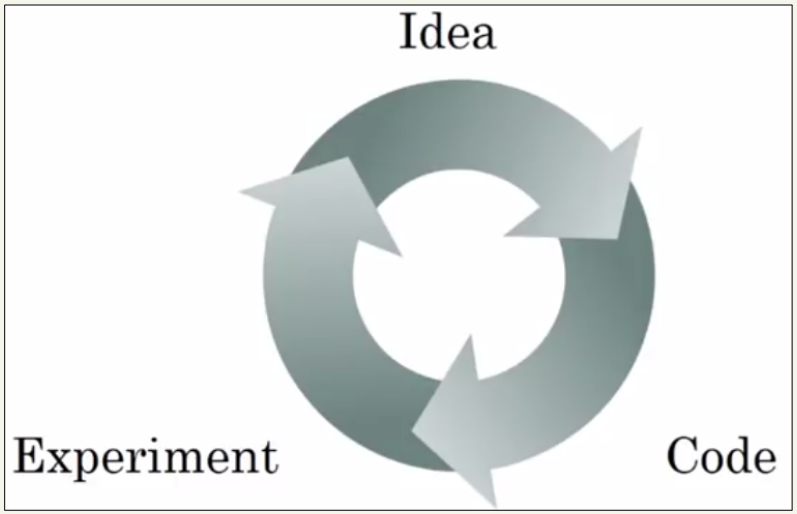
Aprendizaje no Supervisado

Taller de Procesamiento de Señales

Agenda

Aprendizaje Estadístico

- No se conoce la verdadera estadística.
- Se aprende por medio de datos.
- El buen desempeño no debe limitarse a los datos conocidos.

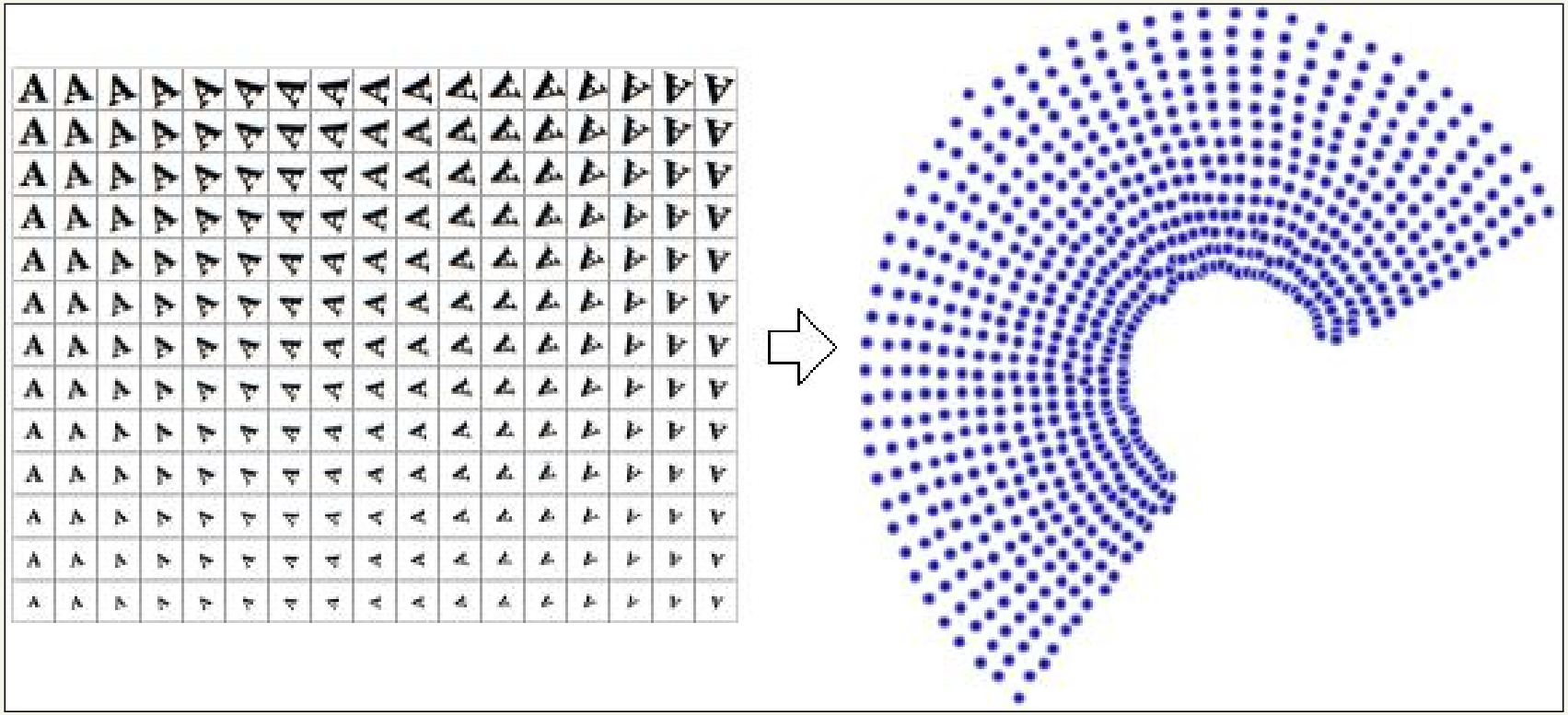


TIPOS DE APRENDIZAJES

- Aprendizaje supervisado: Cuento con pares de datos $\{(\mathbf{x}^{(i)}, y^{(i)})\}_{i=1}^{n}$.
- Aprendizaje no supervisado: Cuento solamente con datos $\{\mathbf{x}^{(i)}\}_{i=1}^{n}$.
- Aprendizaje semi-supervisado: Cuento con muchos datos no supervisados y unos pocos supervisados.

Manifold

¿Cuál es la dimensión efectiva de los datos?



Manifold

¿Cuál es la dimensión efectiva de los datos?

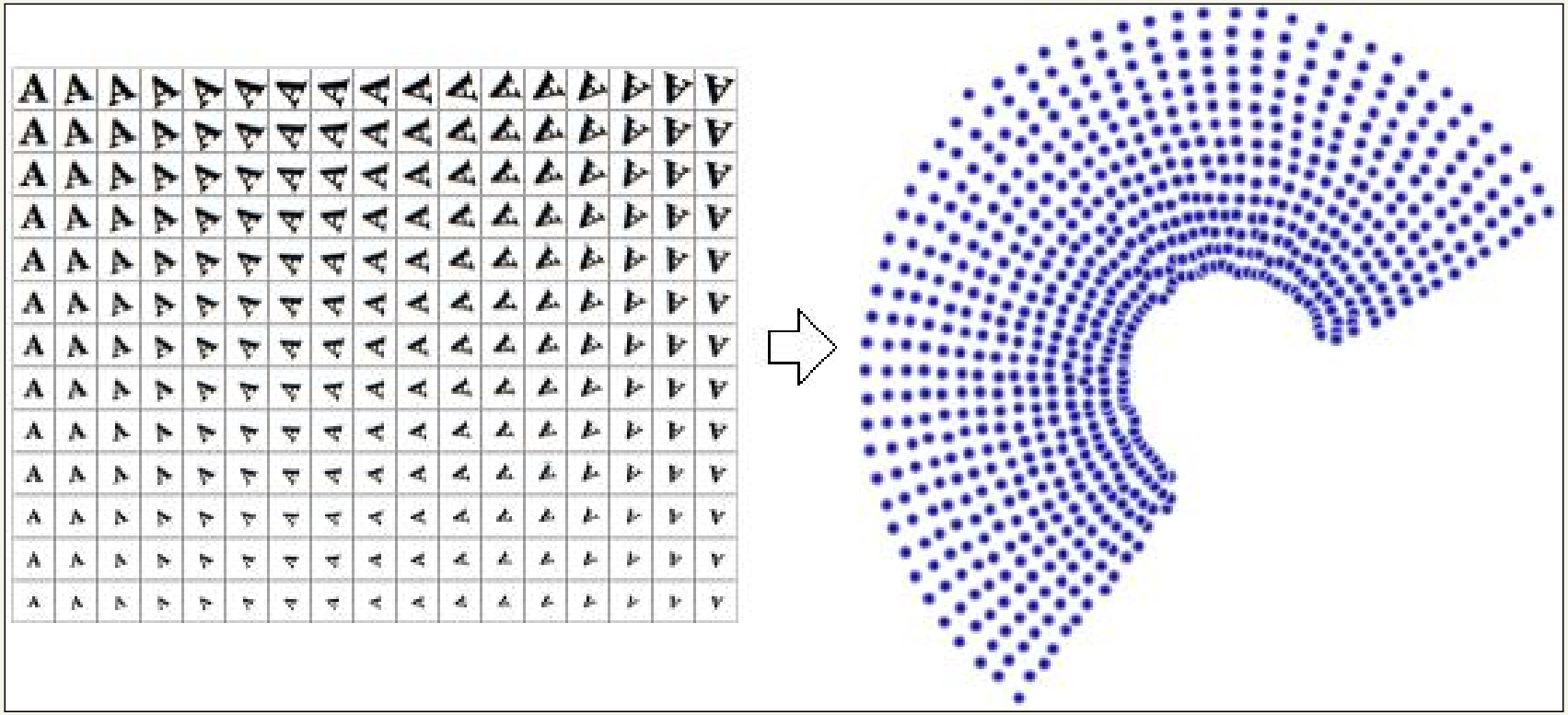
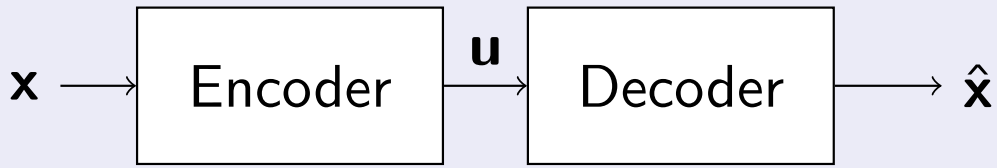


Diagrama en bloques de un Autoencoder



Manifold

¿Cuál es la dimensión efectiva de los datos?

Objetivo

Hay que entender que el objetivo no es simplemente reconstruir los datos. Sino que es reconstruir los datos a partir de una representación relevante para explicar algún fenómeno o resolver otra tarea. Si no se reconocen patrones en la naturaleza de los datos no hay aprendizaje.

Mathematical Snippets - "An unexpected bijection between the real plane and the real line" `https://www.youtube.com/watch?v=XcMZsF4vDbo`

Manifold

¿Cuál es la dimensión efectiva de los datos?

Objetivo

Hay que entender que el objetivo no es simplemente reconstruir los datos. Sino que es reconstruir los datos a partir de una representación relevante para explicar algún fenómeno o resolver otra tarea. Si no se reconocen patrones en la naturaleza de los datos no hay aprendizaje.

Cuidado!

Existen transformaciones $\mathcal{T} : \mathbb{R}^{d_x} \to \mathbb{R}$ biyectivas (googlear por ejemplo Teorema de Cantor-Schröder-Bernstein). Pero las representaciones reducidas obtenidas de esta manera pueden no ser interesantes. Hay que tener en cuenta la precisión del computo y, sobre todo, la aplicación en la que se va a utilizar.

Mathematical Snippets - "An unexpected bijection between the real plane and the real line" `https://www.youtube.com/watch?v=XcMZsF4vDbo`

Manifold

Regularización de autoencoders

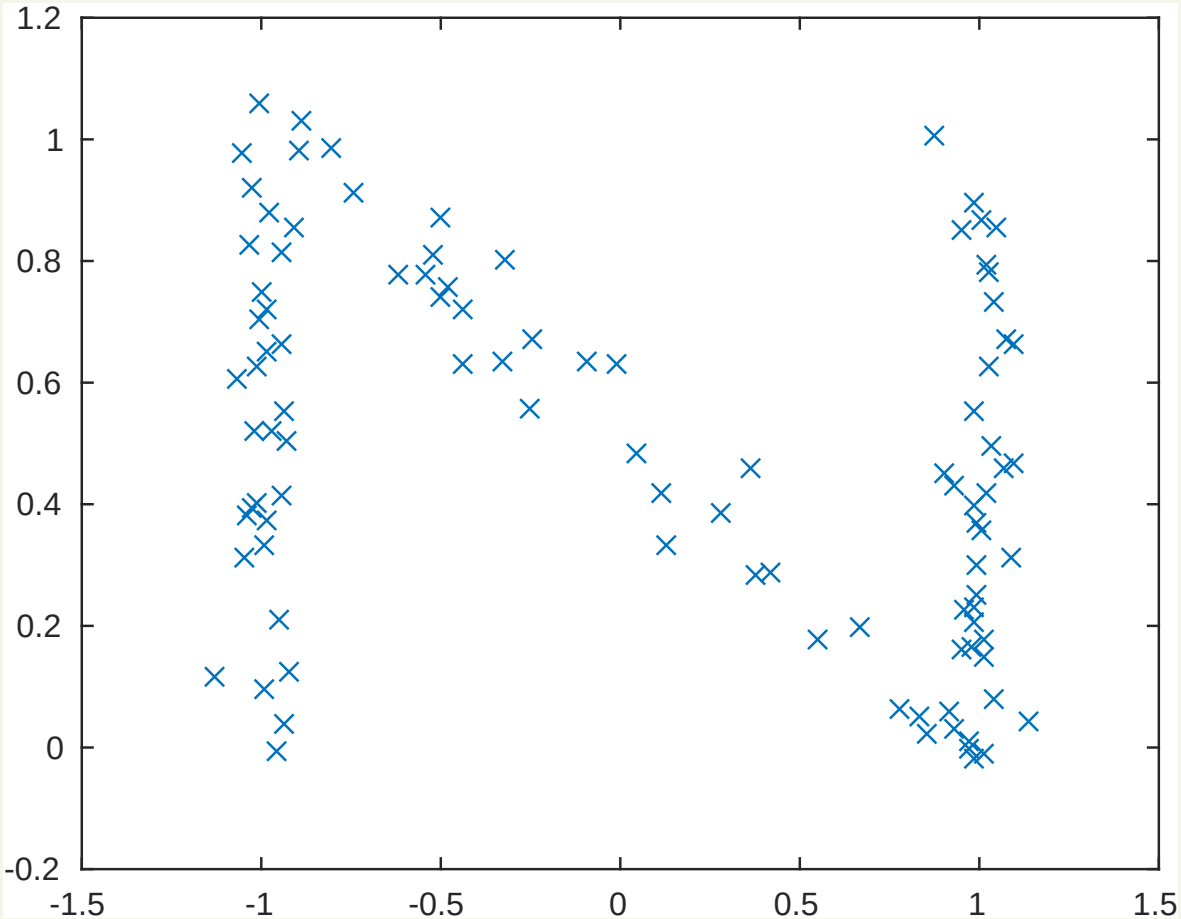
Bajo ECM para cualquier tipo de entrada	Bajo ECM para los sets de entrenamiento y testeo	Bajo ECM solamente en el set de entrenamiento
		

Objetivo

No quiero memorizar el conjunto de datos ni aprender una transformación biyectiva: Busco aprender el manifold. La regularización en un autoencoder busca balancear estos conceptos.

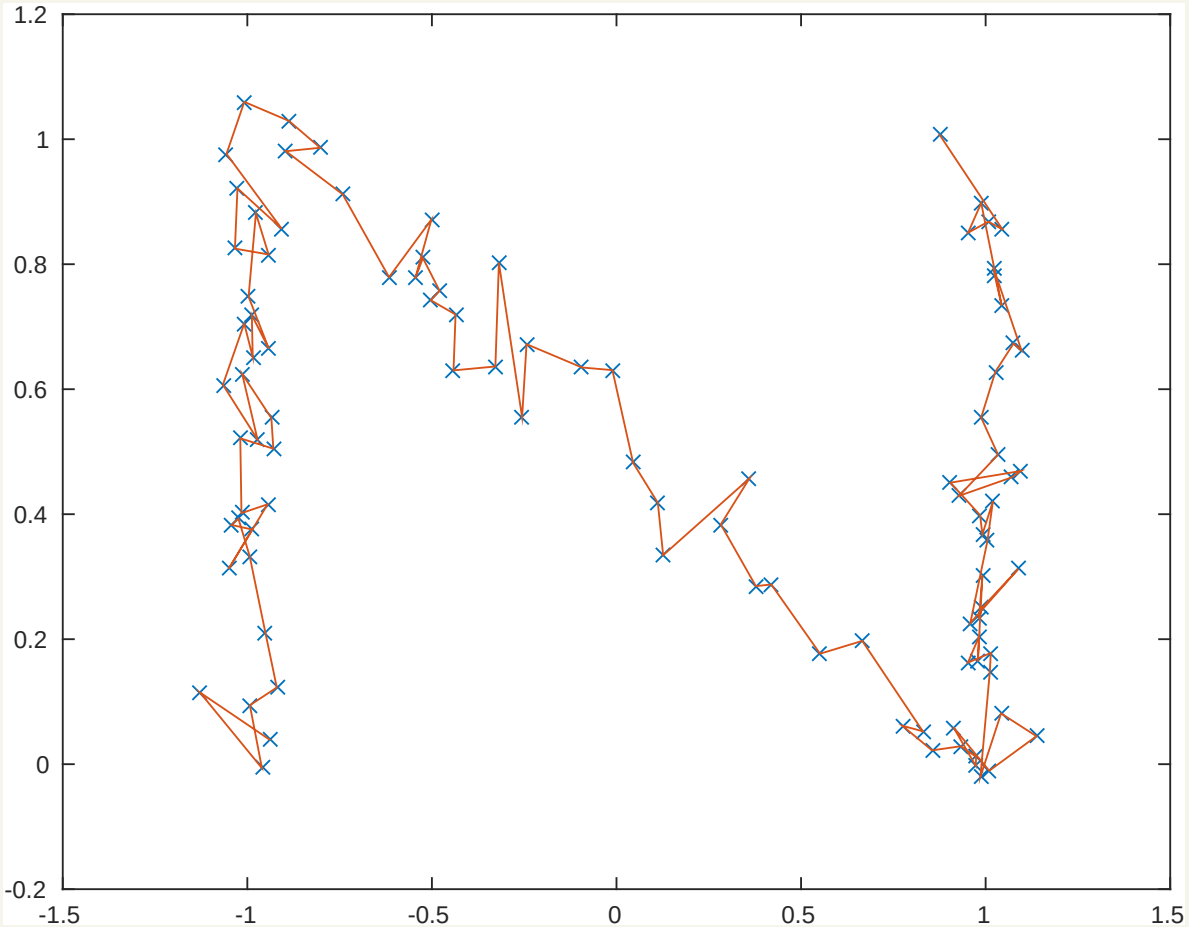
Manifold

Regularización de autoencoders



Manifold

Regularización de autoencoders



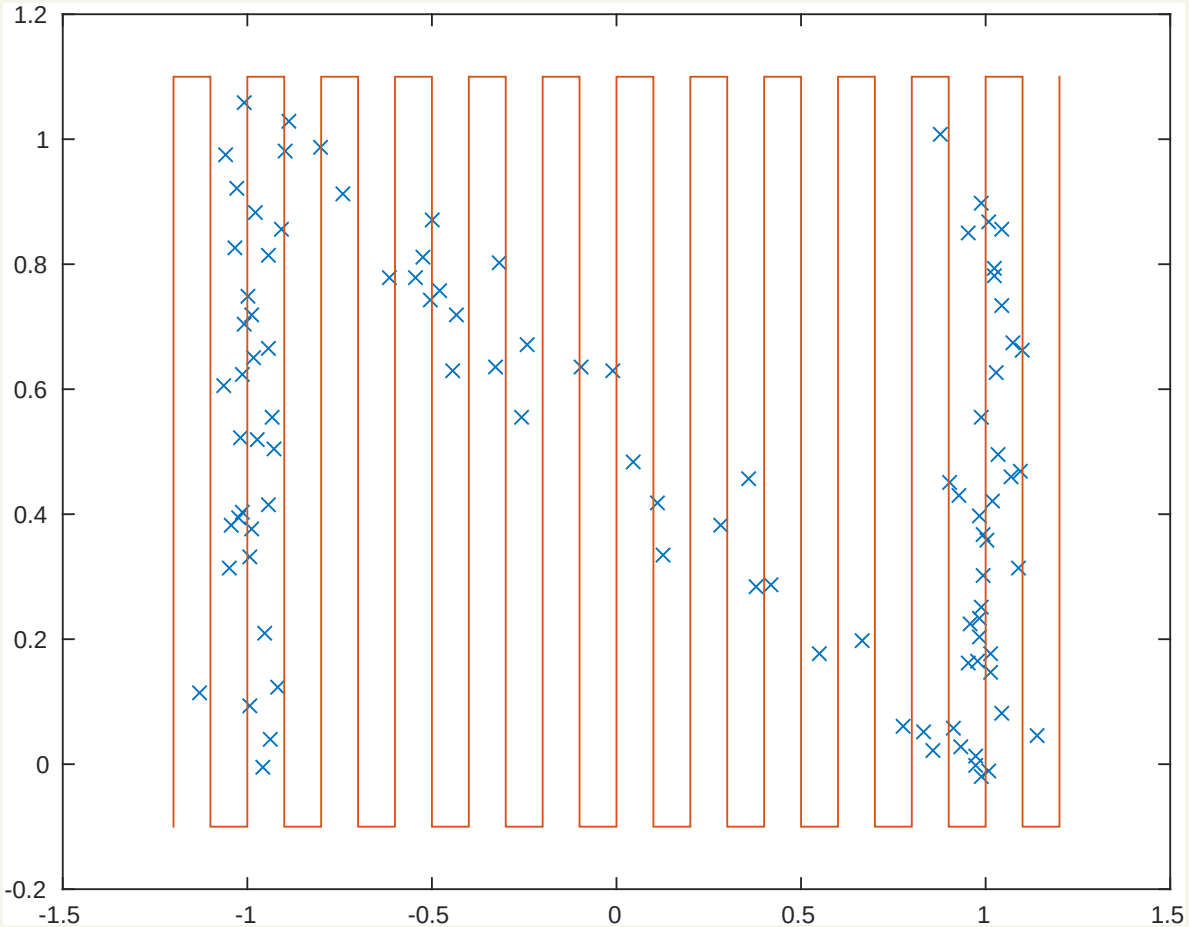
OVERFITTING

No hay aprendizaje, se están memorizando las muestras.

Necesito regularización

Manifold

Regularización de autoencoders



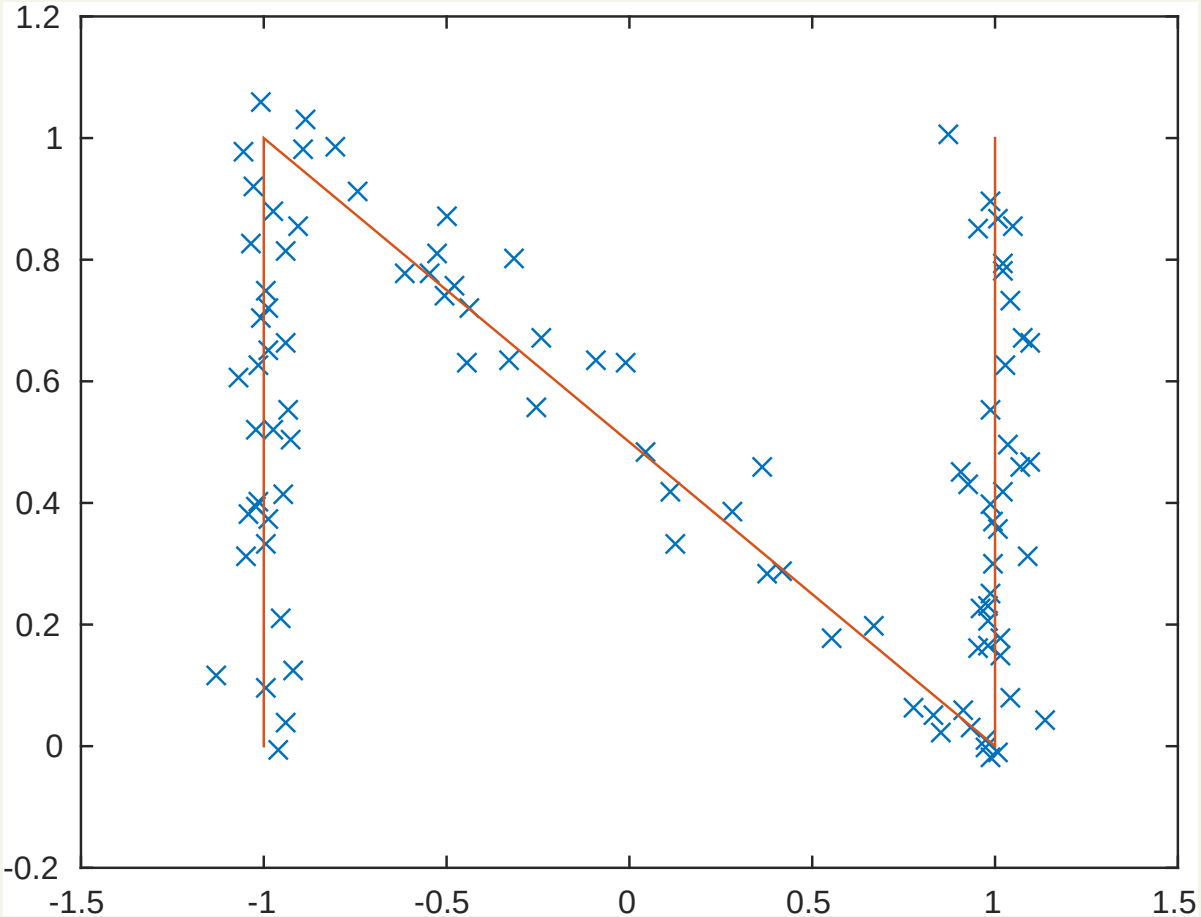
IDENTIDAD

Se está aprendiendo la función identidad y no la naturaleza de los datos.

Necesito regularización

Manifold

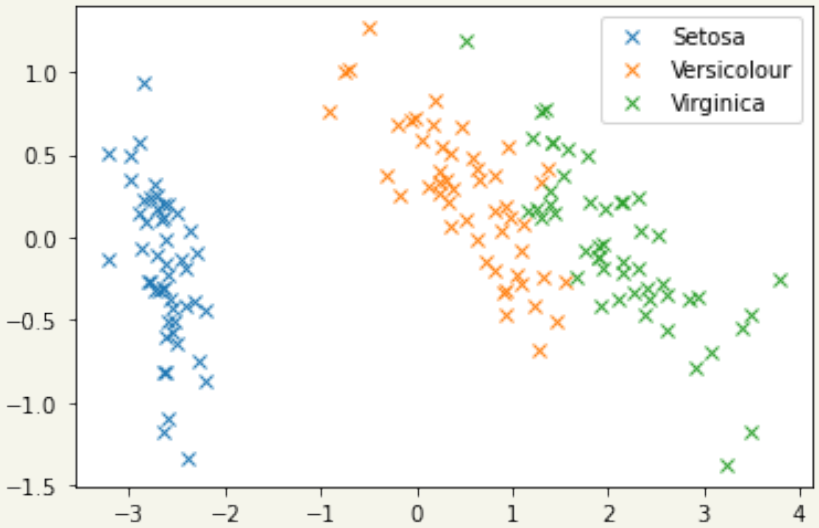
Regularización de autoencoders



Algunas Aplicaciones

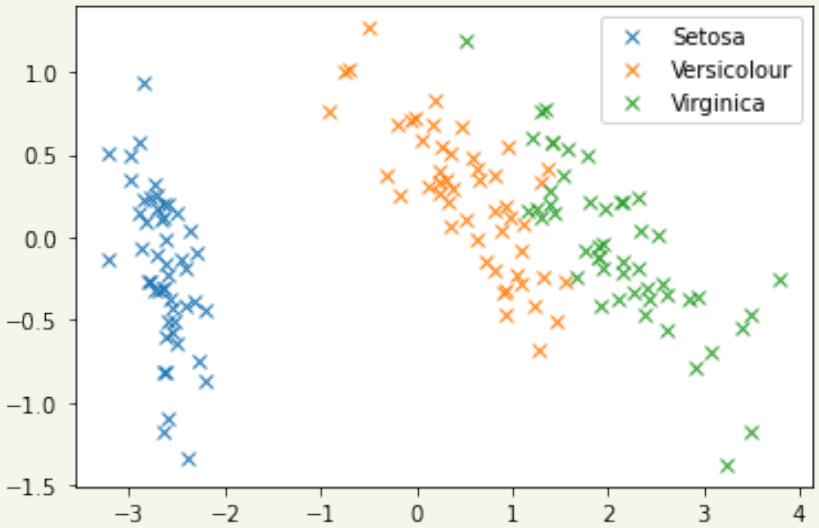
- Para efectuar una inferencia más precisa
- Para pre-procesar los datos
- Para detectar anomalías

Inferencia

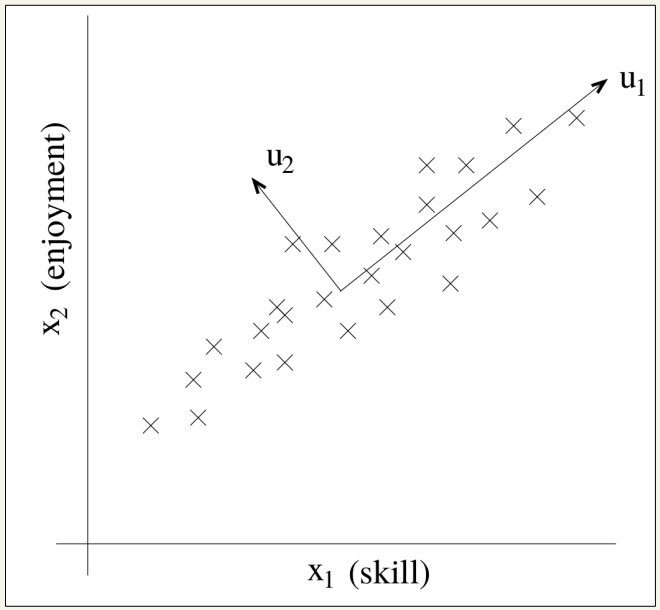


Visualizar en un gráfico 2d o 3d para explicar algunos fenómenos (iris dataset)

Inferencia



Visualizar en un gráfico 2d o 3d para explicar algunos fenómenos (iris dataset)

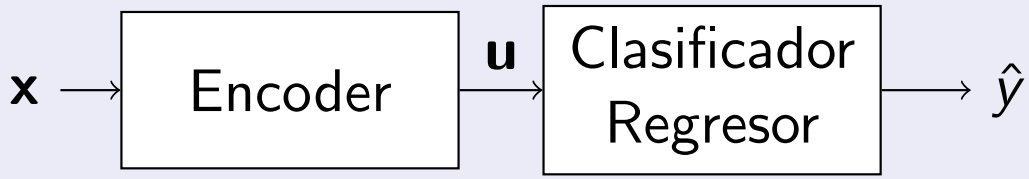


Generar alguna métrica que combine variables muy distintas entre si (radio-controlled helicopters)

Pre-processing

Preprocesing: Opción 1

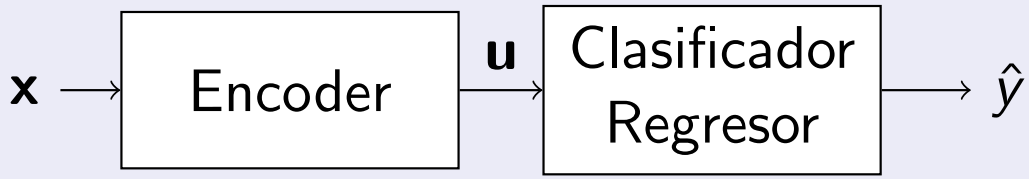
Entrenar el autoencoder y luego usar las muestras en el espacio latente para entrenar el clasificador/regresor.



Pre-processing

Preprocesing: Opción 1

Entrenar el autoencoder y luego usar las muestras en el espacio latente para entrenar el clasificador/regresor.



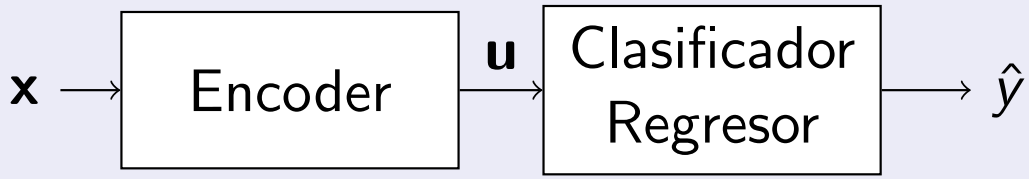
Preprocesing: Opción 2

Entrenar el autoencoder y luego usar las reconstrucciones para entrenar el clasificador.

Pre-processing

Preprocesing: Opción 1

Entrenar el autoencoder y luego usar las muestras en el espacio latente para entrenar el clasificador/regresor.



Preprocesing: Opción 2

Entrenar el autoencoder y luego usar las reconstrucciones para entrenar el clasificador.

Semi-supervise learning

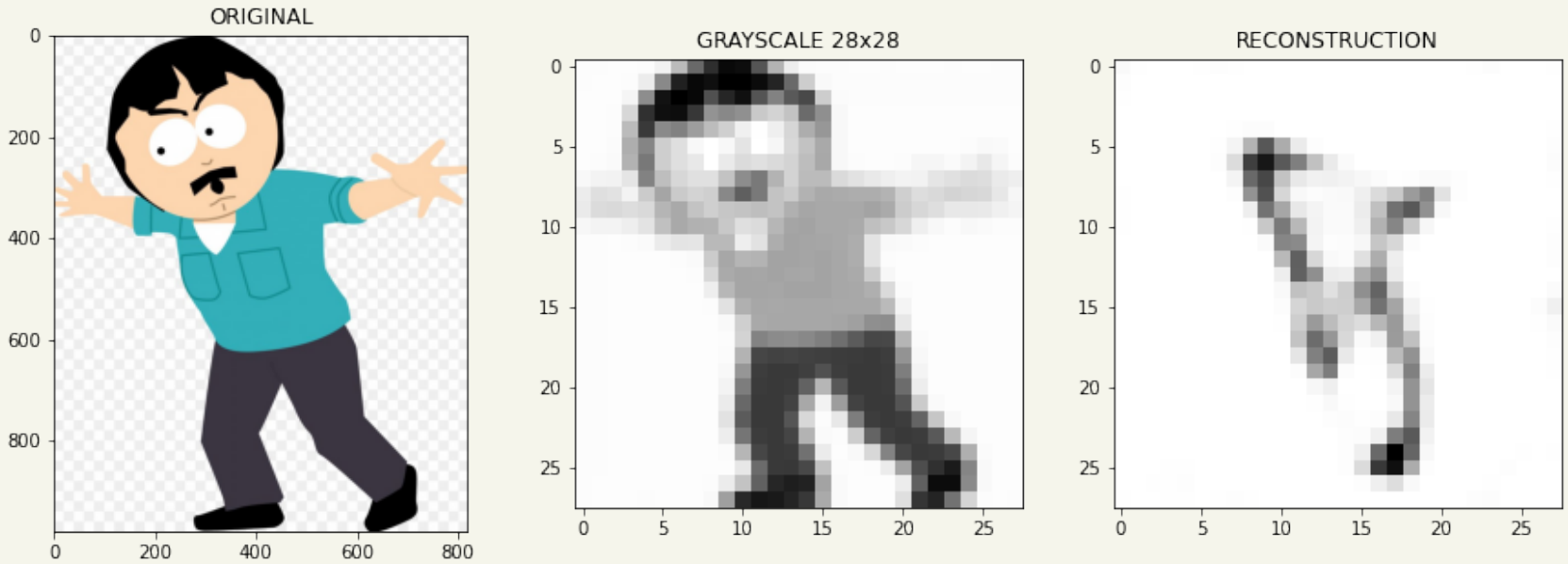
Puedo usar las muestras no supervisadas para entrenar el autoencoder y las supervisadas para el clasificador o el regresor final.

Detección de anomalías

Paradigma

Durante el entrenamiento un autoencoder aprende patrones en los datos para reconstruirlos con cierta facilidad. Entonces es de esperar que una muestra que no cumpla los patrones aprendidos sea más dificil de reconstruir.

EJEMPLO AUTOENCODER ENTRENADO CON MNIST:



¿Cuando usar un autoencoder?

Clasificación de las aplicaciones

Las aplicaciones de los autoencoders se dividen en dos grupos:

- Las que son relevantes por si mismas.
- Las que son un paso intermedio hacia una tarea de clasificación o regresión. $\leftarrow$ **¿Siempre servirá?**

¿Cuando usar un autoencoder?

Clasificación de las aplicaciones

Las aplicaciones de los autoencoders se dividen en dos grupos:

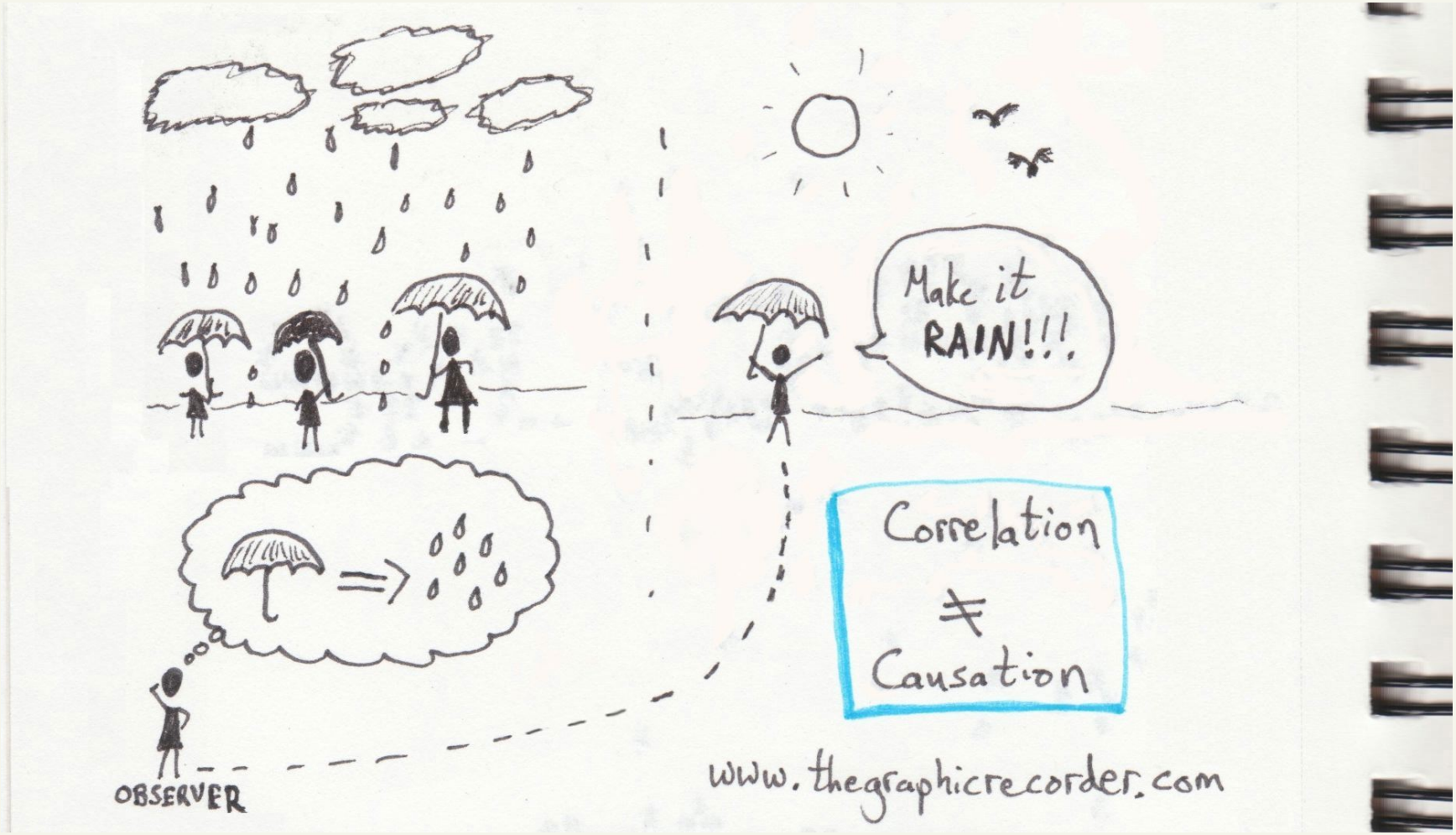
- Las que son relevantes por si mismas.
- Las que son un paso intermedio hacia una tarea de clasificación o regresión. $\leftarrow$ **¿Siempre servirá?**

¿Que distribución aprende durante el entrenamiento?

Desde un punto de vista probabilístico, el entrenamiento de un algoritmo busca aprender la distribución estadística (total o parcial) de los datos:

- **Aprendizaje supervisado**: Para cada entrada x, se desea aprender parte de la información contenida en la distribución de una variable objetivo $Y|X = x$.
- **Aprendizaje no supervisado**: Toda la información aprendida estará contenida en distribución de los datos X.

Hablemos de causalidad



Causalidad: ¿Quién causa a quién?

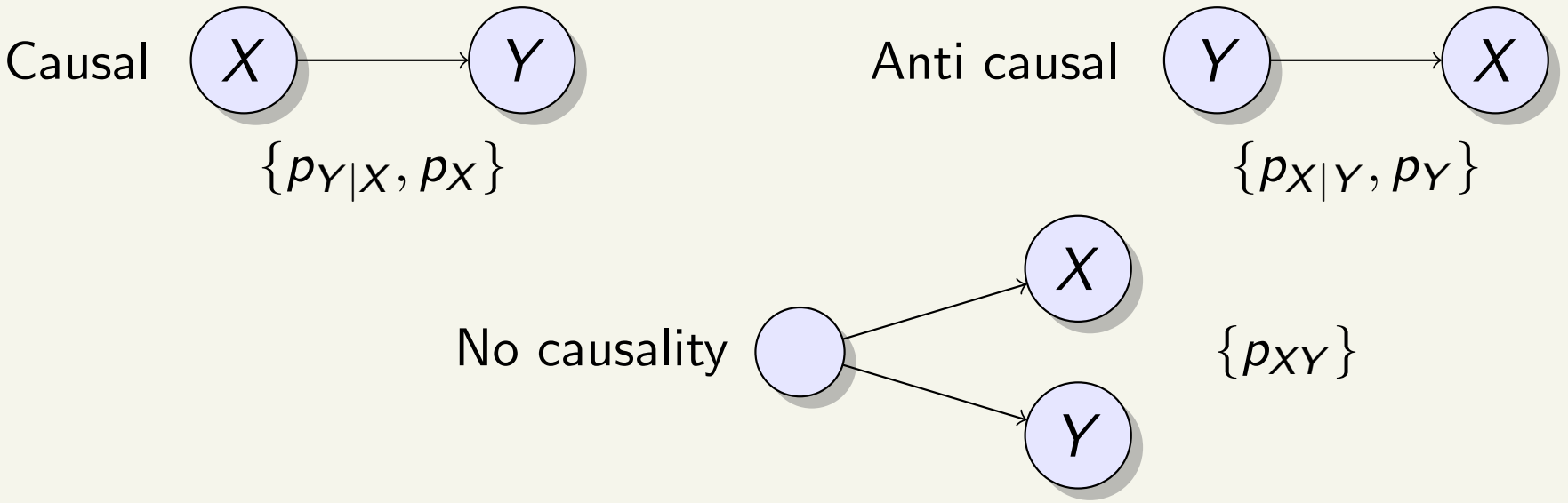
Independent Causal Mechanisms (ICM) Principle

The causal generative process of a system's variables is composed of autonomous modules that do not inform or influence each other. In the probabilistic case, this means that the conditional distribution of each variable given its causes (i.e., its mechanism) does not inform or influence the other mechanisms.

Causalidad: ¿Quién causa a quién?

Independent Causal Mechanisms (ICM) Principle

The causal generative process of a system's variables is composed of autonomous modules that do not inform or influence each other. In the probabilistic case, this means that the conditional distribution of each variable given its causes (i.e., its mechanism) does not inform or influence the other mechanisms.



Causalidad:¿Quién causa a quién?

$$Y = g(X, U) \quad \text{con} \quad X \perp U \qquad \text{o} \qquad X = g(Y, U) \quad \text{con} \quad Y \perp U$$

Causalidad:¿Quién causa a quién?

$$Y = g(X, U) \quad \text{con} \quad X \perp U \qquad \text{o} \qquad X = g(Y, U) \quad \text{con} \quad Y \perp U$$

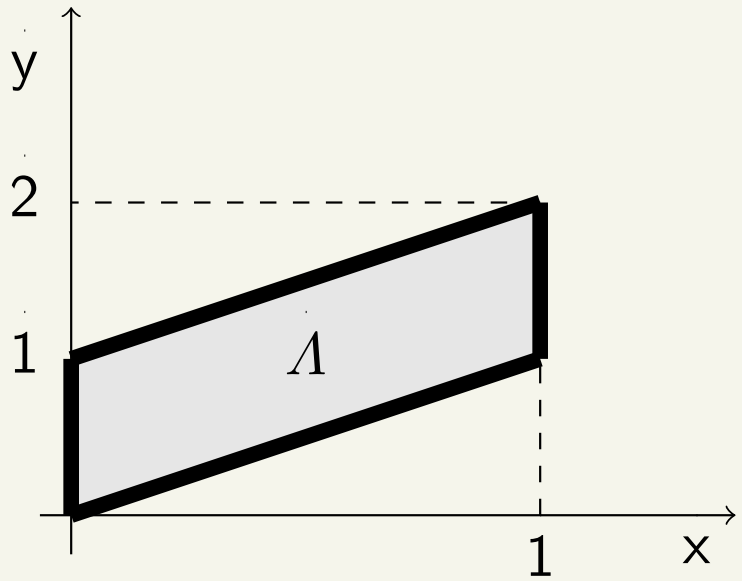
La estadística no basta!

Para toda conjunta p_{XY} siempre existe $U \perp X$ y $g(\cdot, \cdot)$ tal que $Y = g(X, U)$

Causalidad:¿Quién causa a quién?

La estadística no basta!

Para toda conjunta p_{XY} siempre existe $U \perp X$ y $g(\cdot,\cdot)$ tal que $Y = g(X, U)$



$$Y|X = x \sim \mathcal{U}(x, x+1) \equiv x + \mathcal{U}(0,1)$$

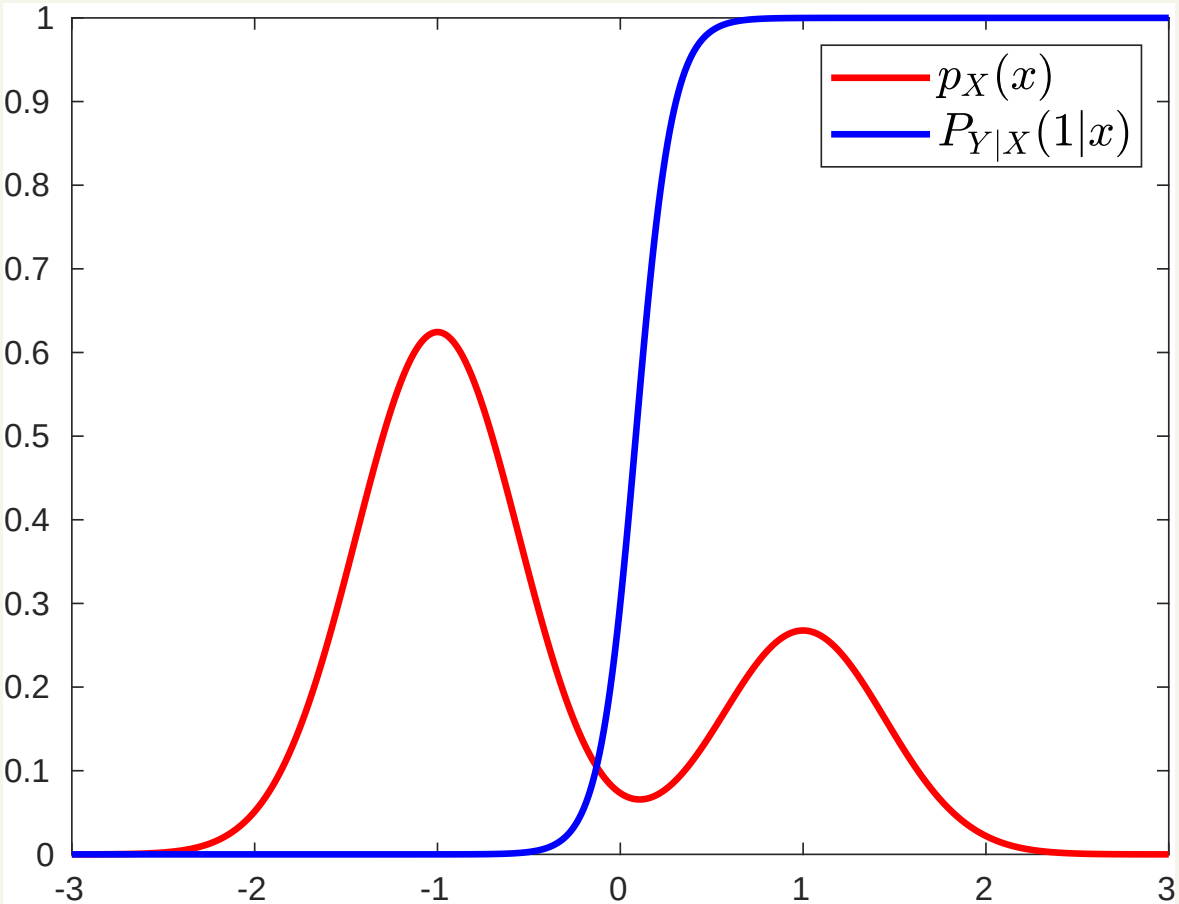
$$X|Y = y \sim \begin{cases} \mathcal{U}(0,y) & 0 < y < 1 \\ \mathcal{U}(y-1,1) & 1 < y < 2 \end{cases}$$

$$(X, Y) \sim \mathcal{U}(\Lambda)$$

Causalidad:¿Quién causa a quién?

La estadística no basta!

Para toda conjunta p_{XY} siempre existe $U \perp X$ y $g(\cdot, \cdot)$ tal que $Y = g(X, U)$



$$Y \sim \text{Cat}\{-1, 1\}$$
$$X|Y = y \sim \mathcal{N}(y, \sigma^2)$$

$$X \sim p_X$$
$$Y|X = x \sim P_{Y|X}(y|x)$$

Causalidad:¿Quién causa a quién?

La estadística no basta!

Para toda conjunta p_{XY} siempre existe $U \perp X$ y $g(\cdot, \cdot)$ tal que $Y = g(X, U)$

$$
\begin{aligned}
p_{XY}(x, y) &= e^{-x} \mathbb{1}\{0 < y < x\} \\
&= \underbrace{x e^{-x} \mathbb{1}\{x > 0\}}_{p_X(x)} \underbrace{\frac{1}{x} \mathbb{1}\{0 < y < x\}}_{p_{Y|X}(y|x)} \\
&= \underbrace{e^{-(x-y)} \mathbb{1}\{x > y\}}_{p_{X|Y}(x|y)} \underbrace{e^{-y} \mathbb{1}\{y > 0\}}_{p_Y(y)}
\end{aligned}
$$

Causalidad:¿Quién causa a quién?

La estadística no basta!

Para toda conjunta p_{XY} siempre existe $U \perp X$ y $g(\cdot, \cdot)$ tal que $Y = g(X, U)$

$$
\begin{aligned}
p_{XY}(x, y) &= e^{-x} \mathbb{1}\{0 < y < x\} \\
&= \underbrace{x e^{-x} \mathbb{1}\{x > 0\}}_{p_X(x)} \underbrace{\frac{1}{x} \mathbb{1}\{0 < y < x\}}_{p_{Y|X}(y|x)} \\
&= \underbrace{e^{-(x-y)} \mathbb{1}\{x > y\}}_{p_{X|Y}(x|y)} \underbrace{e^{-y} \mathbb{1}\{y > 0\}}_{p_Y(y)}
\end{aligned}
$$

$$
X = Y + \mathcal{E}(1), \qquad Y = X \cdot \mathcal{U}(0, 1)
$$

Causal and Anticausal Learning

Causal Learning

Desde esta perspectiva, en una configuración causal $X \to Y$ no debería ayudarnos conocer p_X a inferir $p_{Y|X}$.

Solución Óptima

Las decisiones óptimas $\hat{P}_\theta(y|x) = P_{Y|X}(y|x)$ y $\varphi_\theta(x) = \mathbb{E}[Y|X = x]$ no dependen de la marginal. Es decir, la solución es la misma por más que cambie la marginal p_X.

Causal and Anticausal Learning

Causal Learning

Desde esta perspectiva, en una configuración causal $X \to Y$ no debería ayudarnos conocer p_X a inferir $p_{Y|X}$.

Solución Óptima

Las decisiones óptimas $\hat{P}_\theta(y|x) = P_{Y|X}(y|x)$ y $\varphi_\theta(x) = \mathbb{E}[Y|X = x]$ no dependen de la marginal. Es decir, la solución es la misma por más que cambie la marginal p_X.

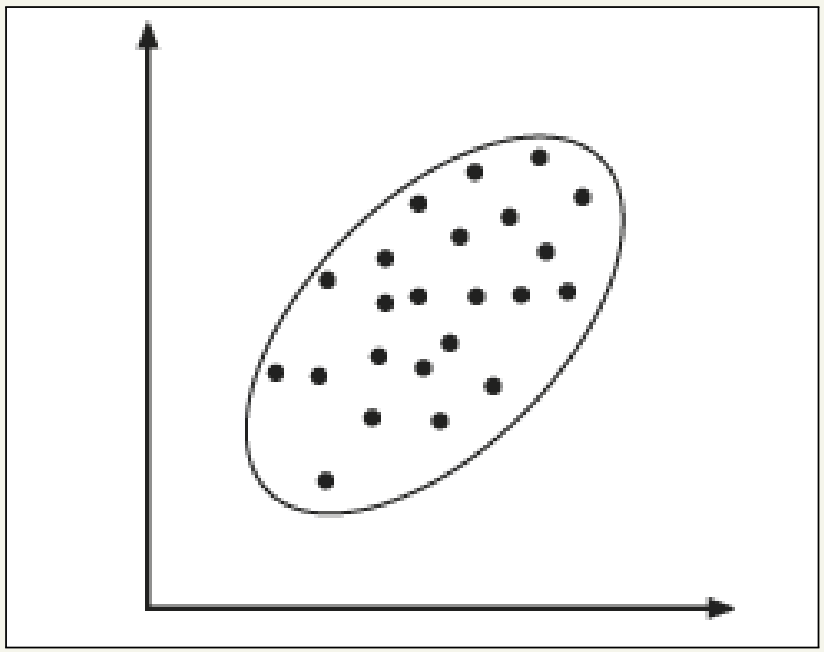
Igual un poquito ayuda

$$\arg\min_{\theta\in\Theta} \mathbb{E}[-\log \hat{P}_\theta(Y|X)] = \arg\min_{\theta\in\Theta} \mathbb{E}_{p_X}\left[D(P_{Y|X}(\cdot|X)\|\hat{P}_\theta(\cdot|X))\right]$$

$$\arg\min_{\theta\in\Theta} \mathbb{E}_P[(Y - \varphi_\theta(X))^2] = \arg\min_{\theta\in\Theta} \mathbb{E}_{p_X}[(\varphi_\theta(X) - \mathbb{E}[Y|X])^2]$$

Principal Components Analysis

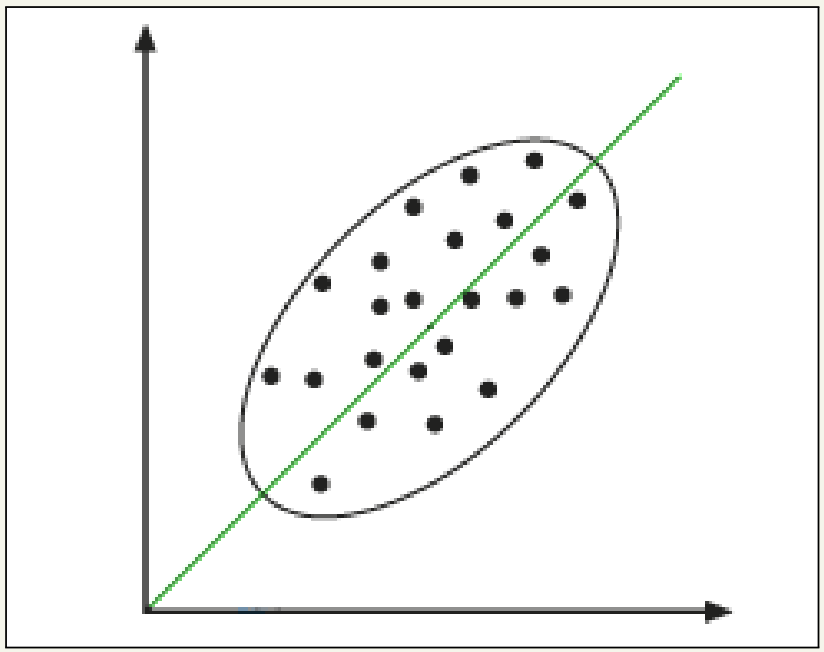
Reducción lineal



Lectura recomendada: *Andrew Ng* - "Lecture notes: Principal components analysis".

Principal Components Analysis

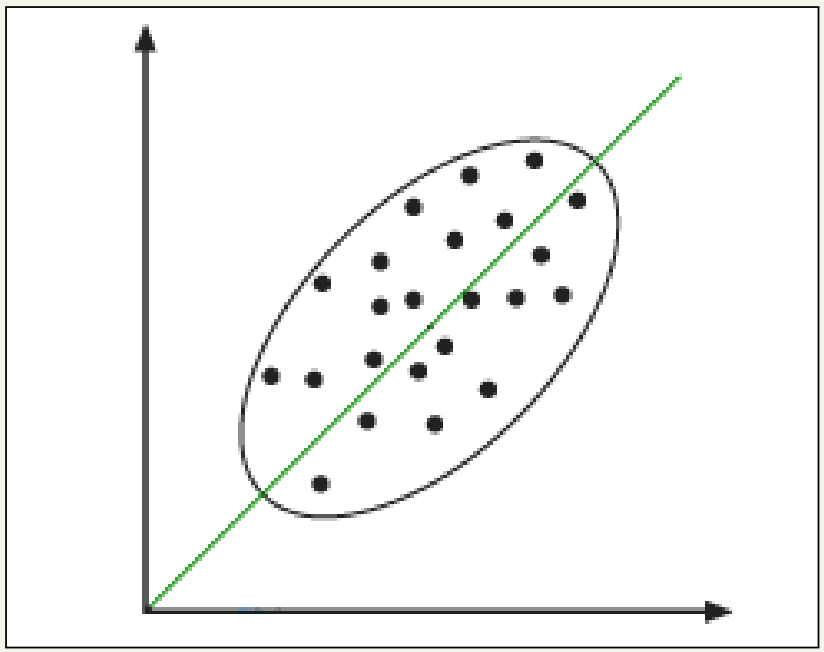
Reducción lineal



Lectura recomendada: *Andrew Ng* - "Lecture notes: Principal components analysis".

Principal Components Analysis

Reducción lineal



PASO 1: Normalizar

$$\tilde{x}_j^{(i)} = \frac{x_j^{(i)} - \mu_j}{\sigma_j}$$

con

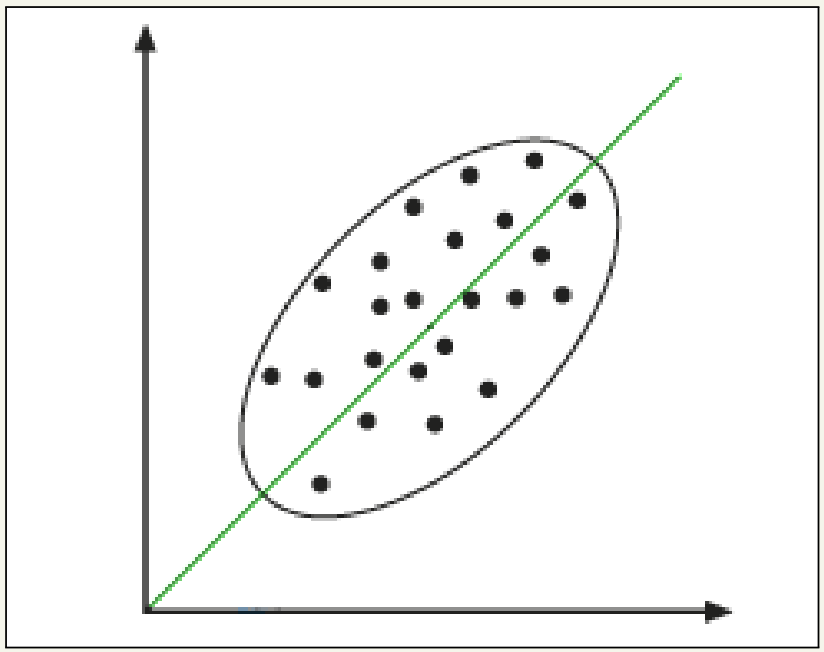
$$\mu_j = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} x_j^{(i)}$$

$$\sigma_j^2 = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(x_j^{(i)} - \mu_j)^2$$

Lectura recomendada: *Andrew Ng* - "Lecture notes: Principal components analysis".

Principal Components Analysis

Reducción lineal



PASO 1: Normalizar

$$\tilde{x}_j^{(i)} = \frac{x_j^{(i)} - \mu_j}{\sigma_j}$$

con

$$\mu_j = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} x_j^{(i)}$$

$$\sigma_j^2 = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} (x_j^{(i)} - \mu_j)^2$$

PASO 2: Buscar el principal autoversor $\mathbf{v}_1$

$$\min_{\substack{\mathbf{v}_1: \\ \|\mathbf{v}_1\|^2=1}} \sum_{i=1}^{n} \|\tilde{\mathbf{x}}^{(i)} - \alpha_i \mathbf{v}_1\|^2 \quad \text{con} \quad \langle \tilde{\mathbf{x}}^{(i)} - \alpha_i \mathbf{v}_1; \mathbf{v}_1 \rangle = 0$$

Lectura recomendada: *Andrew Ng* - "Lecture notes: Principal components analysis".

Principal Components Analysis

Algunas cuentas

Condicion de ortogonalidad:

$$\langle \tilde{\mathbf{x}}^{(i)} - \alpha_i \mathbf{v}_1; \mathbf{v}_1 \rangle = 0 \quad \rightarrow \quad \langle \tilde{\mathbf{x}}^{(i)}; \mathbf{v}_1 \rangle = \alpha_i \|\mathbf{v}_1\|^2 = \alpha_i$$

Principal Components Analysis

Algunas cuentas

Condicion de ortogonalidad:

$$\langle \tilde{\mathbf{x}}^{(i)} - \alpha_i \mathbf{v}_1; \mathbf{v}_1 \rangle = 0 \quad \rightarrow \quad \langle \tilde{\mathbf{x}}^{(i)}; \mathbf{v}_1 \rangle = \alpha_i \|\mathbf{v}_1\|^2 = \alpha_i$$

Optimización:

$$\min_{\substack{\mathbf{v}_1: \\ \|\mathbf{v}_1\|^2=1}} \sum_{i=1}^{n} \|\tilde{\mathbf{x}}^{(i)} - \alpha_i \mathbf{v}_1\|^2 = \min_{\substack{\mathbf{v}_1: \\ \|\mathbf{v}_1\|^2=1}} \sum_{i=1}^{n} \|\tilde{\mathbf{x}}^{(i)}\|^2 - \alpha_i^2$$

Principal Components Analysis

Algunas cuentas

Condicion de ortogonalidad:

$$\langle \tilde{\mathbf{x}}^{(i)} - \alpha_i \mathbf{v}_1; \mathbf{v}_1 \rangle = 0 \quad \rightarrow \quad \langle \tilde{\mathbf{x}}^{(i)}; \mathbf{v}_1 \rangle = \alpha_i \|\mathbf{v}_1\|^2 = \alpha_i$$

Optimización:

$$\min_{\substack{\mathbf{v}_1: \\ \|\mathbf{v}_1\|^2=1}} \sum_{i=1}^{n} \|\tilde{\mathbf{x}}^{(i)} - \alpha_i \mathbf{v}_1\|^2 = \min_{\substack{\mathbf{v}_1: \\ \|\mathbf{v}_1\|^2=1}} \sum_{i=1}^{n} \|\tilde{\mathbf{x}}^{(i)}\|^2 - \alpha_i^2$$

$$\max_{\substack{\mathbf{v}_1: \\ \|\mathbf{v}_1\|^2=1}} \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \langle \tilde{\mathbf{x}}^{(i)}; \mathbf{v}_1 \rangle^2 = \max_{\substack{\mathbf{v}_1: \\ \|\mathbf{v}_1\|^2=1}} \mathbf{v}_1^T \underbrace{\left(\frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \tilde{\mathbf{x}}^{(i)} (\tilde{\mathbf{x}}^{(i)})^T \right)}_{\Sigma} \mathbf{v}_1$$

Principal Components Analysis

Algunas cuentas

$$J(\mathbf{v}_1) = \mathbf{v}_1^T \boldsymbol{\Sigma} \mathbf{v}_1 - \lambda \left(\mathbf{v}_1^T \mathbf{v}_1 - 1 \right)$$

Lectura recomendada: *Petersen and Pedersen* - "Matrix Cookbook".

Principal Components Analysis

Algunas cuentas

$$J(\mathbf{v}_1) = \mathbf{v}_1^T \boldsymbol{\Sigma} \mathbf{v}_1 - \lambda \left(\mathbf{v}_1^T \mathbf{v}_1 - 1 \right)$$

$$\nabla J(\mathbf{v}_1) = 2 \left(\boldsymbol{\Sigma} - \mathbf{I}\lambda \right) \mathbf{v}_1 = 0$$

Lectura recomendada: *Petersen and Pedersen* - "Matrix Cookbook".

Principal Components Analysis

Algunas cuentas

$$J(\mathbf{v}_1) = \mathbf{v}_1^T \boldsymbol{\Sigma} \mathbf{v}_1 - \lambda \left(\mathbf{v}_1^T \mathbf{v}_1 - 1 \right)$$

$$\nabla J(\mathbf{v}_1) = 2 \left(\boldsymbol{\Sigma} - \mathbf{I}\lambda \right) \mathbf{v}_1 = 0$$

$$\boldsymbol{\Sigma} \mathbf{v}_1 = \lambda \mathbf{v}_1 \quad \rightarrow \quad \mathbf{v}_1 \text{ es AVE de } \boldsymbol{\Sigma} \text{ y } \lambda \text{ es AVA}$$

Lectura recomendada: *Petersen and Pedersen* - "Matrix Cookbook".

Principal Components Analysis

Algunas cuentas

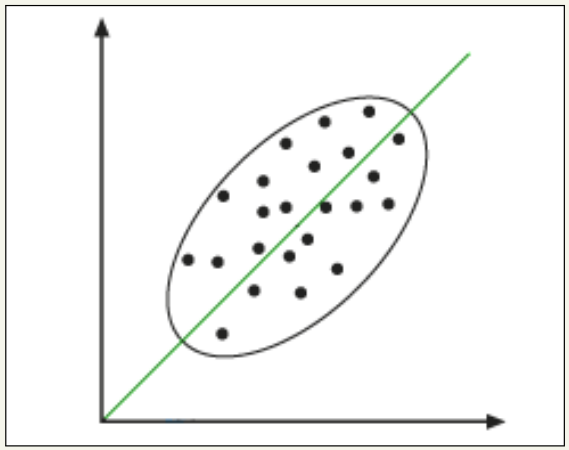
$$J(\mathbf{v}_1) = \mathbf{v}_1^T \boldsymbol{\Sigma} \mathbf{v}_1 - \lambda \left(\mathbf{v}_1^T \mathbf{v}_1 - 1 \right)$$

$$\nabla J(\mathbf{v}_1) = 2 \left(\boldsymbol{\Sigma} - \mathbf{I}\lambda \right) \mathbf{v}_1 = 0$$

$$\boldsymbol{\Sigma} \mathbf{v}_1 = \lambda \mathbf{v}_1 \quad \rightarrow \quad \mathbf{v}_1 \text{ es AVE de } \boldsymbol{\Sigma} \text{ y } \lambda \text{ es AVA}$$

El problema de optimización pasa a ser de la forma

$$\max_{\substack{\mathbf{v}_1: \\ \|\mathbf{v}_1\|^2 = 1}} \mathbf{v}_1^T \boldsymbol{\Sigma} \mathbf{v}_1 = \max_{\substack{\mathbf{v}_1: \\ \|\mathbf{v}_1\|^2 = 1}} \lambda(\mathbf{v}_1) \quad \rightarrow \text{ Máximo AVA}$$



Lectura recomendada: *Petersen and Pedersen* - "Matrix Cookbook".

Principal Components Analysis

Reducción y Reconstrucción

Componentes principales

Este procedimiento se puede repetir para encontrar el 2do, 3er, etc. componente principal. El resultado son el 2do, 3er, etc autovalor con su autovector como dirección.

Principal Components Analysis

Reducción y Reconstrucción

Componentes principales

Este procedimiento se puede repetir para encontrar el 2do, 3er, etc. componente principal. El resultado son el 2do, 3er, etc autovalor con su autovector como dirección.

Sobre los autovalores

El porcentaje de energía perdida puede medirse por la proporción de autovalores despreciados.

- $\mathbf{V}$: Matriz de autovectores más relevantes.
- $\mathbf{x}$: Variable de entrada a procesar (ya normalizada).
- $\mathbf{u}$: Variable latente.
- $\hat{\mathbf{x}}$: Reconstrucción

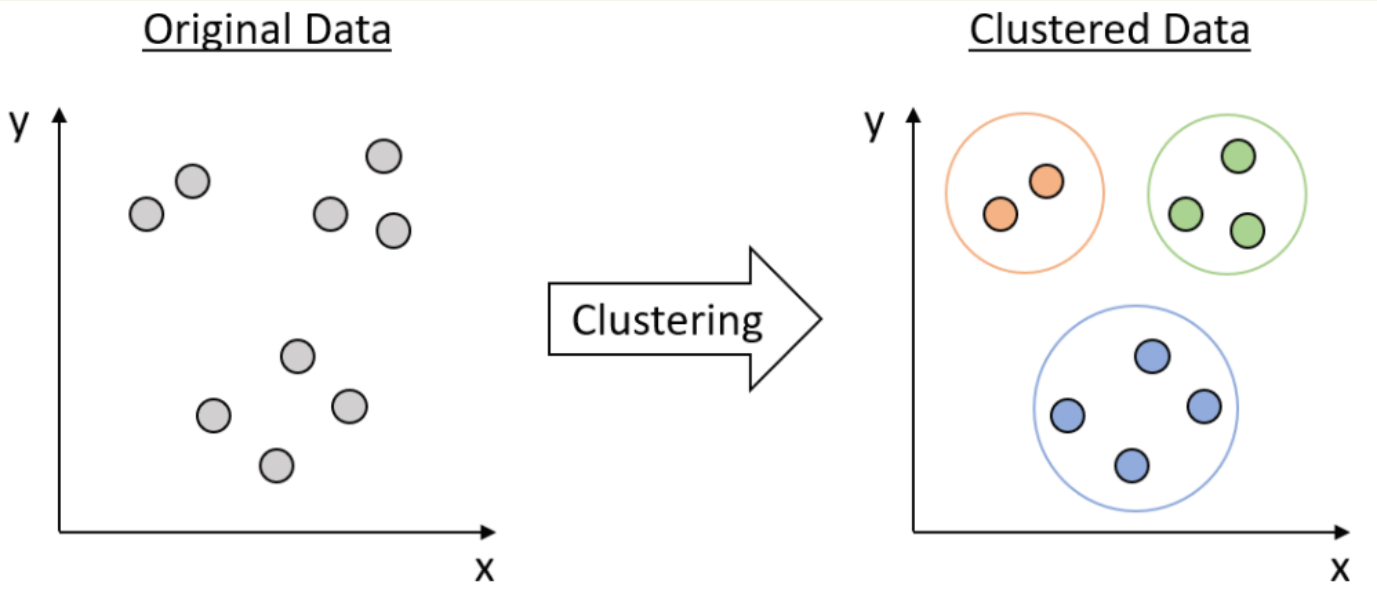
$$\mathbf{u} = \mathbf{V} \cdot \mathbf{x}, \qquad \hat{\mathbf{x}} = \mathbf{V}^T \cdot \mathbf{u}$$

Outline

Clustering

Clustering

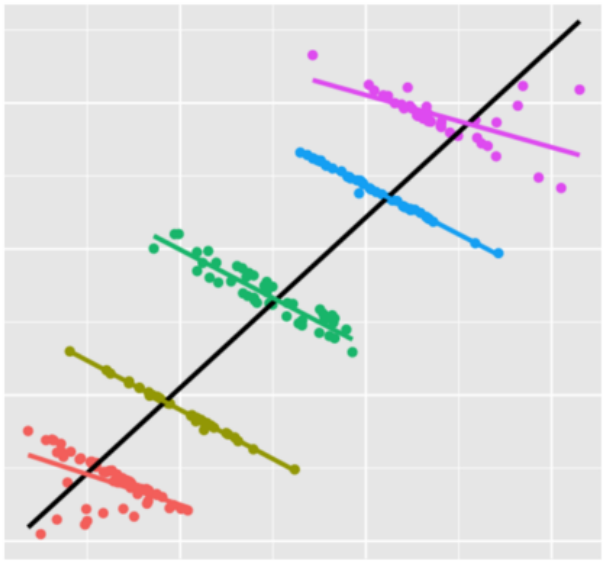
Estos algoritmos son la versión no supervisada de la clasificación. Su objetivo es agrupar muestras de manera de tener un mayor entendimiento del *manifold*.



Motivación: Paradoja de Simpson

Paradoja de Simpson

La paradoja de Simpson se da cuando dos (o más) variables tienen una correlación hacia un sentido pero al agrupar los datos se ve que, en cada cluster, la correlación posee en realidad el sentido opuesto.



Paradoja de Simpson: Covid-19 Case Fatality Rates (CFR)

Edad	0-9	10-19	20-29	30-39	40-49	50-59	60-69	70-79	≥ 80	Total
Italia	0% (0/43)	0% (0/85)	0% (0/296)	0% (0/470)	0.1% (1/891)	0.2% (3/1453)	2.5% (37/1471)	6.4% (114/1785)	13.2% (202/1532)	4.4% (357/8026)
China	0% (0/0)	0.2% (1/549)	0.2% (7/3619)	0.2% (18/7600)	0.4% (38/8571)	1.3% (130/10008)	3.6% (309/8583)	8% (312/3918)	14.8% (208/1408)	2.3% (1023/44672)

Julius von Kugelgen, Luigi Gresele and Bernhard Scholkopf "Simpson's paradox in Covid-19 case fatality rates: A mediation analysis of age-related causal effects" IEEE Transactions on Artificial Intelligence 2021.

Algoritmo K-Means

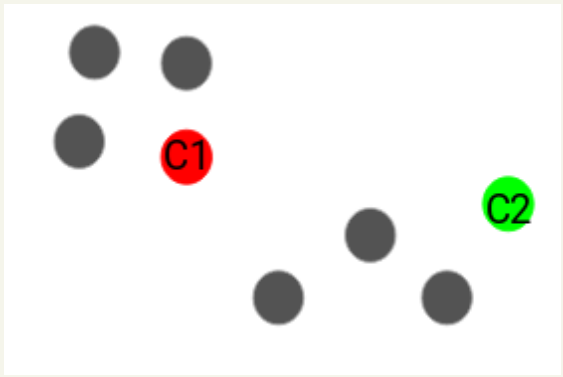
K-means

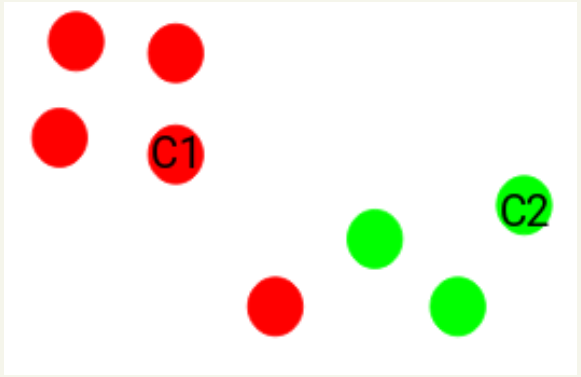
Algoritmo de clustering para agrupar los datos en K clusters (previamente definidos). Se basa en encontrar, de forma iterativa, los *centroides* de cada clase y asignar cada muestra al centroide más cercano.

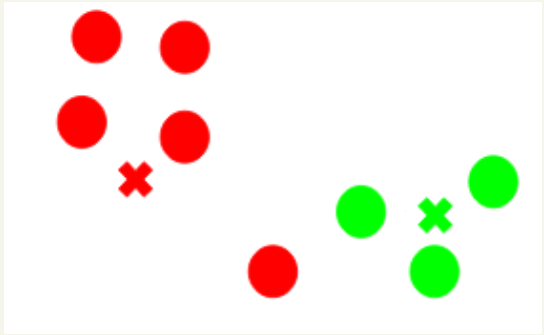
Algorithm 1 K-means

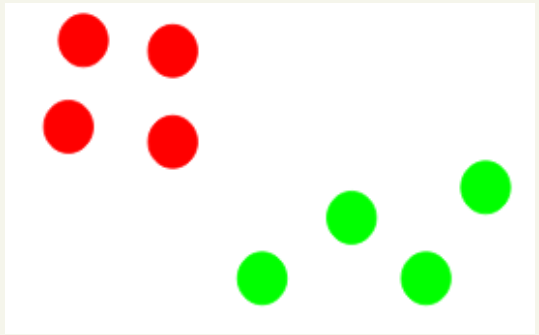
procedure $\text{KMeans}(X, K)$
Input: $X \in \mathbb{R}^{n \times d_x}$ matriz de datos y K número de clusters.
Output: $\mu \in \mathbb{R}^{K \times d_x}$ centroides e $y \in \{1, \cdots, K\}^n$ etiquetas.
    Inicializar μ con el valor de K columnas de X elegida al azar.
    repeat
        $y[i] = \arg\min_k \|X[i,:] - \mu[k,:]\|$ ▷ Con $i = 1, \cdots, n$.
        $\mu[k,:] = \mathbb{E}\left[X[y == k,:]\right]$ ▷ Con $k = 1, \cdots, K$
    until convergencia
    Return: μ e y
end procedure

Algoritmo K-Means









Outline

Máxima Verosimilitud

Algoritmos de Máxima Verosimilitud

La minimización de la *cross-entropy* equivale a encontrar algoritmos de máxima verosimilitud. El problema es que estos son muchas veces analíticamente intratables y computacionalmente muy pesados de tratar (ej. mezcla de gaussianas).

$$\hat{\theta} = \arg\max_{\theta \in \Theta} \sum_{i=1}^{n} \log p(X_i|\theta)$$

Variables no observable

Sea Z una variable no observable del problema con densidad condicional $p(z|x,\theta)$, y sea $\mathcal{P}$ la familia de todas las posibles densidades condicionales de $Z|X = x$. Luego, el estimador de MV puede reescribirse como:

$$\begin{aligned}\hat{\theta} &= \arg\max_{\theta \in \Theta} \max_{q \in \mathcal{P}} \sum_{i=1}^{n} \left[\log p(X_i|\theta) - \mathrm{KL}\left(q(\cdot|X_i) \| p(\cdot|X_i,\theta)\right)\right] \\ &= \arg\max_{\theta \in \Theta} \max_{q \in \mathcal{P}} \mathrm{ELBO}(\theta, q)\end{aligned}$$

Algoritmo EM

Algoritmo Expectation - Maximization

El algoritmo EM consiste en inicializar en algún valor θ_0 e iterar entre:

- $q^{(t)} = \arg\max_{q \in \mathcal{P}} \text{ELBO}(\theta^{(t-1)}, q)$ (Expectation)
- $\theta^{(t)} = \arg\max_{\theta \in \Theta} \text{ELBO}(\theta, q^{(t)})$ (Maximization)

Algoritmo EM

Algoritmo Expectation - Maximization

El algoritmo EM consiste en inicializar en algún valor θ_0 e iterar entre:

- $q^{(t)} = \arg\max_{q \in \mathcal{P}} \text{ELBO}(\theta^{(t-1)}, q)$ (Expectation)
- $\theta^{(t)} = \arg\max_{\theta \in \Theta} \text{ELBO}(\theta, q^{(t)})$ (Maximization)

Expectación

El paso *Expectation* puede simplificarse a la relación $q^{(t)}(z|x) = p(z|x, \theta^{(t-1)})$. Es decir:

$$\theta^{(t)} = \arg\max_{\theta \in \Theta} \sum_{i=1}^{n} \left[\log p(X_i|\theta) - \text{KL}\left(p(\cdot|X_i, \theta^{(t-1)}) \| p(\cdot|X_i, \theta) \right) \right]$$

Algoritmo EM

Maximización

El paso *Maximization* puede simplificarse reesribiendo cada sumando como

$$\log p(x|\theta) - \mathrm{KL}\left(q(\cdot|x)\|p(\cdot|x,\theta)\right) = H(q(\cdot|x)) + \mathbb{E}_q\left[\log p(x, Z|\theta)|X = x\right]$$

donde la entropía no depende de θ. Es decir,

$$\theta^{(t)} = \arg\max_{\theta\in\Theta} \sum_{i=1}^{n} \mathbb{E}_{q^{(t)}}\left[\log p(X_i, Z|\theta)|X_i\right]$$

Algoritmo EM

Maximización

El paso *Maximization* puede simplificarse reesribiendo cada sumando como

$$\log p(x|\theta) - \mathrm{KL}\left(q(\cdot|x)\|p(\cdot|x,\theta)\right) = H(q(\cdot|x)) + \mathbb{E}_q\left[\log p(x,Z|\theta)|X=x\right]$$

donde la entropía no depende de θ. Es decir,

$$\theta^{(t)} = \arg\max_{\theta\in\Theta} \sum_{i=1}^{n} \mathbb{E}_{q^{(t)}}\left[\log p(X_i,Z|\theta)|X_i\right]$$

Teorema: Monotonía

En el algoritmo EM ocurre que

$$\sum_{i=1}^{n} \log p\left(X_i|\theta^{(t+1)}\right) \geq \sum_{i=1}^{n} \log p\left(X_i|\theta^{(t)}\right)$$

Hint: $p(x|\theta) = \frac{p(x,z|\theta)}{p(z|x,\theta)}$ para todo z con $p(z|x,\theta) > 0$.

Algoritmo EM para mezcla de gaussianas

Definición del problema

Si $Z \sim \text{Cat}(\{c_1, \cdots, c_K\})$ y $X|Z = k \sim \mathcal{N}(\mu_k, \Sigma_k)$, está claro que X es una mezcla de gaussianas. Sea $\theta = \{c_k, \mu_k, \Sigma_k\}_{k=1}^{K}$, se desea estimar estos parámetros (de forma no supervisada, es decir siendo Z no observable). El estimador de máxima verosimilitud es intratable y por eso recurrimos al algoritmo EM.

Algoritmo EM para mezcla de gaussianas

Definición del problema

Si $Z \sim \text{Cat}(\{c_1, \cdots, c_K\})$ y $X|Z = k \sim \mathcal{N}(\mu_k, \Sigma_k)$, está claro que X es una mezcla de gaussianas. Sea $\theta = \{c_k, \mu_k, \Sigma_k\}_{k=1}^K$, se desea estimar estos parámetros (de forma no supervisada, es decir siendo Z no observable). El estimador de máxima verosimilitud es intratable y por eso recurrimos al algoritmo EM.

Expectación

El paso de expectación es simplemente elegir:

$$q(k|x) = p(k|x, \theta) = \frac{c_k \cdot |\Sigma_k|^{-1/2} \cdot e^{-\frac{1}{2}(x-\mu_k)^T \Sigma_k^{-1}(x-\mu_k)}}{\sum_{m=1}^K c_m \cdot |\Sigma_m|^{-1/2} \cdot e^{-\frac{1}{2}(x-\mu_m)^T \Sigma_m^{-1}(x-\mu_m)}}$$

Algoritmo EM para mezcla de gaussianas

Maximización

Dado un q, se desea maximizar:

$$\max_{\theta} \sum_{i=1}^{n} \mathbb{E}_q \left[\log p(X_i, Z|\theta)|X_i\right] \qquad \text{s.t.} \qquad \sum_{k=1}^{K} c_k = 1$$

Es decir que, utilizando multiplicadores de Lagrange, la función a derivar e igualar a cero es:

$$\mathcal{L}(\theta) = \sum_{i=1}^{n}\sum_{k=1}^{K} q(k|x_i) \left[\log c_k - \frac{1}{2}\log|\Sigma_k| - \frac{1}{2}(x_i-\mu_k)^T\Sigma_k^{-1}(x_i-\mu_k)\right] + \lambda\left(1 - \sum_{k=1}^{K} c_k\right)$$

Algoritmo EM para mezcla de gaussianas

Derivada respecto a c_k

Igualamos a cero la derivada respecto a c_k y usamos que $\sum_{k=1}^{K} c_k = 1$.

$$\frac{\partial \mathcal{L}(\theta)}{\partial c_k} = \left(\sum_{i=1}^{n} \frac{q(k|x_i)}{c_k} \right) - \lambda = 0$$

$$\Rightarrow \quad c_k = \frac{1}{\lambda} \sum_{i=1}^{n} q(k|x_i)$$

$$\Rightarrow \quad c_k = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} q(k|x_i)$$

Algoritmo EM para mezcla de gaussianas

Derivada respecto a μ_k

Igualamos a cero (vector) la derivada respecto a μ_k.

$$\frac{\partial \mathcal{L}(\theta)}{\partial \mu_k} = \sum_{i=1}^{n} q(k|x_i)\Sigma_k^{-1}(x_i - \mu_k) = 0$$

$$\Rightarrow \quad \mu_k = \frac{\sum_{i=1}^{n} q(k|x_i) \cdot x_i}{\sum_{i=1}^{n} q(k|x_i)}$$

Petersen and Pedersen - "Matrix Cookbook".

Algoritmo EM para mezcla de gaussianas

Derivada respecto a μ_k

Igualamos a cero (vector) la derivada respecto a μ_k.

$$\frac{\partial \mathcal{L}(\theta)}{\partial \mu_k} = \sum_{i=1}^{n} q(k|x_i)\Sigma_k^{-1}(x_i - \mu_k) = 0$$

$$\Rightarrow \quad \mu_k = \frac{\sum_{i=1}^{n} q(k|x_i) \cdot x_i}{\sum_{i=1}^{n} q(k|x_i)}$$

Derivada respecto a Σ_k

Igualamos a cero (matriz) la derivada respecto a Σ_k.

$$\frac{\partial \mathcal{L}(\theta)}{\partial \Sigma_k} = \sum_{i=1}^{n} q(k|x_i) \left[-\frac{1}{2}\Sigma_k^{-1} + \frac{1}{2}\Sigma_k^{-1}(x_i - \mu_k)(x_i - \mu_k)^T \Sigma_k^{-1} \right] = 0$$

$$\Rightarrow \quad \Sigma_k = \frac{\sum_{i=1}^{n} q(k|x_i) \cdot (x_i - \mu_k)(x_i - \mu_k)^T}{\sum_{i=1}^{n} q(k|x_i)}$$

Petersen and Pedersen - "Matrix Cookbook".

Algoritmo EM para máximo a posteriori

Estimador puntual con enfoque Bayesiano

Si modelamos θ como variable aleatoria y suponemos plguna distribución *a priori* $\pi(\theta)$, definimos el estimador MAP como:

$$\begin{aligned}\hat{\theta} &= \arg\max_{\theta\in\Theta} \log p(\theta|\underline{X}) \\ &= \arg\max_{\theta\in\Theta} \log \pi(\theta) + \sum_{i=1}^{n} \log p(X_i|\theta) \\ &= \arg\max_{\theta\in\Theta} \log \pi(\theta) + \max_{q\in\mathcal{P}} \text{ELBO}(\theta, q)\end{aligned}$$

M-step

La prior solo modifica la maximización:

$$\theta^{(t)} = \arg\max_{\theta\in\Theta} \log \pi(\theta) + \sum_{i=1}^{n} \mathbb{E}_{q^{(t)}} \left[\log p(X_i, Z|\theta)|X_i\right]$$

Outline

Aplicación de EM: Factor Analysis

Factor Analysis

Al igual que PCA, el algoritmo EM puede utilizarse para reducir la dimensión. El modelo consiste en suponer que los *features* se puede descomponer en factores: $X = \mu + W \cdot Z + \epsilon$ con $\mu \in \mathbb{R}^{d_x}$, $W \in \mathbb{R}^{d_x \times d_z}$, $Z \sim \mathcal{N}(0, I)$ (de dimensión d_z) y $\epsilon \sim \mathcal{N}(0, \Psi)$ (de dimensión d_x) con Ψ una matriz diagonal y con Z y ϵ independientes. En este caso, $\theta = \{\mu, W, \Psi\}$.

Aplicación de EM: Factor Analysis

Factor Analysis

Al igual que PCA, el algoritmo EM puede utilizarse para reducir la dimensión. El modelo consiste en suponer que los *features* se puede descomponer en factores: $X = \mu + W \cdot Z + \epsilon$ con $\mu \in \mathbb{R}^{d_x}$, $W \in \mathbb{R}^{d_x \times d_z}$, $Z \sim \mathcal{N}(0, I)$ (de dimensión d_z) y $\epsilon \sim \mathcal{N}(0, \Psi)$ (de dimensión d_x) con Ψ una matriz diagonal y con Z y ϵ independientes. En este caso, $\theta = \{\mu, W, \Psi\}$.

Expectación

Dado que la conjunta entre (X, Z) es una normal multivariada, la condicional de $Z|X = x$ también lo será. Es decir que $p(z|x, \theta)$ se caracterizará por una media (recta función de x) y una matriz de covarianza constante (no depende de x).

Aplicación: Factor Analysis

Maximización

Dado que μ es la media de X, suele estimarse utilizando el promedio y excluirla del algoritmo EM. Por otro lado, como la marginal $p(Z)$ no depende de θ, la maximización puede reducirse a:

$$\theta^{(t)} = \arg\max_{\theta \in \Theta} \sum_{i=1}^{n} \mathbb{E}_{q^{(t)}} \left[\log p(X_i | Z, \theta) | X_i \right]$$

Aplicación: Factor Analysis

Maximización

Dado que μ es la media de X, suele estimarse utilizando el promedio y excluirla del algoritmo EM. Por otro lado, como la marginal $p(Z)$ no depende de θ, la maximización puede reducirse a:

$$\theta^{(t)} = \arg\max_{\theta \in \Theta} \sum_{i=1}^{n} \mathbb{E}_{q^{(t)}} \left[\log p(X_i | Z, \theta) | X_i \right]$$

Encoder - Decoder

Una vez entrenado el algoritmo, se utiliza $\mathbb{E}[Z|X = x, \theta]$ como *encoder* y $\mathbb{E}[X|Z = z, \theta]$ como *decoder*.