Modelos Bayesianos

Taller de Procesamiento de Señales

TPS Matias Vera Modelos Gráficos 1/35

Agenda

- Inferencia Bayesiana
- 2 Naive Bayes
- Multinomial Naive Bayes
- 4 Variational Bayes
- 5 Técnicas de Muestreo

TPS Matias Vera Modelos Gráficos 2 / 35

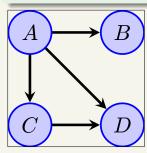
Redes Bayesianas

Modelos Gráficos

Modelos probabilísticos capaz de representarse con un grafo.

Red Bayesiana

Grafo acíclico dirigido que representa la relación de causalidad e independencia de sus variables. Dos variables aleatorias cualesquiera son condicionalmente independientes dados los valores de sus padres causales (y por lo tanto las raices son independientes).



$$p(A, B, C, D) = p(A) \cdot p(B|A) \cdot p(C|A) \cdot p(D|A, C)$$

TPS Matias Vera Modelos Gráficos 3 / 35

- Los parámetros θ deben ser considerado realizaciones de una variable aleatoria T con una distribución a priori conocida $p(\theta)$.
- Las muestras son i.i.d. cuando se conoce el parámetro.
- La distribución a posteriori de los parámetros se calcula como:

$$p(\theta|\mathcal{D}_n) \propto p(\theta) \prod_{i=1}^n p(x_i|\theta)$$

con
$$\mathcal{D}_n = \{x_1, \cdots, x_n\}.$$

- Como estimador puntual suele elegirse el maximo a posteriori (Θ discreto) y el estimador bayesiano o media a posteriori (Θ continuo).
- No son necesarios los estimadores puntuales para predecir:

$$p(x_{\text{test}}|\mathcal{D}_n) = \int_{\Theta} p(x_{\text{test}}|\theta) p(\theta|\mathcal{D}_n) d\theta = \mathbb{E}[p(x_{\text{test}}|T)|\mathcal{D}_n]$$

TPS Matias Vera Modelos Gráficos 4 / 35

Filosofía Bayesiana

La estadística bayesiana interpreta la probabilidad como una medida de credibilidad en un evento. Por eso se habla de que el enfoque Bayesiano busca verdades en contexto de incertidumbre.

TPS Matias Vera Modelos Gráficos 5 / 35

Filosofía Bayesiana

La estadística bayesiana interpreta la probabilidad como una medida de credibilidad en un evento. Por eso se habla de que el enfoque Bayesiano busca verdades en contexto de incertidumbre.

No confunduir Bayesiano con Relativista

¿Es posible entonces alcanzar verdades en las ciencias empíricas en las que es inevitable decir "no sé"? Sí. Podemos evitar mentir: maximizando incertidumbre (no afirmar más de lo que se sabe) dada la información disponible (sin ocultar lo que sí se sabe).

TPS Matias Vera Modelos Gráficos 5 / 35

Filosofía Bayesiana

La estadística bayesiana interpreta la probabilidad como una medida de credibilidad en un evento. Por eso se habla de que el enfoque Bayesiano busca verdades en contexto de incertidumbre.

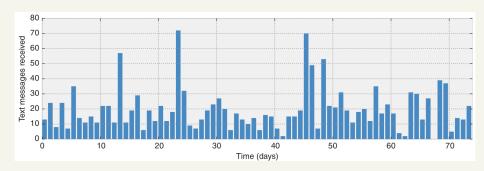
No confunduir Bayesiano con Relativista

¿Es posible entonces alcanzar verdades en las ciencias empíricas en las que es inevitable decir "no sé"? Sí. Podemos evitar mentir: maximizando incertidumbre (no afirmar más de lo que se sabe) dada la información disponible (sin ocultar lo que sí se sabe).

¿Son prácticos los métodos Bayesianos?

Si, no solo por poder *adaptarse* a intentar resolver los mismos problemas que la estadística frecuentista (por ejemplo predicciones), sino que también pueden intentar resolver problemas donde la estadística clásica es insuficiente o iluminar el sistema subyacente con un modelado más flexible.

TPS Matias Vera Modelos Gráficos 5 / 35



Problema

Un usuario proporciona una serie de recuentos diarios de mensajes de whatsapp enviados. Tiene curiosidad por saber si los hábitos de envío de mensajes han cambiado con el tiempo. ¿Cómo puedes modelar esto?

TPS Matias Vera Modelos Gráficos 6 / 35

- La cantidad de mensajes en un día deberá ser modelada como una variable discreta cuyos átomos es \mathbb{N}_0 . Por ejemplo $X_i \sim \mathsf{Poi}(\lambda_i)$.
- Si observamos los datos, parecería que el valor de λ_i aumenta en algún momento durante las observaciones. ¿Cómo podemos representar matemáticamente esta observación? Supongamos que algún día τ durante el período de observación, el parámetro λ_i se incrementa repentinamente. Entonces realmente tenemos dos tasas: una para el período anterior a τ y otro para el resto del período:

$$\lambda_i = \left\{ \begin{array}{ll} \beta_1 & i < \tau \\ \beta_2 & i \ge \tau \end{array} \right.$$

• Tanto β_1 como β_2 toman valores reales no negativos. Por ejemplo $\beta_1,\beta_2\sim\mathcal{E}(\alpha)$. Nuestra estimación de α no influye demasiado en el modelo, por lo que tenemos cierta flexibilidad en nuestra elección. Para evitar ser demasiado obstinados con este parámetro se sugiere:

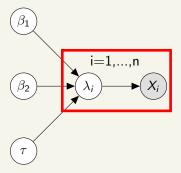
$$\alpha \approx \frac{1}{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} X_i}$$

TPS Matias Vera Modelos Gráficos 7/3

• ¿Qué pasa con τ ? Debido a la varianza de los datos, es difícil caracterizarlo en detalle. En cambio, podemos asignar la creencia menos informativa posibles $\tau \sim \mathcal{U}\{1:T\}$.

TPS Matias Vera Modelos Gráficos 8 / 35

• ¿Qué pasa con τ ? Debido a la varianza de los datos, es difícil caracterizarlo en detalle. En cambio, podemos asignar la creencia menos informativa posibles $\tau \sim \mathcal{U}\{1:T\}$.



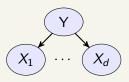
TPS Matias Vera Modelos Gráficos 8 / 35

Naive Bayes

Naive Bayes

Estimar los parámetros (máxima verosimilitud o bayesiano) asumiendo que una relación de causalidad $Y \to X$ con las diferentes componentes $X_j | Y = k$ independientes.

Red Bayesiana



Cálculo

$$p(y|\mathbf{x}) = \frac{p(y) \prod_{j=1}^{d} p(x_j|y)}{p(\mathbf{x})}$$

TPS Matias Vera Modelos Gráficos 9 / 35

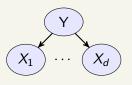
Naive Bayes

Naive Bayes

Estimar los parámetros (máxima verosimilitud o bayesiano) asumiendo que una relación de causalidad $Y \to X$ con las diferentes componentes $X_j | Y = k$ independientes.

Red Bayesiana

Cálculo



$$p(y|\mathbf{x}) = \frac{p(y) \prod_{j=1}^{d} p(x_j|y)}{p(\mathbf{x})}$$

Gaussian Naive Bayes

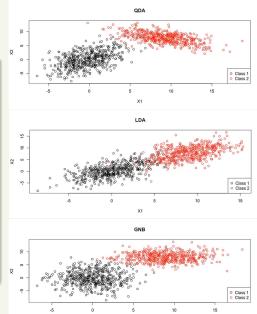
Sea $\pi = \{c_1, \cdots, c_K\}$ y $\theta^{(k)} = \{(\mu_1^{(k)}, \sigma_1^{2(k)}), \cdots (\mu_d^{(k)}, \sigma_d^{2(k)})\}$, se modela $Y \sim \text{Cat}(\{c_1, \cdots, c_K\})$ y $X_j | Y = k \sim \mathcal{N}(\mu_j^{(k)}, \sigma_j^{2(k)})$, estimando parámetros por MV.

TPS Matias Vera Modelos Gráficos 9/35

Gaussian Naive Bayes (GNB)

Diferencias entre QDA, LDA y GNB

- QDA acepta como Σ_k cualquer conjunto de matrices definidas positiva.
- LDA acepta como Σ_k cualquier matriz pero todas iguales.
- GNB permite tener matrices Σ_k differentes pero todas diagonales.



Multinomial Naive Bayes (MNB)

Sea $\pi = \{c_1, \cdots, c_K\}$ y $\theta^{(k)} = \{\theta_1^{(k)}, \cdots, \theta_V^{(k)}\}$, se modela Modelo con $Y \sim \mathsf{Cat}(\{c_1, \cdots, c_K\})$ y $X_j | Y = k \sim \mathsf{Cat}(\{\theta_1^{(k)}, \cdots, \theta_V^{(k)}\})$, utilizando estimadores puntuales.

TPS Matias Vera Modelos Gráficos 11 / 35

Multinomial Naive Bayes (MNB)

Sea $\pi = \{c_1, \cdots, c_K\}$ y $\theta^{(k)} = \{\theta_1^{(k)}, \cdots, \theta_V^{(k)}\}$, se modela Modelo con $Y \sim \mathsf{Cat}(\{c_1, \cdots, c_K\})$ y $X_j | Y = k \sim \mathsf{Cat}(\{\theta_1^{(k)}, \cdots, \theta_V^{(k)}\})$, utilizando estimadores puntuales.

Inferencia

$$p(y|\mathbf{x}) \propto c_y \prod_{j=1}^d \theta_{x_j}^{(y)} = c_y \prod_{m=1}^V \left(\theta_m^{(y)}\right)^{N_m}$$

con N_m : Cantidad de predictores con valor m.

TPS Matias Vera Modelos Gráficos 11 / 35

Multinomial Naive Bayes (MNB)

Sea $\pi = \{c_1, \dots, c_K\}$ y $\theta^{(k)} = \{\theta_1^{(k)}, \dots, \theta_V^{(k)}\}$, se modela Modelo con $Y \sim \mathsf{Cat}(\{c_1, \dots, c_K\})$ y $X_j | Y = k \sim \mathsf{Cat}(\{\theta_1^{(k)}, \dots, \theta_V^{(k)}\})$, utilizando estimadores puntuales.

Inferencia

$$p(y|\mathbf{x}) \propto c_y \prod_{j=1}^d \theta_{x_j}^{(y)} = c_y \prod_{m=1}^V \left(\theta_m^{(y)}\right)^{N_m}$$

con N_m : Cantidad de predictores con valor m.

Sobre las variables contadoras

Sea $\mathbf{N} = (N_1, \dots, N_V)$, es sencillo notar que $\sum_{m=1}^V N_m = d$ y $\mathbf{N}|_{Y=k} \sim \mathcal{M}_n(d, [\theta_1^{(k)}, \dots, \theta_V^{(k)}])$.

TPS Matias Vera Modelos Gráficos 11 / 35

Verosimilitud con transformación Afin

$$\arg\max_{y} \ p(y|\mathbf{x}) = \arg\max_{y} \ \log(c_y) + \sum_{m=1}^{V} \textit{N}_m \log\left(\theta_m^{(y)}\right)$$

TPS Matias Vera Modelos Gráficos 12 / 35

Verosimilitud con transformación Afin

$$arg \max_{y} p(y|\mathbf{x}) = arg \max_{y} \log(c_y) + \sum_{m=1}^{V} N_m \log\left(\theta_m^{(y)}\right)$$

Probabilidades de las Clases

Los parámetros c_1, \dots, c_K son estimados por máxima verosimilitud como:

$$\hat{c}_k = \frac{\#\{y_i = k\}}{n}$$

TPS Matias Vera Modelos Gráficos 12 / 35

Verosimilitud con transformación Afin

$$rg \max_{y} p(y|\mathbf{x}) = rg \max_{y} \log(c_y) + \sum_{m=1}^{V} N_m \log\left(\theta_m^{(y)}\right)$$

Probabilidades de las Clases

Los parámetros c_1, \dots, c_K son estimados por máxima verosimilitud como:

$$\hat{c}_k = \frac{\#\{y_i = k\}}{n}$$

Sobre el valor d

Cada muestra puede poseer un valor de d diferente. Eso es típico en texto, donde cada documento posee una cantidad diferente de palabras.

TPS Matias Vera Modelos Gráficos 12 / 35

Estimación de $\theta_m^{(k)}$

Se cuenta con datos $\{(\mathbf{N}_i, y_i)\}_{i=1}^n$. Sin embargo, para cada clase k se utilizarán solamente los datos con $\{y_i = k\}$ distribuidos como una multinomial de probabilidades $\theta_1^{(k)}, \cdots, \theta_V^{(k)}$. A su vez, dado que las variables N_m cuentan ocurrencias, puedo compactar todas las muestras de entrenamiento de cada clase en una sola (suficiencia estadística).

$$\tilde{N}_{m}^{(k)} = \sum_{i=1}^{n} N_{i,m} \cdot \mathbb{1}\{y_{i} = k\}$$

TPS Matias Vera Modelos Gráficos 13 / 35

Estimación de $\theta_m^{(k)}$

Se cuenta con datos $\{(\mathbf{N}_i,y_i)\}_{i=1}^n$. Sin embargo, para cada clase k se utilizarán solamente los datos con $\{y_i=k\}$ distribuidos como una multinomial de probabilidades $\theta_1^{(k)},\cdots,\theta_V^{(k)}$. A su vez, dado que las variables N_m cuentan ocurrencias, puedo compactar todas las muestras de entrenamiento de cada clase en una sola (suficiencia estadística).

$$\tilde{N}_{m}^{(k)} = \sum_{i=1}^{n} N_{i,m} \cdot \mathbb{1}\{y_{i} = k\}$$

Modelado: Estimador Bayesiano

Como modelado para el entrenamiento se supone $\mathbf{T} \sim \mathrm{Dir}([\alpha_1, \cdots, \alpha_V])$ y $(\tilde{N}_1^{(k)}, \cdots, \tilde{N}_V^{(k)})|_{\mathbf{T} = \Theta} \sim \mathcal{M}_n(\tilde{d}^{(k)}, [\theta_1^{(k)}, \cdots, \theta_V^{(k)}]).$

TPS Matias Vera Modelos Gráficos 13 / 35

Dirichlett Distribution

El vector aleatorio $(T_1, \dots, T_V) \sim \text{Dir}([\alpha_1, \dots, \alpha_V])$ tiene que ser pensado como una beta multivariada. Su densidad es de la forma

$$p(\theta_1, \dots, \theta_V) = \frac{\prod_{m=1}^V \Gamma(\alpha_m)}{\Gamma\left(\sum_{m=1}^V \alpha_m\right)} \left(\prod_{m=1}^V \theta_m^{\alpha_m - 1}\right) \cdot \mathbb{1} \left\{\sum_{m=1}^V \theta_m = 1, \theta_m \geq 0\right\}$$

con sus marginales $T_m \sim \beta(\alpha_m, \sum_{n \neq m} \alpha_n)$.

TPS Matias Vera Modelos Gráficos 14 / 35

Distribución a Posteriori

$$\begin{split} & p\left(\theta_1^{(k)}, \cdots, \theta_V^{(k)} | \tilde{N}_1^{(k)}, \cdots, \tilde{N}_V^{(k)} \right) \\ & \propto P\left(\tilde{N}_1^{(k)}, \cdots, \tilde{N}_V^{(k)} | \theta_1^{(k)}, \cdots, \theta_V^{(k)} \right) \cdot p\left(\theta_1^{(k)}, \cdots, \theta_V^{(k)} \right) \\ & \propto \left(\prod_{m=1}^V (\theta_m^{(k)})^{\tilde{N}_m^{(k)}} \right) \left(\prod_{m=1}^V (\theta_m^{(k)})^{\alpha_m - 1} \cdot \mathbb{1} \left\{ \theta_m^{(k)} \geq 0 \right\} \right) \cdot \mathbb{1} \left\{ \sum_{m=1}^V \theta_m^{(k)} = 1 \right\} \end{split}$$

con lo cuál
$$\mathbf{T}|_{\tilde{N}_{1}^{(k)},\cdots,\tilde{N}_{V}^{(k)}} \sim \text{Dir}([\tilde{N}_{1}^{(k)}+\alpha_{1},\cdots,\tilde{N}_{V}^{(k)}+\alpha_{V}])$$

TPS Matias Vera Modelos Gráficos 15 / 35

Distribución a Posteriori

$$\begin{split} & \rho\left(\theta_1^{(k)}, \cdots, \theta_V^{(k)} | \tilde{N}_1^{(k)}, \cdots, \tilde{N}_V^{(k)}\right) \\ & \propto P\left(\tilde{N}_1^{(k)}, \cdots, \tilde{N}_V^{(k)} | \theta_1^{(k)}, \cdots, \theta_V^{(k)}\right) \cdot p\left(\theta_1^{(k)}, \cdots, \theta_V^{(k)}\right) \\ & \propto \left(\prod_{m=1}^V (\theta_m^{(k)})^{\tilde{N}_m^{(k)}}\right) \left(\prod_{m=1}^V (\theta_m^{(k)})^{\alpha_m - 1} \cdot \mathbb{1}\left\{\theta_m^{(k)} \geq 0\right\}\right) \cdot \mathbb{1}\left\{\sum_{m=1}^V \theta_m^{(k)} = 1\right\} \end{split}$$

con lo cuál
$$\mathbf{T}|_{\tilde{N}_1^{(k)},\cdots,\tilde{N}_V^{(k)}} \sim \mathrm{Dir}([\tilde{N}_1^{(k)}+\alpha_1,\cdots,\tilde{N}_V^{(k)}+\alpha_V])$$

Estimador Bayesiano

$$\hat{\theta}_m^{(k)} = \mathbb{E}[T_j | \tilde{N}_1^{(k)}, \cdots, \tilde{N}_V^{(k)}] = \frac{\tilde{N}_m^{(k)} + \alpha_m}{\sum_{n=1}^V \tilde{N}_\eta^{(k)} + \alpha_\eta}$$

TPS Matias Vera Modelos Gráficos 15 / 35

Outline

- Inferencia Bayesiana
- 2 Naive Bayes
- Multinomial Naive Bayes
- 4 Variational Bayes
- 5 Técnicas de Muestreo

TPS Matias Vera Modelos Gráficos 16 / 38

Variational Bayes

El objetivo es considerar los parámetros como parte del espacio latente. Sea ${\bf Z}$ un vector no observable del problema, en general será prohibitivo calcular la distribución a posteriori $p({\bf z}|{\bf x})$. Con lo cuál, uno aproximará dicha distribución con la solución de

$$\begin{split} \arg\min_{q \in \mathcal{P}} \ \mathsf{KL}\left(q(\cdot|\mathbf{x}) \| p(\cdot|\mathbf{x})\right) &= \arg\max_{q \in \mathcal{P}} \ H(q(\cdot|\mathbf{x})) + \mathbb{E}_q \left[\log p(\mathbf{x}, \mathbf{Z}) | \mathbf{X} = \mathbf{x}\right] \\ &= \arg\max_{q \in \mathcal{P}} \ \mathsf{ELBO}(q) \end{split}$$

donde $q(\mathbf{z}|\mathbf{x})$ cumple ciertas restricciones \mathcal{P} .

TPS Matias Vera Modelos Gráficos 17 / 35

Variational Bayes

El objetivo es considerar los parámetros como parte del espacio latente. Sea ${\bf Z}$ un vector no observable del problema, en general será prohibitivo calcular la distribución a posteriori $p({\bf z}|{\bf x})$. Con lo cuál, uno aproximará dicha distribución con la solución de

$$\begin{split} \arg\min_{q \in \mathcal{P}} \ \mathsf{KL}\left(q(\cdot|\mathbf{x}) \| p(\cdot|\mathbf{x})\right) &= \arg\max_{q \in \mathcal{P}} \ H(q(\cdot|\mathbf{x})) + \mathbb{E}_q \left[\log p(\mathbf{x}, \mathbf{Z}) | \mathbf{X} = \mathbf{x}\right] \\ &= \arg\max_{q \in \mathcal{P}} \ \mathsf{ELBO}(q) \end{split}$$

donde $q(\mathbf{z}|\mathbf{x})$ cumple ciertas restricciones \mathcal{P} .

Mean field approximation

Aproximación que relaja el problema al suponer que q se puede factorizar como productos de densidades tratables. Por ejemplo, sea $\mathbf{z} = (\mathbf{u}, \phi)$ se relaja el problema suponiendo $q(\mathbf{z}|\mathbf{x}) = q_1(\mathbf{u}|\mathbf{x})q_2(\phi|\mathbf{x})$ para todo $q \in \mathcal{P}$.

TPS Matias Vera Modelos Gráficos 17 / 35

Planteo del problema

Se buscan q_1 y q_2 que maximicen

ELBO(q)

$$= H(q_1(\cdot|\mathbf{x})) + H(q_2(\cdot|\mathbf{x})) + \int_{\mathcal{U}} q_1(\mathbf{u}|\mathbf{x}) \left(\int_{\Phi} q_2(\phi|\mathbf{x}) \log p(\mathbf{x},\mathbf{u},\phi) d\phi \right) d\mathbf{u}$$

$$=H(q_1(\cdot|\mathbf{x}))+H(q_2(\cdot|\mathbf{x}))+\int_{arPhi}q_2(\phi|\mathbf{x})\left(\int_{\mathcal{U}}q_1(\mathbf{u}|\mathbf{x})\log p(\mathbf{x},\mathbf{u},\phi)d\mathbf{u}
ight)d\phi$$

TPS Matias Vera Modelos Gráficos 18 / 35

Planteo del problema

Se buscan q_1 y q_2 que maximicen

ELBO(q)

$$=H(q_1(\cdot|\mathbf{x}))+H(q_2(\cdot|\mathbf{x}))+\int_{\mathcal{U}}q_1(\mathbf{u}|\mathbf{x})\left(\int_{\Phi}q_2(\phi|\mathbf{x})\log p(\mathbf{x},\mathbf{u},\phi)d\phi\right)d\mathbf{u}$$

$$=H(q_1(\cdot|\mathbf{x}))+H(q_2(\cdot|\mathbf{x}))+\int_{\varPhi}q_2(\phi|\mathbf{x})\left(\int_{\mathcal{U}}q_1(\mathbf{u}|\mathbf{x})\log p(\mathbf{x},\mathbf{u},\phi)d\mathbf{u}\right)d\phi$$

Resolución Iterativa

Se simplificará el problema resolviéndolo de forma iterativa. Definimos

$$E_1(\mathbf{x}, \mathbf{u}) = \int_{\Phi} q_2(\phi|\mathbf{x}) \log p(\mathbf{x}, \mathbf{u}, \phi) d\phi \equiv f(q_2)$$

$$E_2(\mathbf{x}, \phi) = \int_{\mathcal{U}} q_1(\mathbf{u}|\mathbf{x}) \log p(\mathbf{x}, \mathbf{u}, \phi) d\mathbf{u} \equiv f(q_1)$$

TPS Matias Vera Modelos Gráficos 18 / 35

Problemas

$$egin{aligned} q_1(\cdot|\mathbf{x}) &= rg \max_{q_1} \int_{\mathcal{U}} q_1(\mathbf{u}|\mathbf{x}) \log rac{\mathrm{e}^{E_1(\mathbf{x},\mathbf{u})}}{q_1(\mathbf{u}|\mathbf{x})} d\mathbf{u} \ q_2(\cdot|\mathbf{x}) &= rg \max_{q_2} \int_{arphi} q_2(\mathbf{u}|\mathbf{x}) \log rac{\mathrm{e}^{E_2(\mathbf{x},\phi)}}{q_2(\phi|\mathbf{x})} d\phi \end{aligned}$$

TPS Matias Vera Modelos Gráficos 19 / 35

Problemas

$$egin{aligned} q_1(\cdot|\mathbf{x}) &= rg \max_{q_1} \int_{\mathcal{U}} q_1(\mathbf{u}|\mathbf{x}) \log rac{\mathrm{e}^{E_1(\mathbf{x},\mathbf{u})}}{q_1(\mathbf{u}|\mathbf{x})} d\mathbf{u} \ q_2(\cdot|\mathbf{x}) &= rg \max_{q_2} \int_{arPhi} q_2(\mathbf{u}|\mathbf{x}) \log rac{\mathrm{e}^{E_2(\mathbf{x},\phi)}}{q_2(\phi|\mathbf{x})} d\phi \end{aligned}$$

Soluciones

La solución consiste en iterar entre

$$q_1(\mathbf{u}|\mathbf{x}) \propto e^{E_1(\mathbf{x},\mathbf{u})}, \qquad q_2(\phi|\mathbf{x}) \propto e^{E_2(\mathbf{x},\phi)}$$

TPS Matias Vera Modelos Gráficos 19 / 35

Problemas

$$egin{aligned} q_1(\cdot|\mathbf{x}) &= rg \max_{q_1} \int_{\mathcal{U}} q_1(\mathbf{u}|\mathbf{x}) \log rac{e^{E_1(\mathbf{x},\mathbf{u})}}{q_1(\mathbf{u}|\mathbf{x})} d\mathbf{u} \ q_2(\cdot|\mathbf{x}) &= rg \max_{q_2} \int_{\Phi} q_2(\mathbf{u}|\mathbf{x}) \log rac{e^{E_2(\mathbf{x},\phi)}}{q_2(\phi|\mathbf{x})} d\phi \end{aligned}$$

Soluciones

La solución consiste en iterar entre

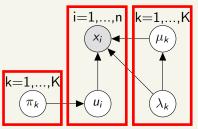
$$q_1(\mathbf{u}|\mathbf{x}) \propto e^{E_1(\mathbf{x},\mathbf{u})}, \qquad q_2(\phi|\mathbf{x}) \propto e^{E_2(\mathbf{x},\phi)}$$

Sobre el ELBO

$$\begin{aligned} \mathsf{ELBO}(q) &= \log p(\mathbf{x}) - \mathsf{KL}\left(q(\cdot|\mathbf{x}) \| p(\cdot|\mathbf{x})\right) \leq \log p(\mathbf{x}) \\ \mathsf{ELBO}(q) &= \mathbb{E}_q \left[\log p(\mathbf{x}|\mathbf{z}) | \mathbf{x}\right] - \mathsf{KL}\left(q(\cdot|\mathbf{x}) \| p(\cdot)\right) \leq \mathbb{E}_q \left[\log p(\mathbf{x}|\mathbf{z}) | \mathbf{x}\right] \end{aligned}$$

TPS Matias Vera Modelos Gráficos 19 / 35

Gaussian Variational Bayes



Modelo

$$p(\mathbf{x},\mathbf{u},\pi,\lambda,\mu)=p(\pi)\left(\prod_{k=1}^K p(\lambda_k)p(\mu_k|\lambda_k)\right)\left(\prod_{i=1}^n P(u_i|\pi)p(x_i|u_i,\mu,\lambda)\right)$$

con

$$\pi \sim \mathsf{Dir}(\alpha), \qquad \lambda_k \sim \Gamma(\nu, \beta), \qquad \mu_k | \lambda_k \sim \mathcal{N}(m, (\delta \lambda_k)^{-1})$$
$$u | \pi \sim \mathsf{Cat}(\pi), \qquad x | u, \mu, \lambda \sim \mathcal{N}(\mu_u, \lambda_u^{-1})$$

TPS Matias Vera Modelos Gráficos 20 / 35

Gaussian Variational Bayes

Mean field approximation

Se aproxima $q(\mathbf{u}, \pi, \lambda, \mu | \mathbf{x}) = Q_1(\mathbf{u} | \mathbf{x}) q_2(\pi, \lambda, \mu | \mathbf{x})$ y luego

$$E_{1}(\mathbf{x}, \mathbf{u}) = \cot + \sum_{i=1}^{n} \int q_{2}(\pi | \mathbf{x}) \log P(z_{i} | \pi) d\pi$$

$$+ \sum_{i=1}^{n} \int \int q_{2}(\mu, \lambda | \mathbf{x}) \log p(x_{i} | z_{i}, \mu, \lambda) d\mu d\lambda$$

$$E_{2}(\mathbf{x}, \pi, \lambda, \mu) = \log p(\pi) + \sum_{k=1}^{K} \log p(\lambda_{k}) + \sum_{k=1}^{K} \log p(\mu_{k} | \lambda_{k})$$

$$+ \sum_{i=1}^{n} \sum_{k=1}^{K} Q_{1}(u_{i} = k | \mathbf{x}) \log P(u_{i} = k | \pi)$$

$$+ \sum_{i=1}^{n} \sum_{k=1}^{K} Q_{1}(u_{i} = k | \mathbf{x}) \log p(x_{i} | u_{i} = k, \mu, \lambda)$$

TPS Matias Vera Modelos Gráficos 21 / 35

Gaussian Variational Bayes

Cómputo de $q_2(\pi, \lambda, \mu|\mathbf{x})$

Lo primero a notar es la factorización. Sea $\gamma_{i,k} = Q_1(u_i = k|\mathbf{x})$, luego

$$q_2(\pi, \lambda, \mu | \mathbf{x}) \propto p(\pi) \left(\prod_{k=1}^K p(\lambda_k) p(\mu_k | \lambda_k) \right) \prod_{k=1}^K e^{\sum_{i=1}^n \gamma_{i,k} [\log \pi_k + \log \mathcal{N}_{x_i}(\mu_k, \lambda_k)]}$$

Luego
$$q_2(\pi, \lambda, \mu | \mathbf{x}) = q_2(\pi) \prod_{k=1}^K q_2(\mu_k, \lambda_k)$$
.

TPS Matias Vera Modelos Gráficos 22 / 35

Cómputo de $q_2(\pi, \lambda, \mu | \mathbf{x})$

Lo primero a notar es la factorización. Sea $\gamma_{i,k} = Q_1(u_i = k|\mathbf{x})$, luego

$$q_2(\pi, \lambda, \mu | \mathbf{x}) \propto p(\pi) \left(\prod_{k=1}^K p(\lambda_k) p(\mu_k | \lambda_k) \right) \prod_{k=1}^K e^{\sum_{i=1}^n \gamma_{i,k} [\log \pi_k + \log \mathcal{N}_{x_i}(\mu_k, \lambda_k)]}$$

Luego $q_2(\pi, \lambda, \mu | \mathbf{x}) = q_2(\pi) \prod_{k=1}^K q_2(\mu_k, \lambda_k)$.

Cómputo de $q_2(\pi|\mathbf{x})$

$$q_2(\pi|\mathbf{x}) \propto \left(\prod_{k=1}^K \pi_k^{lpha_k-1} e^{\sum_{i=1}^n \gamma_{i,k} \log \pi_k}\right) \mathbb{1} \left\{\sum_{k=1}^K \pi_k = 1, \pi_k \geq 0\right\}$$

con lo cual $\pi | \mathbf{x} \sim \text{Dir}([\alpha_1 + \sum_{i=1}^n \gamma_{i,1}, \cdots, \alpha_K + \sum_{i=1}^n \gamma_{i,K}])$

TPS Matias Vera Modelos Gráficos 22 / 35

Cómputo de $q_2(\mu_k, \lambda_k | \mathbf{x})$

$$q_{2}(\mu_{k}, \lambda_{k}|\mathbf{x})$$

$$\propto \underbrace{\lambda_{k}^{\nu-1} e^{-\beta \lambda_{k}} \mathbb{1}\{\lambda_{k} > 0\}}_{\propto p(\lambda_{k})} \underbrace{\lambda_{k}^{1/2} e^{\frac{-\delta \lambda_{k}(\mu_{k} - m)^{2}}{2}}}_{\propto p(\mu_{k}|\lambda_{k})} \lambda_{k}^{\frac{1}{2} \sum_{i=1}^{n} \gamma_{i,k}} e^{\frac{-\lambda_{k} \sum_{i=1}^{n} \gamma_{i,k}(x_{i} - \mu_{k})^{2}}{2}}$$

con lo cual
$$\mu_k | \lambda_k, \mathbf{x} \sim \mathcal{N}\left(\frac{\delta m + \sum_{i=1}^n \gamma_{i,k} x_i}{\delta + \sum_{i=1}^n \gamma_{i,k}}, \frac{1}{\lambda_k \left(\delta + \sum_{i=1}^n \gamma_{i,k}\right)}\right) \mathbf{y}$$

$$\lambda_k | \mathbf{x} \sim \Gamma\left(\nu + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \gamma_{i,k}, \beta + \frac{\delta m^2}{2} + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \gamma_{i,k} x_i^2 - \frac{(\delta m + \sum_{i=1}^n \gamma_{i,k} x_i)^2}{2(\delta + \sum_{i=1}^n \gamma_{i,k})}\right)$$

TPS Matias Vera Modelos Gráficos 23 / 35

Cómputo de $q_2(\mu_k, \lambda_k | \mathbf{x})$

$$q_2(\mu_k, \lambda_k | \mathbf{x})$$

$$\propto \underbrace{\lambda_k^{\nu-1} e^{-\beta \lambda_k} \mathbb{1}\{\lambda_k > 0\}}_{\propto \rho(\lambda_k)} \underbrace{\lambda_k^{1/2} e^{\frac{-\delta \lambda_k (\mu_k - m)^2}{2}}}_{\propto \rho(\mu_k | \lambda_k)} \lambda_k^{\frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \gamma_{i,k}} e^{\frac{-\lambda_k \sum_{i=1}^n \gamma_{i,k} (x_i - \mu_k)^2}{2}}$$

con lo cual
$$\mu_k | \lambda_k, \mathbf{x} \sim \mathcal{N}\left(\frac{\delta m + \sum_{i=1}^n \gamma_{i,k} x_i}{\delta + \sum_{i=1}^n \gamma_{i,k}}, \frac{1}{\lambda_k \left(\delta + \sum_{i=1}^n \gamma_{i,k}\right)}\right) \mathbf{y}$$

$$\lambda_k | \mathbf{x} \sim \Gamma\left(\nu + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \gamma_{i,k}, \beta + \frac{\delta m^2}{2} + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \gamma_{i,k} x_i^2 - \frac{(\delta m + \sum_{i=1}^n \gamma_{i,k} x_i)^2}{2(\delta + \sum_{i=1}^n \gamma_{i,k})}\right)$$

Estadísticos Suficientes

Basta con computar
$$N_k = \sum_{i=1}^n \gamma_{i,k}$$
, $f_k = \sum_{i=1}^n \gamma_{i,k} x_i$ y $s_k = \sum_{i=1}^n \gamma_{i,k} x_i^2$.

TPS Matias Vera Modelos Gráficos 23 / 35

Propiedad de las distribuciones Gamma y Dirichlett

Sean $\lambda \sim \Gamma(\nu, \beta)$ y $\pi \sim \text{Dir}(\alpha)$, se puede demostrar que

•
$$\mathbb{E}[\log \lambda] = \psi(\nu) - \log(\beta)$$

•
$$\mathbb{E}[\log \pi_k] = \psi(\alpha_k) - \psi\left(\sum_{c=1}^K \alpha_c\right)$$

donde $\psi(\cdot)$ es la función digamma $\psi(z) = \frac{\Gamma'(z)}{\Gamma(z)}$.

TPS Matias Vera Modelos Gráficos 24 / 35

Propiedad de las distribuciones Gamma y Dirichlett

Sean $\lambda \sim \Gamma(\nu, \beta)$ y $\pi \sim \text{Dir}(\alpha)$, se puede demostrar que

•
$$\mathbb{E}[\log \lambda] = \psi(\nu) - \log(\beta)$$

•
$$\mathbb{E}[\log \pi_k] = \psi(\alpha_k) - \psi\left(\sum_{c=1}^K \alpha_c\right)$$

donde $\psi(\cdot)$ es la función digamma $\psi(z) = \frac{\Gamma'(z)}{\Gamma(z)}$.

Cómputo de $Q_1(\mathbf{u}|\mathbf{x})$

Lo primero a notar es la independencia

$$egin{aligned} Q_1(\mathbf{u}|\mathbf{x}) &\propto \prod_{i=1}^n e^{\int q_2(\pi|\mathbf{x}) \log P(u_i|\pi) d\pi + \int \int q_2(\mu,\lambda|\mathbf{x}) \log P(x_i|u_i,\mu,\lambda) d\mu d\lambda} \ &= \prod_{i=1}^n Q_1(u_i|\mathbf{x}) \end{aligned}$$

TPS Matias Vera Modelos Gráficos 24 / 35

Cómputo de $Q_1(u_i = k|\mathbf{x})$

Sean los parámetros de q_2 definidos como $\pi | \mathbf{x} \sim \text{Dir}(\alpha^*)$, $\mu_k | \lambda_k, \mathbf{x} \sim \mathcal{N}\left(m_k^*, (\delta_k^* \lambda_k)^{-1}\right)$ y $\lambda_k | \mathbf{x} \sim \Gamma\left(\nu_k^*, \beta_k^*\right)$. Luego

$$Q_1(u_i=k|\mathbf{x})\propto e^{\psi(lpha_k^*)-\psi\left(\sum_{c=1}^Klpha_c^*
ight)+rac{\psi(
u_k^*)-\log(eta_k^*)}{2}-rac{1}{2}\mathbb{E}_{q_2}[\lambda_k(x_i-\mu_k)^2]}$$

con

$$\begin{split} \mathbb{E}_{q_2}[\lambda_k(x_i - \mu_k)^2] &= \mathbb{E}_{q_2}[\lambda_k \mathbb{E}_{q_2}[(x_i - \mu_k)^2 | \lambda_k]] \\ &= \mathbb{E}_{q_2}[\lambda_k (\mathbb{E}_{q_2}[(\mu_k - m_k^*)^2 | \lambda_k] + (m_k^* - x_i)^2)] \\ &= \frac{1}{\delta_k^*} + \frac{\nu_k^*}{\beta_k^*} (m_k^* - x_i)^2 \end{split}$$

Finalmente

$$Q_1(u_i = k | \mathbf{x}) \propto e^{\psi(\alpha_k^*) - \psi(\sum_{c=1}^K \alpha_c^*) + \frac{\psi(\nu_k^*) - \log(\beta_k^*)}{2} - \frac{1}{2\delta_k^*} - \frac{\nu_k^*}{2\beta_k^*} (m_k^* - x_i)^2}$$

TPS Matias Vera Modelos Gráficos 25 / 35

Solución: Inicializar $\gamma_{i,k}$ con EM e iterar entre

 \bullet Calcular $(\alpha_k^*, m_k^*, \delta_k^*, \nu_k^*, \beta_k^*)$ a partir de $\gamma_{i,k}$ como

$$\alpha_k^* = \alpha_k + \sum_{i=1}^n \gamma_{i,k}, \quad m_k^* = \frac{\delta m + \sum_{i=1}^n \gamma_{i,k} x_i}{\delta + \sum_{i=1}^n \gamma_{i,k}}$$

$$\delta_k^* = \delta + \sum_{i=1}^n \gamma_{i,k}, \quad \nu_k^* = \nu + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \gamma_{i,k}$$

$$\beta_k^* = \beta + \frac{\delta m^2}{2} + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \gamma_{i,k} x_i^2 - \frac{(\delta m + \sum_{i=1}^n \gamma_{i,k} x_i)^2}{2(\delta + \sum_{i=1}^n \gamma_{i,k})}$$

• Calcular $\gamma_{i,k} = \frac{\rho_{i,k}}{\sum_{c=1}^K \rho_{i,c}}$ a partir de $(\alpha^*, m_k^*, \delta_k^*, \nu_k^*, \beta_k^*)$ como

$$\rho_{i,k} = e^{\psi(\alpha_k^*) - \psi(\sum_{c=1}^K \alpha_c^*) + \frac{\psi(\nu_k^*) - \log(\beta_k^*)}{2} - \frac{1}{2\delta_k^*} - \frac{\nu_k^*}{2\beta_k^*} (m_k^* - x_i)^2}$$

TPS Matias Vera Modelos Gráficos 26 / 35

Predictiva: Es una mezcla!

$$\begin{aligned} p(\mathbf{x}_{\mathsf{test}} | \mathcal{D}_n) &= \mathbb{E}[p(\mathbf{x}_{\mathsf{test}} | \phi) | \mathcal{D}_n] \\ &= \sum_{k=1}^K \mathbb{E}[\pi_k | \mathcal{D}_n] \cdot \mathbb{E}\left[\left. \sqrt{\frac{\lambda_k}{2\pi}} e^{\frac{-\lambda_k}{2}(\mathbf{x}_{\mathsf{test}} - \mu_k)^2} \right| \mathcal{D}_n \right] \\ &= \sum_{k=1}^K \frac{\alpha_k^*}{\sum_{c=1}^K \alpha_c^*} \cdot \tilde{p}(\mathbf{x}_{\mathsf{test}} | \mathcal{D}_n) \end{aligned}$$

TPS Matias Vera Modelos Gráficos 27 / 35

Predictiva: Es una mezcla!

$$p(x_{\text{test}}|\mathcal{D}_n) = \mathbb{E}[p(x_{\text{test}}|\phi)|\mathcal{D}_n]$$

$$= \sum_{k=1}^K \mathbb{E}[\pi_k|\mathcal{D}_n] \cdot \mathbb{E}\left[\left.\sqrt{\frac{\lambda_k}{2\pi}}e^{\frac{-\lambda_k}{2}(x_{\text{test}}-\mu_k)^2}\right|\mathcal{D}_n\right]$$

$$= \sum_{k=1}^K \frac{\alpha_k^*}{\sum_{c=1}^K \alpha_c^*} \cdot \tilde{p}(x_{\text{test}}|\mathcal{D}_n)$$

Normal-Gamma Distribution

$$\begin{split} 1 &= \int_0^\infty \int_{-\infty}^\infty \frac{\beta^\nu}{\Gamma(\nu)} \lambda^{\nu-1} \mathrm{e}^{-\beta \lambda} \sqrt{\frac{\delta \lambda}{2\pi}} \mathrm{e}^{\frac{-\delta \lambda}{2} (\mu-m)^2} d\mu d\lambda \\ &\int_0^\infty \int_{-\infty}^\infty \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \lambda^{\nu-\frac{1}{2}} \mathrm{e}^{\frac{-\delta \lambda}{2} (\mu-m)^2 - \lambda \beta} d\mu d\lambda = \frac{\Gamma(\nu)}{\beta^\nu \sqrt{\delta}} \end{split}$$

TPS Matias Vera Modelos Gráficos 27 / 35

Calculo auxiliar de las densidades a mezclar

$$\mathbb{E}\left[\sqrt{\frac{\lambda_{k}}{2\pi}}e^{\frac{-\lambda_{k}}{2}(\mathsf{x}_{\mathsf{test}}-\mu_{k})^{2}}\middle|\mathcal{D}_{n}\right]$$

$$=\int_{0}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\sqrt{\frac{\lambda}{2\pi}}e^{\frac{-\lambda}{2}(\mathsf{x}_{\mathsf{test}}-\mu)^{2}}\frac{\beta_{k}^{*\nu_{k}^{*}}\sqrt{\delta_{k}^{*}}}{\sqrt{2\pi}\Gamma(\nu_{k}^{*})}\lambda^{\nu_{k}^{*}-\frac{1}{2}}e^{\frac{-\delta_{k}^{*}\lambda}{2}(\mu-m_{k}^{*})^{2}-\lambda\beta_{k}^{*}}d\mu d\lambda$$

$$\propto\int_{0}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\sqrt{\frac{1}{2\pi}}\lambda^{\nu_{k}^{*}}e^{\frac{-\lambda}{2}(\mathsf{x}_{\mathsf{test}}-\mu)^{2}-\frac{\delta_{k}^{*}\lambda}{2}(\mu-m_{k}^{*})^{2}-\lambda\beta_{k}^{*}}d\mu d\lambda$$

TPS Matias Vera Modelos Gráficos 28 / 35

Calculo auxiliar de las densidades a mezclar

$$\mathbb{E}\left[\left|\sqrt{\frac{\lambda_{k}}{2\pi}}e^{\frac{-\lambda_{k}}{2}(x_{\text{test}}-\mu_{k})^{2}}\right|\mathcal{D}_{n}\right]$$

$$=\int_{0}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\sqrt{\frac{\lambda}{2\pi}}e^{\frac{-\lambda}{2}(x_{\text{test}}-\mu)^{2}}\frac{\beta_{k}^{*\nu_{k}^{*}}\sqrt{\delta_{k}^{*}}}{\sqrt{2\pi}\Gamma(\nu_{k}^{*})}\lambda^{\nu_{k}^{*}-\frac{1}{2}}e^{\frac{-\delta_{k}^{*}\lambda}{2}(\mu-m_{k}^{*})^{2}-\lambda\beta_{k}^{*}}d\mu d\lambda$$

$$\propto\int_{0}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\sqrt{\frac{1}{2\pi}}\lambda^{\nu_{k}^{*}}e^{\frac{-\lambda}{2}(x_{\text{test}}-\mu)^{2}-\frac{\delta_{k}^{*}\lambda}{2}(\mu-m_{k}^{*})^{2}-\lambda\beta_{k}^{*}}d\mu d\lambda$$

Sustitución dentro de la integral

$$ilde{
u} =
u_k^* + rac{1}{2}, \qquad ilde{\delta} = \delta_k^* + 1, \qquad ilde{m} = rac{x_{\mathsf{test}} + \delta_k^* m_k^*}{\delta_k^* + 1}$$
 $ilde{eta} = eta_k^* + rac{\delta_k^* (x_{\mathsf{test}} - m_k^*)^2}{2(\delta_k^* + 1)}$

TPS Matias Vera Modelos Gráficos 28 / 35

Calculo auxiliar de las densidades a mezclar

$$\mathbb{E}\left[\left.\sqrt{rac{\lambda_k}{2\pi}}e^{rac{-\lambda_k}{2}(\mathsf{x}_{\mathsf{test}}-\mu_k)^2}
ight|\mathcal{D}_n
ight] \propto \left(eta_k^* + rac{\delta_k^*(\mathsf{x}_{\mathsf{test}}-m_k^*)^2}{2(\delta_k^*+1)}
ight)^{-(
u_k^*+1/2)} \ \propto \left(1 + rac{\delta_k^*
u_k^*}{(\delta_k^*+1)eta_k^*} rac{(\mathsf{x}_{\mathsf{test}}-m_k^*)^2}{2
u_k^*}
ight)^{-rac{2
u_k^*+1}{2}}$$

TPS Matias Vera Modelos Gráficos 29 / 35

Calculo auxiliar de las densidades a mezclar

$$\mathbb{E}\left[\left.\sqrt{\frac{\lambda_{k}}{2\pi}}e^{\frac{-\lambda_{k}}{2}(x_{\text{test}}-\mu_{k})^{2}}\right|\mathcal{D}_{n}\right] \propto \left(\beta_{k}^{*} + \frac{\delta_{k}^{*}(x_{\text{test}}-m_{k}^{*})^{2}}{2(\delta_{k}^{*}+1)}\right)^{-(\nu_{k}^{*}+1/2)}$$

$$\propto \left(1 + \frac{\delta_{k}^{*}\nu_{k}^{*}}{(\delta_{k}^{*}+1)\beta_{k}^{*}} \frac{(x_{\text{test}}-m_{k}^{*})^{2}}{2\nu_{k}^{*}}\right)^{-\frac{2\nu_{k}^{*}+1}{2}}$$

Distribución t-Student Generalizada: $X \sim t(\mu, \Lambda, \nu)$ si

$$p(x) = \frac{\Gamma\left(\frac{\nu+1}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{\nu}{2}\right)} \sqrt{\frac{\Lambda}{\pi\nu}} \left(1 + \Lambda \frac{(x-\mu)^2}{\nu}\right)^{-\frac{\nu+1}{2}}$$

TPS Matias Vera Modelos Gráficos 29 / 35

Calculo auxiliar de las densidades a mezclar

$$\mathbb{E}\left[\left.\sqrt{\frac{\lambda_{k}}{2\pi}}e^{\frac{-\lambda_{k}}{2}(x_{\text{test}}-\mu_{k})^{2}}\right|\mathcal{D}_{n}\right] \propto \left(\beta_{k}^{*} + \frac{\delta_{k}^{*}(x_{\text{test}}-m_{k}^{*})^{2}}{2(\delta_{k}^{*}+1)}\right)^{-(\nu_{k}^{*}+1/2)}$$

$$\propto \left(1 + \frac{\delta_{k}^{*}\nu_{k}^{*}}{(\delta_{k}^{*}+1)\beta_{k}^{*}} \frac{(x_{\text{test}}-m_{k}^{*})^{2}}{2\nu_{k}^{*}}\right)^{-\frac{2\nu_{k}^{*}+1}{2}}$$

Distribución t-Student Generalizada: $X \sim t(\mu, \Lambda, \nu)$ si

$$p(x) = \frac{\Gamma\left(\frac{\nu+1}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{\nu}{2}\right)} \sqrt{\frac{\Lambda}{\pi\nu}} \left(1 + \Lambda \frac{(x-\mu)^2}{\nu}\right)^{-\frac{\nu+1}{2}}$$

Predictiva

$$p(x_{\mathsf{test}}|\mathcal{D}_n) = \sum_{k=1}^K \frac{\alpha_k^*}{\sum_{c=1}^K \alpha_c^*} \cdot t \left(m_k^*, \frac{\delta_k^* \nu_k^*}{(\delta_k^* + 1)\beta_k^*}, 2\nu_k^* \right)$$

TPS Matias Vera Modelos Gráficos 29 / 35

Outline

- Inferencia Bayesiana
- Naive Bayes
- Multinomial Naive Bayes
- Wariational Bayes
- 5 Técnicas de Muestreo

TPS Matias Vera Modelos Gráficos 30 / 3

Monte-Carlo

Ley de los grandes números

Sean X_i variables aleatorias con esperanza finita $\mathbb{E}[X]$, entonces $\frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} X_i \xrightarrow{n \to \infty} \mathbb{E}[X]$ (w.p.1).

TPS Matias Vera Modelos Gráficos 31 / 35

Monte-Carlo

Ley de los grandes números

Sean X_i variables aleatorias con esperanza finita $\mathbb{E}[X]$, entonces $\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}X_i\xrightarrow{n\to\infty}\mathbb{E}[X]$ (w.p.1).

Método de Monte-Carlo

Sean X_i variables aleatorias i.i.d con pdf p(x) o pmf P(x), entonces

$$\int_{\mathbb{R}} g(x) \rho(x) dx \approx \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} g(X_i), \qquad \sum_{x \in \mathbb{A}} g(x) P(x) \approx \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} g(X_i)$$

TPS Matias Vera Modelos Gráficos 31/35

Monte-Carlo

Ley de los grandes números

Sean X_i variables aleatorias con esperanza finita $\mathbb{E}[X]$, entonces $\frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} X_i \xrightarrow{n \to \infty} \mathbb{E}[X]$ (w.p.1).

Método de Monte-Carlo

Sean X_i variables aleatorias i.i.d con pdf p(x) o pmf P(x), entonces

$$\int_{\mathbb{R}} g(x)p(x)dx \approx \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} g(X_i), \qquad \sum_{x \in \mathbb{A}} g(x)P(x) \approx \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} g(X_i)$$

Algunas variantes interesantes

- $\int_a^b g(x)dx \approx \frac{b-a}{n} \sum_{i=1}^n g(X_i) \operatorname{con} X_i \sim \mathcal{U}(a,b).$
- $\int_a^b g(x)dx \approx \frac{1}{kn} \sum_{i=1}^n \mathbb{1}\{a < X_i < b\}$ con X_i de pdf $k \cdot g(x)$.
- $\int_{\mathbb{R}} g(x)p(x)dx \approx \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} \frac{p(X_i)}{q(X_i)}g(X_i)$ con X_i de pdf q(x).

TPS Matias Vera Modelos Gráficos 31/35

Ideas Principales

- En lugar de obtener la distribución a posteiori, vamos a generar muestras de esta distribución.
- Vamos aproximar la predictiva por Monte-Carlo.

$$p(x_{\text{test}}|\mathcal{D}_n) \approx \frac{1}{N_s} \sum_{i=1}^{N_s} p(x_{\text{test}}|T_i)$$

TPS Matias Vera Modelos Gráficos 32 / 35

Ideas Principales

- En lugar de obtener la distribución a posteiori, vamos a generar muestras de esta distribución.
- Vamos aproximar la predictiva por Monte-Carlo.

$$p(x_{\text{test}}|\mathcal{D}_n) \approx \frac{1}{N_s} \sum_{i=1}^{N_s} p(x_{\text{test}}|T_i)$$

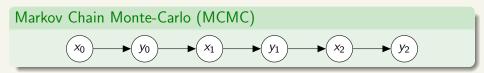
Muestreo de Gibbs

Supongamos que, debido a su complejidad, no podemos simular muestras de p(x,y); pero que si es posible generar muestras de las condicionales p(x|y) y p(y|x). El muestreo de Gibbs consiste en, a partir de un x_0 , iterar entre:

$$y_k \sim p(y|x_k), \qquad x_{k+1} \sim p(x|y_k)$$

Luego de suficientes simulaciones (resultado asintótico), el último par (x, y) estará distribuido (aproximadamente) por p(x, y).

TPS Matias Vera Modelos Gráficos 32 / 35



TPS Matias Vera Modelos Gráficos 33 / 35

Markov Chain Monte-Carlo (MCMC)

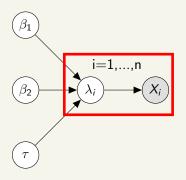


Implementaciones más sofisticadas

- Comenzar en la posición actual.
- Proponer mudarse a una nueva posición cercana a la actual.
- Septar/Rechazar la nueva posición basándose en el coherencia de la posición con los datos y distribuciones anteriores.
- Si acepta: Pasar a la nueva posición. Regresar al Paso 1.
 - De lo contrario: no moverse de la posición actual. Regrese al Paso 1.
- Oespués de una gran cantidad de iteraciones, se reportan todas las posiciones aceptadas.

TPS Matias Vera Modelos Gráficos 33 / 35

PYMC: Programación Probabilística con Monte-Carlo



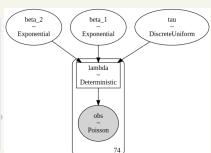
TPS Matias Vera Modelos Gráficos 34 / 35

```
import pymc as pm
import numpy as np
import matplottib.pyplot as plt

count_data = np.loadtxt("txtdata.csv")
n_count_data = len(count_data)

with pm.Model() as model:
    alpha = 1.0/count_data.mean()
    beta 1 = pm.Exponential("beta 1", alpha)
    beta 2 = pm.Exponential("beta 2", alpha)
    tau = pm.Discretelniform("tau", lower=0, upper=n_count_data - 1)
    idx = np.arange(n_count_data) # Index
    lambda = pm.Deterministic("lambda", pm.math.switch(tau > idx, beta 1, beta 2)
    observation = pm.Poisson("obs", lambda , observed=count_data)

pm.model to graphviz(model)
```



TPS Matias Vera Modelos Gráficos 35 / 35

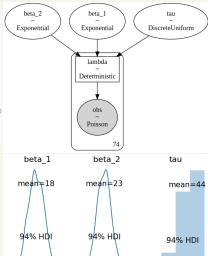
PYMC

```
import pymc as pm
import numpy as np
import matplottib.pyplot as plt
count_data = np.loadtxt("txtdata.csv")
n_count_data = len(count_data)
with pm.Model() as model:
    alpha = 1.0/count_data.mean()
    beta 1 = pm.Exponential("beta 1", alpha)
    beta 2 = pm.Exponential("beta 2", alpha)
    tau = pp.loiscretelniform("tau", lower=0, upper=n_count_data - 1)
    idx = np.arange(n_count_data) # Index
    lambda = pm.Deterministic("lambda", pm.math.switch(tau > idx, beta_1, beta_2)
    observation = pm.Poisson("obs", lambda, observed=count_data)
pm.model to graphviz(model)
```

```
beta 1_samples = trace.posterior['beta 1']
beta 2_samples = trace.posterior['beta 2']
tau_samples = trace.posterior['tau']
lambda_samples = trace.posterior['lambda']

with model:
    posterior_pred = pm.sample_posterior_predictive(trace)

pred_samples = posterior_pred.posterior_predictive['obs']
pm.plot_posterior(trace.posterior[['beta_1','beta_2','tau']],figsize=(7,4))
```



24

25

42

44

19 21

20.0.20

17.5

PS Matias Vera Modelos Gráficos 35 / 35