Rightarrow \boxed{\hat{y}(2) = 0}.$$

$$\text{Portanto, } \hat{y}(x) = \begin{cases} 0, & \text{si } x = 0; \\ 1, & \text{si } x = 1; \\ 0, & \text{si } x = 2. \end{cases}$$

Calculamos el error:

$$\begin{aligned} \text{Error} &= 1 \cdot \mathbb{P}(Y = 1 \mid x = 0) \mathbb{P}(X = 0) + 1 \cdot \mathbb{P}(Y = 0 \mid x = 1) \mathbb{P}(X = 1) + 1 \cdot \mathbb{P}(Y = 0 \mid x = 2) \mathbb{P}(X = 2) \\ &= \frac{0.15}{0.3} (0.3) + \frac{0.1}{0.3} (0.3) + \frac{0.1}{0.4} (0.4) \\ &= 0.15 + 0.1 + 0.1 = \mathbf{0.35} \end{aligned}$$

Ejemplo

Parte (b): Aquí recordemos que $\lambda_{01} = 1$ (falso positivo), $\lambda_{10} = 2$ (falso negativo).

- $X = 0$:

$$\left. \begin{aligned} \lambda \mathbb{P}(Y = 0 \mid X = 0) &= \lambda \frac{\mathbb{P}(X=0 \mid Y=0) \mathbb{P}(Y=0)}{\mathbb{P}(X=0)} = 1 \frac{0.15}{0.55} (0.55) = 0.15 \\ \lambda \mathbb{P}(Y = 1 \mid X = 0) &= \lambda \frac{\mathbb{P}(X=0 \mid Y=1) \mathbb{P}(Y=1)}{\mathbb{P}(X=0)} = 2 \frac{0.15}{0.45} (0.45) = 0.3 \end{aligned} \right\} \Rightarrow \boxed{\hat{y}(0) = 1}.$$

- $X = 1$:

$$\left. \begin{aligned} \lambda \mathbb{P}(Y = 0 \mid X = 1) &= \lambda \frac{\mathbb{P}(X=1 \mid Y=0) \mathbb{P}(Y=0)}{\mathbb{P}(X=1)} = 1 \frac{0.1}{0.55} (0.55) = 0.1 \\ \lambda \mathbb{P}(Y = 1 \mid X = 1) &= \lambda \frac{\mathbb{P}(X=1 \mid Y=1) \mathbb{P}(Y=1)}{\mathbb{P}(X=1)} = 2 \frac{0.2}{0.45} (0.45) = 0.4 \end{aligned} \right\} \Rightarrow \boxed{\hat{y}(1) = 1}.$$

Ejemplo

- $X = 2$:

$$\left. \begin{aligned} \lambda \mathbb{P}(Y = 0 \mid X = 2) &= \lambda \frac{\mathbb{P}(X=2|Y=0) \mathbb{P}(Y=0)}{\mathbb{P}(X=2)} = 1 \frac{0.3}{0.55} (0.55) = 0.3 \\ \lambda \mathbb{P}(Y = 1 \mid X = 2) &= \lambda \frac{\mathbb{P}(X=2|Y=1) \mathbb{P}(Y=1)}{\mathbb{P}(X=2)} = 2 \frac{0.1}{0.45} (0.45) = 0.2 \end{aligned} \right\} \Rightarrow \boxed{\hat{y}(2) = 0}.$$

$$\text{Portanto, } \hat{y}(x) = \begin{cases} 1, & \text{si } x = 0; \\ 1, & \text{si } x = 1; \\ 0, & \text{si } x = 2. \end{cases}$$

Calculamos el error:

$$\begin{aligned} \text{Error} &= 1 \cdot \mathbb{P}(Y = 0 \mid x = 0) \mathbb{P}(X = 0) + 1 \cdot \mathbb{P}(Y = 0 \mid x = 1) \mathbb{P}(X = 1) + 2 \cdot \mathbb{P}(Y = 1 \mid x = 2) \mathbb{P}(X = 2) \\ &= \frac{0.15}{0.3} (0.3) + \frac{0.1}{0.3} (0.3) + 2 \frac{0.1}{0.4} (0.4) \\ &= 0.15 + 0.1 + 0.2 = \mathbf{0.45} \end{aligned}$$

Ejemplo

En el clasificador bayesiano, el caso multiclase se trabaja de forma análoga. Basta determinar aquella clase que tiene mayor probabilidad *a posteriori*:

$$\begin{aligned}\hat{y}(\mathbf{x}) = i &\iff i = \operatorname{argmax}_{1 \leq j \leq k} \lambda_{j\ell} \mathbb{P}(Y = j \mid X = \mathbf{x}) \\ &\iff i = \operatorname{argmax}_{1 \leq j \leq k} \lambda_{j\ell} \frac{\mathbb{P}(X = \mathbf{x} \mid Y = j) \mathbb{P}(Y = j)}{\mathbb{P}(X = \mathbf{x})} \\ &\iff i = \operatorname{argmax}_{1 \leq j \leq k} \lambda_{j\ell} f_j(\mathbf{x}) \pi_j.\end{aligned}$$

Así,

$$\boxed{\hat{y}(\mathbf{x}) = i \iff \lambda_{i\ell} f_i(\mathbf{x}) \pi_i \geq \lambda_{j\ell} f_j(\mathbf{x}) \pi_j, \forall j.}$$

Ejemplo

Construir un clasificador de Bayes ingenuo para

Example No.	Color	Type	Origin	Stolen?
1	Red	Sports	Domestic	Yes
2	Red	Sports	Domestic	No
3	Red	Sports	Domestic	Yes
4	Yellow	Sports	Domestic	No
5	Yellow	Sports	Imported	Yes
6	Yellow	SUV	Imported	No
7	Yellow	SUV	Imported	Yes
8	Yellow	SUV	Domestic	No
9	Red	SUV	Imported	No
10	Red	Sports	Imported	Yes

y calcular la clasificación asociada a un vehículo rojo, SUV, doméstico.

Ejemplo

Queremos hallar la clasificación para un vehículo rojo, SUV, doméstico. Denotamos $X = (X_1, X_2, X_3)$, con $X_1 = \text{color}$, $X_2 = \text{tipo}$, $X_3 = \text{origen}$. Además $\mathbf{x} = (\text{rojo}, \text{SUV}, \text{domestic})$.

Queremos comparar las probabilidades *a posteriori*

$$\mathbb{P}(X = \mathbf{x} \mid Y = 0) \mathbb{P}(y = 0) <> \mathbb{P}(X = \mathbf{x} \mid Y = 1) \mathbb{P}(y = 1).$$

Por independencia (naive Bayes), tenemos

$$\mathbb{P}(X = \mathbf{x} \mid Y = j) = \mathbb{P}(X_1 = \mathbf{x}_1 \mid Y = j) \mathbb{P}(X_2 = \mathbf{x}_2 \mid Y = j) \mathbb{P}(X_3 = \mathbf{x}_3 \mid Y = j)$$

- Y=0:

$$\mathbb{P}(X_1 = \text{rojo} \mid 0) = \frac{2}{5}, \quad \mathbb{P}(X_2 = \text{SUV} \mid 0) = \frac{3}{5}, \quad \mathbb{P}(X_3 = \text{domestic} \mid 0) = \frac{3}{5}.$$

$$\Rightarrow f_0(\mathbf{x}) \mathbb{P}(Y = 0) = \left(\frac{2}{5}\right) \left(\frac{3}{5}\right) \left(\frac{3}{5}\right) \left(\frac{5}{10}\right) = \frac{9}{125}.$$

Ejemplo

- $Y=1$:

$$\mathbb{P}(X_1 = \text{rojo}|1) = \frac{3}{5}, \quad \mathbb{P}(X_2 = \text{SUV}|1) = \frac{1}{5}, \quad \mathbb{P}(X_3 = \text{domestic}|1) = \frac{2}{5}.$$

$$\Rightarrow f_0(\mathbf{x}) \mathbb{P}(Y = 0) = \left(\frac{3}{5}\right)\left(\frac{1}{5}\right)\left(\frac{2}{5}\right)\left(\frac{5}{10}\right) = \frac{3}{125}.$$

Comparando ambas,

$$\left. \begin{array}{l} Y = 0 : \quad f_0(\mathbf{x}) \mathbb{P}(Y = 0) = \frac{9}{125} \\ Y = 1 : \quad f_1(\mathbf{x}) \mathbb{P}(Y = 1) = \frac{3}{125} \end{array} \right\} \Rightarrow \hat{y}(\mathbf{x}) = 0.$$

De ahí que nuestro clasificador Naive Bayes asigna los vehículos de tipo $\mathbf{x} = (\text{rojo, SUV, doméstico})$ a la clase $y = 0$.

Ejemplo

Ejemplo 1: Supongamos que Y es una v.a. discreta con $\mathbb{P}(Y = 0) = \mathbb{P}(Y = 1) = \frac{1}{2}$. Además

$$X \mid Y = 0 \sim \mathcal{N}(2, 1), \quad X \mid Y = 1 \sim \mathcal{N}(5, 1).$$

Construir el clasificador bayesiano óptimo, si

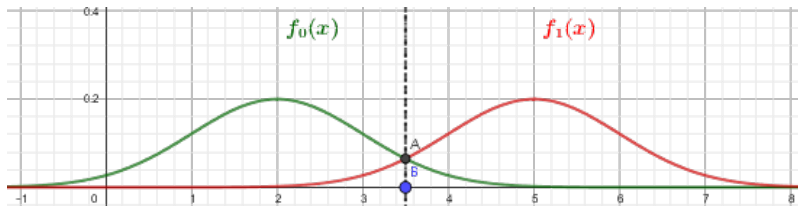
- a) todos los errores con el mismo costo $\lambda = 1$.
- b) $\lambda_{01} = 4, \lambda_{10} = 1$.
- c) $\mathbb{P}(Y = 0) = \frac{3}{5}, \mathbb{P}(Y = 1) = \frac{2}{5}$.

Solución:

Tenemos

$$f_0(\mathbf{x}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(x-2)^2}{2}}, \quad f_1(\mathbf{x}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(x-5)^2}{2}}.$$

Ejemplo



$$\begin{aligned}\lambda_{01}f_0(\mathbf{x})\mathbb{P}(Y=0) &= \lambda_{10}f_1(\mathbf{x})\mathbb{P}(Y=1) \Rightarrow \frac{1}{2}(1)\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{-\frac{(x-2)^2}{2}} = \frac{1}{2}(1)\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{-\frac{(x-5)^2}{2}} \\ \Rightarrow e^{-\frac{(x-2)^2}{2}} &= e^{-\frac{(x-5)^2}{2}} \\ \Rightarrow (x-2)^2 &= (x-5)^2 \\ \Rightarrow x^2 - 4x + 4 &= x^2 - 10x + 25 \\ \Rightarrow 6x = 21 &\Rightarrow x = 3.5.\end{aligned}$$

Ejemplo

Calcular el error:

Denotamos por $R_0 = (-\infty, 3.5)$, $R_1 = (3.5, \infty)$, las regiones de clasificación. Entonces

$$\begin{aligned} \text{Error} &= \int_{R_0} \mathbb{P}(X | Y = 1) + \int_{R_1} \mathbb{P}(X | Y = 0) \\ &= \int_{R_0} f_1(\mathbf{x}) d\mathbf{x} + \int_{R_1} f_0(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = \int_{-\infty}^{3.5} f_1(\mathbf{x}) d\mathbf{x} + \int_{3.5}^{\infty} f_1(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \\ &= \Phi^{-1}\left(\frac{3.5 - 5}{1}\right) + \left[1 - \Phi^{-1}\left(\frac{3.5 - 2}{1}\right)\right] \\ &= 2\Phi^{-1}(-1.5) = 2(0.06681) = 0.13362 \end{aligned}$$

Así, nuestro clasificador de Bayes tiene un acierto del 86.6%.

Ejemplo

b) Como $\lambda_{01} = 1$ y $\lambda_{10} = 4$, aquí la ecuación a resolver resulta:

Solución: la frontera debe estar en $x = 3.5 + \frac{1}{3} \log 4$.

Ejemplo

c) Como ahora $\mathbb{P}(Y = 0) = \frac{3}{5}$ y $\mathbb{P}(Y = 1) = \frac{2}{5}$, la ecuación a resolver resulta:

Solución: la frontera debe estar en $x = 3.5 + \frac{1}{3} \log \frac{3}{2}$.

Ejemplo

Ejemplo 2: Supongamos que Y es una v.a. discreta con

$$\mathbb{P}(Y = 1) = \frac{1}{2}, \quad \mathbb{P}(Y = 2) = \frac{1}{4}, \quad \mathbb{P}(Y = 3) = \frac{1}{4}.$$

Además,

$$X \mid Y = 1 \sim \mathcal{N}(1, 0.5^2), \quad X \mid Y = 2 \sim \mathcal{N}(2, 1), \quad X \mid Y = 3 \sim \mathcal{N}(4, 1).$$

Construir el clasificador bayesiano óptimo, con función de costo simétrica (todos los errores con el mismo costo $\lambda = 1$).

Solución:

Tenemos

$$f_1(\mathbf{x}) = \frac{2}{\sqrt{2\pi}} e^{-2(x-1)^2}, \quad f_2(\mathbf{x}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(x-2)^2}{2}}, \quad f_3(\mathbf{x}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(x-4)^2}{2}}.$$

Ejemplo



• B:

$$\begin{aligned}f_2(\mathbf{x}) \mathbb{P}(Y = 2) &= f_3(\mathbf{x}) \mathbb{P}(Y = 3) \Rightarrow \frac{1}{4} \cdot \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(x-2)^2}{2}} = \frac{1}{4} \cdot \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(x-4)^2}{2}} \\&\Rightarrow e^{-\frac{(x-2)^2}{2}} = e^{-\frac{(x-4)^2}{2}} \Rightarrow (x-2)^2 = (x-4)^2 \\&\Rightarrow x^2 - 4x + 4 = x^2 - 8x + 16 \\&\Rightarrow 4x = 12 \Rightarrow x = 3.\end{aligned}$$

Ejemplo

- A y C:

$$\begin{aligned}f_1(\mathbf{x}) \mathbb{P}(Y = 1) &= f_2(\mathbf{x}) \mathbb{P}(Y = 2) \Rightarrow \frac{1}{2} \cdot \frac{2}{\sqrt{2\pi}} e^{-2(x-1)^2} = \frac{1}{4} \cdot \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(x-2)^2}{2}} \\&\Rightarrow 4e^{-2(x-1)^2} = e^{-\frac{(x-2)^2}{2}} \\&\Rightarrow \log(4) - 2(x-1)^2 = -\frac{(x-2)^2}{2} \\&\Rightarrow 4(x-1)^2 - (x-2)^2 = 2\log(4) \\&\Rightarrow 3x^2 - 4x + 2\log(4) = 0 \\&\Rightarrow x \frac{4 \pm \sqrt{16 + 24\log(4)}}{6} \approx -0.5, 1.83.\end{aligned}$$

$$\text{Entonces } \hat{y}(x) = \begin{cases} 1, & \text{si } x \in (-0.5, 1.83); \\ 2, & \text{si } x \in (-\infty, -0.5) \cup (1.83, 3); \\ 3, & \text{si } x \in (3, \infty). \end{cases}$$

Ejemplo

Calcular el error (ejercicio!).

Denotamos por $R_1 = (-0.5, 1.83)$, $R_2 = (-\infty, -0.5) \cup (1.83, 3)$, $R_3 = (3, \infty)$, las regiones de clasificación. Entonces

$$\begin{aligned} \text{Error} &= \int_{R_1} \mathbb{P}(X \neq 1) + \int_{R_2} \mathbb{P}(X \neq 2) + \int_{R_3} \mathbb{P}(X \neq 3) \\ &= \int_{R_1} (f_2(\mathbf{x}) + f_3(\mathbf{x})) d\mathbf{x} + \int_{R_2} (f_1(\mathbf{x}) + f_3(\mathbf{x})) d\mathbf{x} + \int_{R_3} (f_1(\mathbf{x}) + f_2(\mathbf{x})) d\mathbf{x} \\ &= \int_{R_2 \cup R_3} f_1(\mathbf{x}) d\mathbf{x} + \int_{R_1 \cup R_3} f_2(\mathbf{x}) d\mathbf{x} + \int_{R_1 \cup R_2} f_3(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \\ &= \int_{-\infty}^{-0.5} f_1(\mathbf{x}) d\mathbf{x} + \int_{1.83}^{\infty} f_1(\mathbf{x}) d\mathbf{x} + \int_{-0.5}^{1.83} f_2(\mathbf{x}) d\mathbf{x} + \int_3^{\infty} f_2(\mathbf{x}) d\mathbf{x} + \int_{-\infty}^3 f_3(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \\ &= ? \end{aligned}$$