

Aprendizaje automatizado

ESTIMACIÓN DE PARÁMETROS

Gibran Fuentes-Pineda

Febrero 2019

Interpretaciones de la probabilidad

- ¿Qué significan las probabilidades?
- ¿Cómo las obtengo?
- Ejemplo: lanzamiento de una moneda
 - ¿Qué valores asigno a águila y a sol?
 - ¿Qué representan esos valores?

- Basado en principio de indiferencia: todas las posibilidades tienen la misma probabilidad

- Basado en principio de indiferencia: todas las posibilidades tienen la misma probabilidad
- Ejemplo
 - Lanzamiento de una moneda

$$P(S) = \frac{1}{2}, P(A) = \frac{1}{2}$$

Interpretación frecuentista

- Probabilidades representan aspectos reales del universo (**perspectiva objetivista**)
- Límite de las frecuencias en un gran número de experimentos
- Ejemplo
 - Lanzamiento de una moneda: A, A, S, A, S, A, S, S, A, A

$$P(A) = \frac{6}{10}$$

$$P(S) = \frac{4}{10}$$

Interpretación bayesiana

- Probabilidades son grados de creencia de un observador (perspectiva subjetivista)
- Probabilidades se actualizan con nueva evidencia
- Ejemplo
 - Lanzamiento de una moneda. E = A, A, S, A, S, A, S, S, A, A

$$P(A|E) = \frac{P(E|A)P(A)}{P(E)}$$

$$P(S|E) = \frac{P(E|S)P(S)}{P(E)}$$

El problema de la estimación de parámetros

- Se asumen ciertas distribuciones en modelo, es decir,

$$\mathcal{X} \sim f(\theta)$$

El problema de la estimación de parámetros

- Se asumen ciertas distribuciones en modelo, es decir,

$$\mathcal{X} \sim f(\theta)$$

- Lanzamiento de una moneda 50 veces (datos)
 - Águila: 15 veces
 - Sol: 35 veces

El problema de la estimación de parámetros

- Se asumen ciertas distribuciones en modelo, es decir,

$$\mathcal{X} \sim f(\theta)$$

- Lanzamiento de una moneda 50 veces (datos)
 - Águila: 15 veces
 - Sol: 35 veces
- Si asumimos una distribución de Bernoulli

$$\text{Ber}(x; q) = q^x(1 - q)^{1-x},$$

El problema de la estimación de parámetros

- Se asumen ciertas distribuciones en modelo, es decir,

$$\mathcal{X} \sim f(\theta)$$

- Lanzamiento de una moneda 50 veces (datos)
 - Águila: 15 veces
 - Sol: 35 veces
- Si asumimos una distribución de Bernoulli

$$\text{Ber}(x; q) = q^x(1 - q)^{1-x},$$

- ¿Qué parámetro q produjo los datos?

Estrategias generales de estimación de parámetros

1. Estimador de máxima verosimilitud (puntual)

$$\hat{\theta}_{EMV} = \arg \max_{\theta} P(\mathcal{X}|\theta)$$

2. Estimador de máximo a posteriori (puntual)

$$\hat{\theta}_{MAP} = \arg \max_{\theta} \frac{P(\mathcal{X}|\theta)P(\theta)}{P(\mathcal{X})}$$

3. Estimador bayesiano (distribución completa)

$$P(\theta|\mathcal{X}) = \frac{P(\mathcal{X}|\theta)P(\theta)}{P(\mathcal{X})}$$

Estimador de máxima verosimilitud (EMV)

- Busca los valores de los parámetros que mejor se ajusten a los datos
- Función de verosimilitud

$$\mathcal{L}(\theta|\mathcal{X}) = P(\mathcal{X}|\theta)$$

- Se aproxima al valor real del parámetro cuando $|\mathcal{X}| \rightarrow \infty$

EMV para distribución de Bernoulli

- Función de verosimilitud (dadas n muestras)

$$\mathcal{L}(q|\mathcal{X}) = q^{x^{(1)}}(1-q)^{1-x^{(1)}} \times q^{x^{(2)}}(1-q)^{1-x^{(2)}} \times \dots \times q^{x^{(n)}}(1-q)^{1-x^{(n)}}$$

- Simplificando

$$\mathcal{L}(q|\mathcal{X}) = q^{\sum_{i=1}^n x^{(i)}} (1-q)^{n-\sum_{i=1}^n x^{(i)}}$$

- Aplicando el logaritmo

$$\log \mathcal{L}(q|\mathcal{X}) = \left(\sum_{i=1}^n x^{(i)} \right) \log q + \left(n - \sum_{i=1}^n x^{(i)} \right) \log (1-q)$$

- Derivando respecto a q , igualando a cero y despejando

$$\hat{q}_{EMV} = \frac{\sum_{i=1}^n x^{(i)}}{n}$$

EMV para distribución de normal

- Función de verosimilitud (dadas n muestras)

$$\mathcal{L}(\mu, \sigma^2 | \mathcal{X}) = \prod_{i=1}^n \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{\frac{-(x^{(i)} - \mu)^2}{2\sigma^2}}$$

- Aplicando el logaritmo

$$\mathcal{L}(\mu, \sigma^2 | \mathcal{X}) = -\frac{1}{2}n \log 2\pi\sigma^2 - \sum_{i=1}^n \frac{(x^{(i)} - \mu)^2}{2\sigma^2}$$

- Derivando respecto a μ y σ^2 e igualando a cero

$$\hat{\mu}_{EMV} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x^{(i)}$$

- Para la varianza

$$\hat{\sigma}_{EMV}^2 = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (x^{(i)} - \hat{\mu}_{EMV})^2$$

EMV para otras distribuciones

Nombre	Definición	EMV
Poisson	$f(x; \lambda) = \frac{\lambda^x e^{-\lambda}}{x!}$	$\hat{\lambda} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x^{(i)}$
Categórica	$f(x; \mathbf{q}) = \prod_{k=1}^K q_k^{x_k}$	$\hat{q}_k = \frac{1}{n^*} \sum_{i=1}^{n^*} x_k^{[x=k]}$
Multinomial	$f(\mathbf{x}; m, \mathbf{q}) = \frac{m!}{\prod_{k=1}^K x_k!} \prod_{k=1}^K q_k^{x_k}$	$\hat{q}_k = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_k^{(i)}$

$$n^* = \sum_{i=1}^n \sum_{k=1}^K x_k^{(i)}$$

Estimador de máximo a posteriori (MAP)

- MAP: valor de θ con la probabilidad a posteriori más grande

$$\hat{\theta}_{MAP} = \arg \max_{\theta} P(\theta|\mathcal{X}) = \arg \max_{\theta} \frac{P(\mathcal{X}|\theta)P(\theta)}{P(\mathcal{X})}$$

Estimador de máximo a posteriori (MAP)

- MAP: valor de θ con la probabilidad a posteriori más grande

$$\hat{\theta}_{MAP} = \arg \max_{\theta} P(\theta|\mathcal{X}) = \arg \max_{\theta} \frac{P(\mathcal{X}|\theta)P(\theta)}{P(\mathcal{X})}$$

- Incorpora información a priori sobre los parámetros
- ¿Qué distribución a priori usamos?

Distribuciones a priori conjugadas

- $P(\theta)$ es una distribución **a priori conjugada** para $P(\mathcal{X}|\theta)$ si la distribución a posteriori es de la misma familia¹

Verosimilitud	Parám.	Conjugada	Hiperparám.
Bernoulli	q	Beta	α, β
Binomial	q	Beta	α, β
Multinomial	\mathbf{q}	Dirichlet	α
Normal (σ^2 conocida)	μ	Normal	μ_0, σ_0^2
Normal multivar. (Σ conocida)	μ	Normal multivar.	μ_0, Σ_0
Poisson	λ	Gamma	α, β

¹Puedes encontrar una lista de distribuciones a priori conjugadas en https://en.wikipedia.org/wiki/Conjugate_prior.

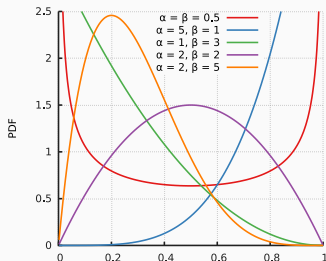
A priori conjugado de Bernoulli: Beta

- Dada la función de verosimilitud de la distribución Bernoulli y n muestras

$$\mathcal{L} = q^{x^{(1)}}(1-q)^{1-x^{(1)}} \times q^{x^{(2)}}(1-q)^{1-x^{(2)}} \times \dots \times q^{x^{(n)}}(1-q)^{1-x^{(n)}}$$

- Su a priori conjugada es la distribución Beta dada por

$$P(q) = \frac{q^{\alpha-1}(1-q)^{\beta-1}}{B(\alpha, \beta)}$$



$$Moda = \frac{\alpha}{\alpha + \beta}$$

$$Media = \frac{\alpha}{\alpha + \beta - 2}$$

MAP para distribución de Bernoulli (1)

- Valor del parámetro que maximice la distribución a posteriori

$$\hat{q}_{MAP} = \arg \max_q P(q|\mathcal{X}) = \arg \max_q \frac{P(\mathcal{X}|q)P(q)}{P(\mathcal{X})}$$

- Como buscamos el máximo no es necesario calcular la probabilidad marginal, por lo tanto

$$\hat{q}_{MAP} = \arg \max_q P(\mathcal{X}|q)P(q)$$

$$\hat{q}_{MAP} = \arg \max_q \left(\prod_{i=1}^{|\mathcal{X}|} P(x^{(i)}|q) \right) P(q)$$

$$P(q|\mathcal{X}) \propto \left(\prod_{i=1}^{|\mathcal{X}|} \text{Ber}(x^{(i)}|q) \right) \text{Beta}(q|\alpha, \beta)$$

MAP para distribución de Bernoulli (2)

- Dada la función de verosimilitud de la distribución Bernoulli y n muestras
- ¿Por qué la distribución Beta?

$$P(q|\mathcal{X}) \propto q^{\sum_{i=1}^n x^{(i)}} (1-q)^{n-\sum_{i=1}^n x^{(i)}} q^{\alpha-1} (1-q)^{\beta-1}$$

$$P(q|\mathcal{X}) = \text{Beta}(q|\alpha + \sum_{i=1}^n x^{(i)}, \beta + (n - \sum_{i=1}^n x^{(i)}))$$

MAP para distribución de Bernoulli (3)

- Aplicando el logaritmo a $P(q|\mathcal{X})$

$$\hat{q}_{MAP} = \arg \max_q \left(\sum_{i=1}^n \log \text{Ber}(x^{(i)}|q) \right) + \log \text{Beta}(q|\alpha, \beta)$$

- Derivando respecto a q y encontrando el máximo

$$\hat{q}_{MAP} = \frac{\sum_{i=1}^n x^{(i)} + \alpha - 1}{n + \beta + \alpha - 2}$$

MAP para otras distribuciones

Nombre	MAP
Poisson	$\hat{\lambda} = \frac{\sum_{i=1}^n x^{(i)} + \alpha - 1}{n + \beta}$
Categórica	$\hat{q}_k = \frac{\alpha_k + c_k - 1}{\sum_{k=1}^K \alpha_k + n - K}$
Multinomial	$\hat{q}_k = \frac{\sum_{i=1}^{n^*} x_k^{(i)} + \alpha_k - 1}{n^* + \sum_{k=1}^K \alpha_k - K}$
Normal (σ^2 conocido)	$\hat{\mu} = \frac{\sigma_0^2 [\sum_{i=1}^n x^{(i)}] + \sigma^2 \mu_0}{\sigma_0^2 n + \sigma^2}$

$$n^* = \sum_{i=1}^n \sum_{k=1}^K x_k^{(i)}$$

$$\mathbf{c} = [c_1, \dots, c_K] = \left[\sum_{i=1}^n x^{[x=1]}, \dots, \sum_{i=1}^n x^{[x=K]} \right]$$

- No sólo obtiene el valor de θ del máximo a posteriori, estima la distribución a posteriori completa

$$P(\theta|\mathcal{X}) = \frac{P(\mathcal{X}|\theta)P(\theta)}{P(\mathcal{X})}$$

- Dado un nuevo dato \tilde{x} , la distribución predictiva a posteriori está dada por

$$P(\tilde{x}|\mathcal{X}) = \int_{\theta} P(\tilde{x}|\theta, \mathcal{X})P(\theta|\mathcal{X})d\theta$$

Estimador bayesiano para distribución de Bernoulli

- Usando la Beta como distribución a priori conjugada, tenemos

$$P(q|\mathcal{X}) = \text{Beta} \left(q|\alpha + \sum_{i=1}^n x^{(i)}, \beta + (n - \sum_{i=1}^n x^{(i)}) \right)$$

- Dado un nuevo dato \tilde{x} , la distribución predictiva a posteriori está dada por

$$\begin{aligned} P(\tilde{x}|\mathcal{X}) &= \int_{\theta} P(\tilde{x}|\theta, \mathcal{X}) P(\theta|\mathcal{X}) d\theta \\ &= \int_q q \cdot \text{Beta}(q|\alpha + \sum_{i=1}^n x^{(i)}, \beta + (n - \sum_{i=1}^n x^{(i)})) dq \\ &= \mathbb{E}[P(q|\mathcal{X})] = \frac{\alpha + \sum_{i=1}^n x^{(i)}}{\alpha + \beta + n} \end{aligned}$$

Estimador bayesiano para distribución normal

- Suponiendo σ^2 conocida, la distribución a priori conjugada sobre μ es una normal:

$$P(\mu) = \mathcal{N}(\mu_0, \sigma_0^2)$$

- La distribución a posteriori es también normal:

$$P(\mu|\mathcal{X}) = \mathcal{N}\left(\underbrace{\frac{1}{\frac{1}{\sigma_0^2} + \frac{n}{\sigma^2}} \left[\frac{\mu_0}{\sigma_0^2} + \frac{\sum_{i=1}^n x^{(i)}}{\sigma^2} \right]}_{\mu_p}, \underbrace{\left[\frac{1}{\sigma_0^2} + \frac{n}{\sigma^2} \right]^{-1}}_{\sigma_p^2}\right)$$

- La distribución predictiva a posteriori está dada por:

$$P(\tilde{x}|\mathcal{X}) = \mathcal{N}(\mu_p, \sigma_p^2 + \sigma^2)$$

Estimador bayesiano para otras distribuciones

Nombre	A posteriori	Predictiva
Poisson	$\Gamma(\underbrace{\alpha + \sum_{i=1}^n x^{(i)}}_{\alpha'}, \underbrace{\beta + n}_{\beta'})$	$P(\tilde{x}) = NB(\alpha', \beta')$
Cat	$Dir(\boldsymbol{\alpha} + \mathbf{c})$	$P(\tilde{x} = k) = \frac{\alpha_k + c_k}{\sum_{k=1}^K \alpha_k + n}$
Mult.	$Dir(\boldsymbol{\alpha} + \mathbf{c})$	$P(\tilde{x} = k) = DirMult(\tilde{x} \boldsymbol{\alpha} + \mathbf{c})$

$$\mathbf{c} = [c_1, \dots, c_K] = [\sum_{i=1}^n x^{[x=1]}, \dots, \sum_{i=1}^n x^{[x=K]}]$$

Clasificador bayesiano ingenuo: modelo generativo

- Modela distribución conjunta de atributos y clases $P(x_1, \dots, x_d, y)$, asumiendo independencia condicional de los atributos dada la clase
- **Independencia condicional:** X y Y son condicionalmente independientes dado Z si

$$P(X, Y|Z) = P(X|Z)P(Y|Z)$$

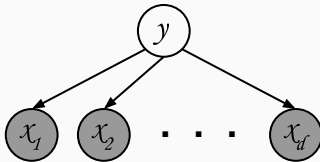
$$P(X|Y, Z) = P(X|Z)$$

- En el clasificador bayesiano ingenuo, la probabilidad conjunta está dada por

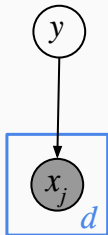
$$P(x_1, \dots, x_d, y) = \left(\prod_{j=1}^d P(x_j|y = c) \right) P(y = c)$$

Clasificador bayesiano ingenuo: representación gráfica

- El clasificador bayesiano ingenuo se puede representar como un modelo gráfico probabilista simple



- De forma más compacta en notación de placas:



Clasificador bayesiano ingenuo: predicción

- Para obtener la probabilidad de cada clase para un nuevo dato $\tilde{\mathbf{x}} = [\tilde{x}_1, \dots, \tilde{x}_d]$ usamos teorema de bayes

$$P(y = c | \tilde{x}_1, \dots, \tilde{x}_d) = \frac{P(\tilde{x}_1, \dots, \tilde{x}_d | y = c) P(y = c)}{P(\tilde{x}_1, \dots, \tilde{x}_d)}$$

- Debido a que

$$\left(\prod_{j=1}^d P(\tilde{x}_j | y = c) \right) P(y = c) \propto P(y = c | \tilde{x}_1, \dots, \tilde{x}_d)$$

- Podemos obtener la clase más probable como:²

$$\hat{y} = \arg \max_y \left(\prod_{j=1}^d P(\tilde{x}_j | y = c) \right) P(y = c)$$

²En algunas aplicaciones se requiere conocer las probabilidades para la toma de decisiones, por lo que es necesario calcular $P(\tilde{x}_1, \dots, \tilde{x}_d)$

- Considera n correos electrónicos representados como bolsas de palabras y sus correspondientes etiquetas $\mathcal{X} = (\mathbf{x}^{(1)}, y^{(1)}), \dots, (\mathbf{x}^{(n)}, y^{(n)})$
 - Vectores $\mathbf{x}^{(i)} = [x_1^{(i)}, \dots, x_d^{(i)}]$
 - $x_j^{(i)}$ es el número de veces que la palabra j ocurre en el correo i ($x_j^{(i)} \in [0, 1]$ si el esquema es binario)
- Presuponiendo esquema binario y clasificación binaria:

$$x_j \sim \text{Ber}(q_j), j = 1, \dots, d$$

$$y \sim \text{Ber}(q_y)$$

Clasificador bayesiano ingenuo

- Entrenamiento: se estiman los parámetros q_1, \dots, q_d condicionadas a las clases ($y = 0$ y $y = 1$) y el parámetro de la distribución a priori de la clase q_y
- Predicción: dado un nuevo documento $\tilde{\mathbf{x}} = [\tilde{x}_1, \dots, \tilde{x}_d]$, podemos obtener su clase más probable usando los parámetros estimados

$$\hat{y} = \arg \max_y \left(\prod_{j=1}^d \text{Ber}(x_j; \hat{q}_j) \right) \text{Ber}(y; \hat{q}_y)$$