Métodos basados en mezclas

Alan Reyes-Figueroa

Introducción a la Ciencia de Datos (Aula 20) 18.marzo.2021

Verosimilitud

Consideremos una observación $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^d$ de una variable aleatoria X.

Supongamos que X sigue una distribución f, donde f pertenece a una familia de distribuciones $\{f_\theta\}_{\theta\in\Theta}$, parametrizadas por $\theta \in \Theta \subseteq \mathbb{R}^k$. De todas estas distribuciones, queremos hallar aquella que maximiza la probabilidad de observar un cierto dato $\mathbf{x}$.

Definición

*La función de **verosimilitud** $\mathcal{L}$ mide la bondad de ajuste de un modelo o distribución f_θ con respecto de un conjunto de observaciones. Se define por*

- *Para distribuciones discretas,* $\mathcal{L}(\theta \mid \mathbf{x}) = \mathbb{P}_\theta(X = \mathbf{x})$.
- *Para distribuciones continuas,* $\mathcal{L}(\theta \mid \mathbf{x}) = f_\theta(\mathbf{x})$.

Verosimilitud

Consideremos una muestra $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \ldots, \mathbf{x}_n \in \mathbb{R}^d$ de datos provenientes de una distribución f_θ. Esto es, las $\mathbf{x}_i$ son v.a. i.i.d. con $\mathbf{x}_i \sim \mathbf{x}_1$ y $\mathbf{x}_1 \sim f_\theta$.

Com las $\mathbf{x}_i$ son i.i.d., en este caso, la función de verosimilitud se calcula como

- Para distribuciones discretas

$$\mathcal{L}(\theta \mid \mathbf{x}_1, \ldots, \mathbf{x}_n) = \prod_{i=1}^{n} \mathbb{P}_\theta(X = \mathbf{x}_i).$$

- Para distribuciones continuas

$$\mathcal{L}(\theta \mid \mathbf{x}) = f_{(\theta,\ldots,\theta)}(\mathbf{x}_1, \ldots, \mathbf{x}_n) = \prod_{i=1}^{n} f_\theta(\mathbf{x}_i).$$

Verosimilitud

Recordemos que uno de los métodos más útiles para estimar parámetros de una distribución se debe a Fisher, el **método de máxima verosimilitud**. Este consiste en determinar el **estimador de máxima verosimilitud** como aque que maximiza la función $\mathcal{L}$, esto es

$$\widehat{\theta} = \text{argmax}_{\theta\in\Theta}\, h(\mathbf{x}_1,\ldots,\mathbf{x}_n)\, \mathcal{L}(\theta \mid \mathbf{x}_1,\ldots,\mathbf{x}_n), \tag{1}$$

En general, conviene trabajar con algún múltiplo de la función de verosimilitud

$$\mathcal{L}(\theta \mid \mathbf{x}_1,\ldots,\mathbf{x}_n) = h(\mathbf{x}_1,\ldots,\mathbf{x}_n)\prod_{i=1}^{n}\mathbb{P}_\theta(X = \mathbf{x}_i),$$

donde h es una función conveniente que sólo depende de la muestra observada.

Verosimilitud

En la práctica, usualmente se trabaja con la función de **log-verosimilitud**

$$\ell(\theta) = \log \mathcal{L}(\theta \mid \mathbf{x}_1, \ldots, \mathbf{x}_n).$$

En este caso, el problema (1) se escribe como

$$\widehat{\theta} = \operatorname{argmax}_{\theta \in \Theta} \ell(\theta). \tag{2}$$

Otras funciones útiles que sirven para encontrar el estimador máximo verosímil son la **función de Score**:

$$S(\theta) = \frac{\partial \ell}{\partial \theta}(\theta) = \frac{\partial}{\partial \theta} \log \mathcal{L}(\theta \mid \mathbf{x}_1, \ldots, \mathbf{x}_n).$$

Verosimilitud

y la **función de Información**:

$$I(\theta) = -\frac{\partial^2 \ell}{\partial \theta^2}(\theta).$$

(que son los análogos del criterio de la primera y segunda derivadas para hallar óptimos locales):

- el estimador máximo verosímil $\widehat{\theta}$ debe satisfacer $S(\widehat{\theta}) = \frac{\partial \ell}{\partial \theta}(\widehat{\theta}) = 0$.
- Si se cumple lo anterior, entonces $\widehat{\theta}$ es un
  - máximo local, si $I(\widehat{\theta}) \succ 0$.
  - mínimo local, si $I(\widehat{\theta}) \prec 0$.
  - punto silla, en caso contrario.

Ejemplo: (Estimadores para una distribución normal). Sea $x_1, \ldots, x_n \in \mathbb{R}$ una muestra aleatoria proveniente de una distribución normal $\mathcal{N}(\mu, \sigma^2)$. Denotamos $\mathbf{x} = (x_1, \ldots, x_n) \in \mathbb{R}^n$

Queremos estimar μ (asumimos σ conocida). En este caso, la función de verosimilitud para μ es

$$\mathcal{L}(\mu \mid \mathbf{x}) = \prod_{i=1}^{n} f_\theta(x_i) = \prod_{i=1}^{n} \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma}} \exp\left(-\tfrac{(x_i-\mu)^2}{2\sigma^2}\right) = \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma}}\right)^n \prod_{i=1}^{n} \exp\left(-\tfrac{(x_i-\mu)^2}{2\sigma^2}\right).$$

Tomamos $h(\mathbf{x}) = (\sqrt{2\pi}\sigma)^n$ y nos queda

$$\mathcal{L}(\mu \mid \mathbf{x}) = \prod_{i=1}^{n} \exp\left(-\tfrac{(x_i-\mu)^2}{2\sigma^2}\right) = \exp\left(-\sum_{i=1}^{n} \frac{(x_i-\mu)^2}{2\sigma^2}\right).$$

Verosimilitud

La función de log-verosimilitud es

$$\ell(\mu) = \log \mathcal{L}(\mu \mid \mathbf{x}) = -\sum_{i=1}^{n} \frac{(x_i - \mu)^2}{2\sigma^2}.$$

Luego,

$$S(\mu) = \frac{\partial \ell}{\partial \mu} = \sum_{i=1}^{n} \frac{2(x_i - \mu)}{2\sigma^2} = \frac{1}{2\sigma^2}\Big(\sum_{i=1}^{n} x_i - n\mu\Big).$$

De ahí que $S(\mu) = 0 \;\Rightarrow\; \sum_{i=1}^{n} x_i - n\mu = 0$, y

$$\boxed{\widehat{\mu} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} x_i.}$$

Verosimilitud

Podemos verificar que, en efecto, $\widehat{\mu}$ es un máximo local. Tomamos la función de información

$$I(\mu) = -\frac{\partial^2 \ell}{\partial \mu^2}(\widehat{\mu}) = \frac{n}{2\sigma^2} > 0.$$

Esto muestra que $\widehat{\mu}$ es un máximo local, y portanto es el estimador máximo verosímil para μ.
(la media muestra es el estimador máximo verosímil de la media μ, para una normal).

Ejercicio. Asumiendo $\widehat{\mu}$ como parámetro de la media para la normal, mostrar que el estimador máximo verosímil para la varianza σ^2 es la varianza muestral

$$\widehat{\sigma}^2 = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(x_i - \widehat{\mu})^2$$

Métodos basados en mezclas

Punto de partida: K-medias.

Haremos un cambio de notación, k en lugar de g y μ_k en lugar de c_g.
Algoritmo: (K-medias)

- Elegir al azar k representantes
- Repetir hasta convergencia:
  - Asignar cada dato $\mathbf{x}_i$ al representante μ_k más cercano según la métrica $d(\cdot,\cdot)$.
  - Tomar como nuevos representantes, los centroides μ_k de los datos asociados a un mismo representante.

Observación: minimizar$_k$ $||\mathbf{x}_i - \mu_k||^2 \iff$ maximizar$_k$ $\exp(-\frac{1}{2}||\mathbf{x}_i - \mu_k||^2)$.
$(X \sim \mathcal{N}_d(\mu_k, I))$.

UNIVERSIDAD DEL VALLE DE GUATEMALA

Métodos basados en mezclas

Pensemos ahora que los elementos de un grupo provienen de $\mathbb{P}_k \sim \mathcal{N}(\mu_k, I)$, para $k = 1, 2, \ldots, K$.

Asignamos cada dato $\mathbf{x}_i$ al índice k que maximiza $\mathbb{P}_k(X = \mathbf{x}_i)$ (de alguna manera, estamos maximizando una especie de verosimilitud).

<u>Ideas nuevas</u>:

- Queremos generalizar a $\mathbb{P}_k(X = \mathbf{x}_i)$.
- Primer paso: $\mathbb{P}_k \sim \mathcal{N}(\mu_k, I)$.
- Definimos v.a. X y Y, donde Y denota el grupo. Trabajamos con $\mathbb{P}_k(Y \mid X = \mathbf{x}_i)$.

Métodos basados en mezclas

Primer intento: definir la distribución de X directamente.

<u>Modelo de mezclas</u>:
Por ejemplo, la mezcla de dos gaussianas

$$\mathbb{P}(X = \mathbf{x}) = (1 - \alpha_1)\mathbb{P}_0(X = \mathbf{x}) + \alpha_1 \mathbb{P}_1(X = \mathbf{x}),$$

con $\mathbb{P}_0$, $\mathbb{P}_1$ distribucions gaussianas.

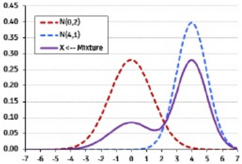
El agrupamiento consiste en estimar los parámetros θ de la distribución de X. La log-verosimilitud es de la forma

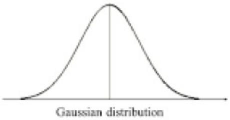
$$\ell(\theta) = \sum_i \log\big((1 - \alpha_1)\mathbb{P}_0(X == \mathbf{x}_i) + \alpha_1 \mathbb{P}_1(X = \mathbf{x}_i)\big).$$

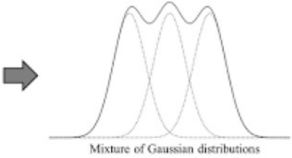
UNIVERSIDAD DEL VALLE DE GUATEMALA

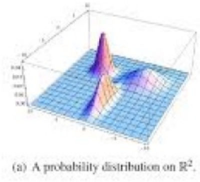
Caso general: se supone X proviene de una mezcla de K gaussianas

$$\mathbb{P}(X = \mathbf{x}) = \sum_{k=1}^{K} \alpha_k \mathbb{P}_k(X = \mathbf{x}).$$









Problema:
El modelo es difícil de estimar (la función de log-verosimilitud es difícil de optimizar).

Métodos basados en mezclas

Segundo intento: definir una v.a. Y que indica la categoria (grupo) de X,
$\Rightarrow \ Y \sim Ber(\alpha_1)$.

- antes $\mathbb{P}(X = \mathbf{x}) = P_0(X = \mathbf{x})(1 - \alpha_1) + \mathbb{P}_1(X = \mathbf{x})\alpha_1$.
- ahora
  $\mathbb{P}(X = \mathbf{x}) = \mathbb{P}(X = \mathbf{x} \mid Y = 0)\mathbb{P}(Y = 0) + \mathbb{P}(X = \mathbf{x} \mid Y = 1)\mathbb{P}(Y = 1)$.

Conociendo $\{(X_i, Y_i)\}$, la log-verosimilitud es

$$\begin{aligned}
\ell(\theta) &= \sum_i \log \mathbb{P}(X_i = \mathbf{x}_i, Y_i = y_i) = \sum_i \log \left(\mathbb{P}(X_i = \mathbf{x}_i, Y_i = y_i)\, \mathbb{P}(Y_i = y_i)\right) \\
&= \sum_i \log \mathbb{P}(X_i = \mathbf{x}_i, Y_i = y_i) + \sum_i \log \mathbb{P}(Y_i = y_i)
\end{aligned}$$

Como Y_i es binaria, entonces

Métodos basados en mezclas

$$\sum_i \log \mathbb{P}(Y_i = y_i) = n_0 \log \mathbb{P}(Y = 0) + n_1 \log \mathbb{P}(Y = 1),$$

con $n_k = \#\{i : y_i = k\}$. Luego

$$\ell(\theta) = \sum_{i:y_i=0} \log \mathbb{P}(Y = 0) + \sum_{i:y_i=1} \log \mathbb{P}(Y = 1) + n_0 \log(1 - \alpha_1) + n_1 \log \alpha_1.$$

Con esto, podemos obtener problemas de optimización desacoplados: más simple de obtener estimadores de máxima verosimillitud.
Por ejemplo, si $\mathbb{P}_k \sim \mathcal{N}(\mu_k, \sigma_k^2)$, entonces

- $\widehat{\mu}_k$ es el promedio muestral de $M_k = \{\mathbf{x}_i : y_i = k\}$,
- $\widehat{\sigma}_k$ es la desviación estándar muestral de M_k, $\widehat{\sigma}_k = \frac{n_1}{n_0+n_1}$.

Problema: no conocemos $\{Y_i\}$.

El algoritmo EM

EM = *Expectation Maximization*. Idea:

- Si conocemos $\{Y_i\}$, hay una solución cerrada, dada por

$$\widehat{\mu}_0 = \frac{\sum_i (1-y_i)\mathbf{x}_i}{n_0}, \quad \widehat{\mu}_1 = \frac{\sum_i y_i \mathbf{x}_i}{n_1}. \tag{3}$$

  similarmente para $\widehat{\sigma}_0$ y $\widehat{\sigma}_1$; y $\widehat{\alpha}_1 = \frac{n_0}{n_0+n_1} = \frac{\sum_i y_i}{n}$.

- Si conocemos los parámetros θ, podemos calcular

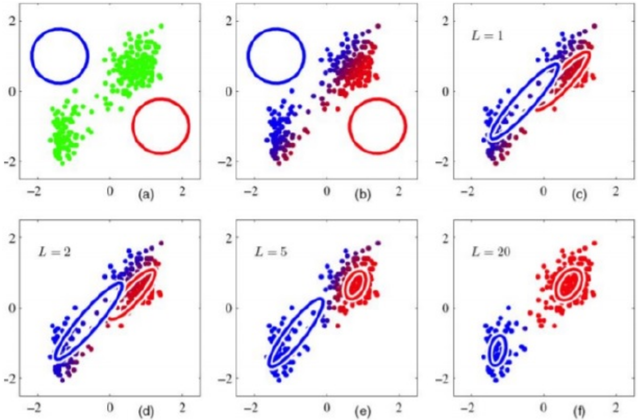
$$\mathbb{E}(Y_i \mid \{\mathbf{x}_i\}, \theta) = \mathbb{E}_\theta(Y_i \mid \{\mathbf{x}_i\}) = \mathbb{P}_\theta(Y_i = 1 \mid \mathbf{x}_i) = \frac{\mathbb{P}_\theta(\mathbf{x}_i \mid Y_i = 1)\, \mathbb{P}_\theta(Y_i = 1)}{\mathbb{P}_\theta(\mathbf{x}_i)}.$$

La idea es iterar lo anterior, usando en (3) en lugar de $y_i, \mathbb{E}_\theta(Y_i \mid \{\mathbf{x}_i\})$,

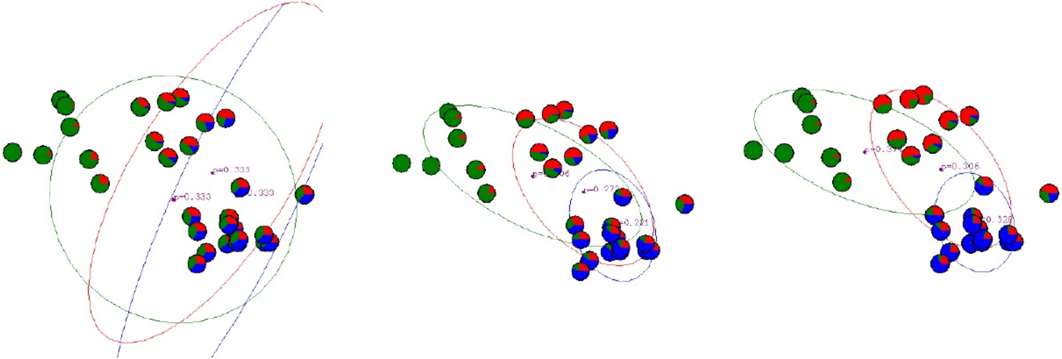
$$\widehat{\mu}_0 = \frac{\sum_i \mathbb{E}_\theta[(1-y_i) \mid \{\mathbf{x}_i\}]}{n_0}, \quad \widehat{\mu}_1 = \frac{\sum_i \mathbb{E}_\theta[y_i \mid \{\mathbf{x}_i\}]}{n_1}.$$

El algoritmo EM

En general, para una mezcla de K distribuciones, para cada $\mathbf{x}_i$, tenemos un vector $\gamma_i \in \mathbb{R}^K$, con $\gamma_i(k) = \mathbb{P}(Y_i = k \mid \mathbf{x}_i, \theta)$.



El algoritmo EM



El algoritmo EM

Algoritmo: (EM, forma general).

Sea $T = (Z, Z^m)$, donde Z^m se refiere a la parte faltante.

1. Definir $\ell_0(\theta, T)$ como la log-verosimilitud basada en los datos completos.
2. Adivinar inicialmente $\widehat{\theta}_0$.
3. Repetir, hasta convergencia:
    - Calcular $Q(\theta \mid \widehat{\theta}^t) = \mathbb{E}_{\widehat{\theta}^t}\big(\ell_0(\theta, T) \mid Z\big)$.
    - Definir $\widehat{\theta}^{t+1}$ como el máximo de $Q(\theta \mid \widehat{\theta}^t)$.

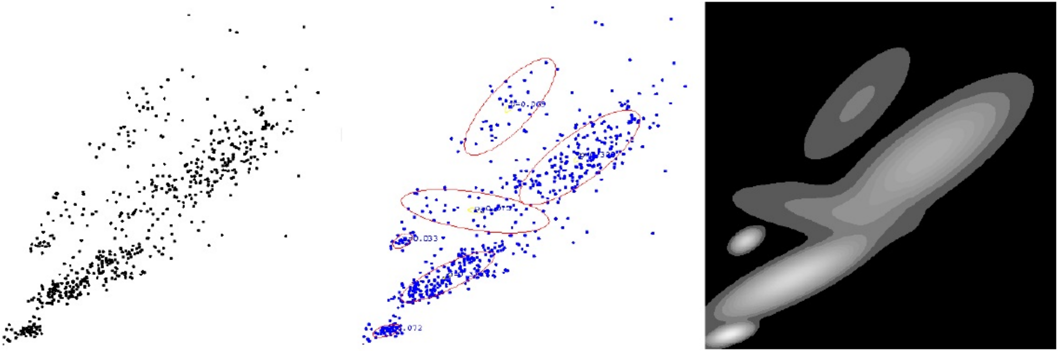
En el caso de la mezcla de gaussianas, $\theta = (\mu_0, \mu_1, \sigma_0, \sigma_1, \gamma)$, $T = (Z, Z^m)$ es (X, Y). De ahí

$$\ell_0(\theta, T) = \sum_{i:y_i=0} \log \mathbb{P}_{0,\theta}(X = \mathbf{x}_i) + \sum_{i:y_i=1} \log \mathbb{P}_{1,\theta}(X = \mathbf{x}_i) + \Big(1 - \sum_i \frac{y_i}{n}\Big) \log(1 - \alpha_1) + \sum_i \frac{y_i}{n} \log \alpha_1.$$

UNIVERSIDAD DEL VALLE DE GUATEMALA

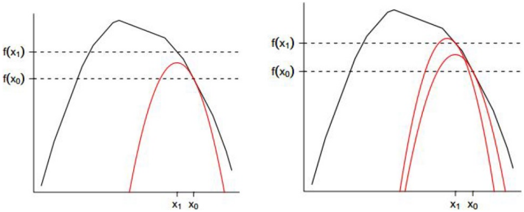
El algoritmo EM

En el caso de una mezcla de gausianas, si se compara EM con k-medias se observa que EM usa asignación *fuzzy*.



El algoritmo EM

En el trasfondo, EM es un algoritmo de *maxmin* (o *minimax*).



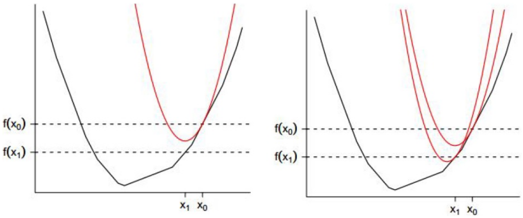
Algoritmo MM: Maximizar un minorizador. Para resolver $\text{argmax}\, f(\cdot)$, construye secuencia de aproximaciones donde

$$\theta^{n+1} = \text{argmax}_\theta\, g(\theta \mid \theta^n),$$

donde g es tal que: $f(\theta^n) = g(\theta^n \mid \theta^n)$, $f(\theta) \geq g(\theta \mid \theta^n)$.

El algoritmo EM

En el trasfondo, EM es un algoritmo de *maxmin* (o *minimax*).



Algoritmo MM: También se refiere a minimizar un mayorizador. Para resolver $\operatorname{argmin} f(\cdot)$, construye secuencia de aproximaciones donde

$$\theta^{n+1} = \operatorname{argmin}_\theta g(\theta \mid \theta^n),$$

donde g es tal que: $f(\theta^n) = g(\theta^n \mid \theta^n)$, $f(\theta) \leq g(\theta \mid \theta^n)$.

El algoritmo EM

En este contexto de minimizar un mayorizador (minimax), tenemos la siguiente

Propiedad

$f(\theta^{n+1}) \leq f(\theta^n), \forall n \in \mathbb{N}$.

Prueba:

Como $\theta^{n+1} = \text{argmin}_\theta\, g(\theta \mid \theta^n)$ y $f(\theta) \leq g(\theta \mid \theta^n)$, entonces

$$\begin{aligned} f(\theta^{n+1}) &= g(\theta^{n+1} \mid \theta^n) + f(\theta^{n+1}) - g(\theta^{n+1} \mid \theta^n) \\ &\leq g(\theta^n \mid \theta^n) \\ &\leq f(\theta^n). \end{aligned}$$

El algoritmo EM

Ejemplo: Dada muestra $\{y_i\}$ calcular la mediana, minimizando

$$f(\theta) = \sum_i |y_i - \theta|.$$

Se puede mostrar que la función $h_i(\theta \mid \theta^n) = \frac{1}{2}\frac{(yi - \theta)^2}{|y_i - \theta^n|} + \frac{1}{2}|y_i - \theta^n|$ mayoriza a $|y_i - \theta|$ en θ^n. Definimos

$$g(\theta \mid \theta^n) = \sum_i h_i(\theta \mid \theta^n), \tag{4}$$

que mayoriza a $f(\theta)$.

Hay una solución explícita para el mínimo en (4):

$$\theta^{n+1} = \frac{\sum_i w_i^n y_i}{\sum_i w_i^n}, \quad \text{com } w_i^n = |y_i - \theta^n|^{-1}.$$

UVG UNIVERSIDAD DEL VALLE DE GUATEMALA