

# EST-297

## Enfoques estadísticos de Clustering

Juan Zamora O.

Junio, 2024.



PONTIFICIA  
UNIVERSIDAD  
CATÓLICA DE  
VALPARAÍSO



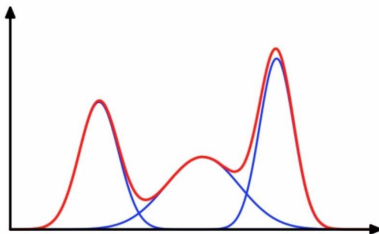
# Estructura de la Presentación

## 1 Modelo de Mezcla de Gaussianas

# Modelo de Mezcla de Gaussianas

- Si bien la distribución Normal tiene importantes propiedades analíticas, tiene también serias limitaciones para modelar fenómenos reales complejos.
- Una manera abordar estas limitaciones consiste en utilizar una combinación de distintas distribuciones normales o gaussianas.

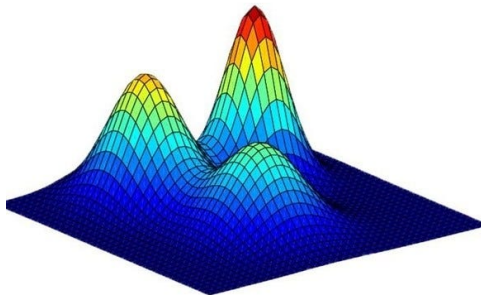
$$p(x) = \sum_{k=1}^K \alpha_k \mathcal{N}(x; \mu_k, \sigma_k^2), \text{ con } \alpha_i \geq 0, \sum_k \alpha_k = 1$$



# Modelo multivariado

- Dado un conjunto de puntos  $\mathbf{X} = \{\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N\}$  con  $\mathbf{x}_i \in \mathbf{R}^d$
- La variable aleatoria se supone distribuida de acuerdo a una mezcla de  $K$  componentes normales multivariados. Es decir,

$$p(\mathbf{x}) = \sum_{k=1}^K \alpha_k \mathcal{N}(x; \underline{\mu}_k, \Sigma_k), \text{ con } \sum_k \alpha_k = 1$$



## Definición del problema

- Dada la representación mediante  $K$  componentes normales, el objetivo es estimar los valores de los parámetros  $\underline{\mu}$ ,  $\Sigma$  y  $\alpha$

Si suponemos que los puntos son i.i.d la verosimilitud queda dada por:

$$p(\mathbf{X}|\Theta) = \prod_{n=1}^N \sum_{k=1}^K \alpha_k p(\mathbf{x}_n|\theta_k)$$

Generalmente, se utiliza una forma logaritmica de la verosimilitud para deshacerse de la productoria.

$$\log p(X|\alpha, \mu, \Sigma) = \sum_{i=1}^n \log \left( \sum_{k=1}^K \alpha_k \mathcal{N}(x_i|\mu_k, \Sigma_k) \right)$$

## El algoritmo EM

Una manera efectiva para encontrar estimadores de máxima verosimilitud para modelos con variables latentes es el algoritmo de Maximización de la esperanza o **EM**.

El algoritmo comienza con una inicialización aleatoria de los parámetros del modelo. Luego, itera entre los siguientes dos pasos hasta converger:

- 1 **Calculo de la esperanza (E)**: Cálculo de log-verosimilitud esperada del modelo con respecto a la distribución de las variables latentes, dados los datos observados y la estimación actual de los parámetros.
- 2 **Maximización de log-verosimilitud (M)**: Actualización de los parámetros del modelo para maximizar la log-verosimilitud de los datos observados, dadas las variables latentes observadas a partir del paso anterior.

## Paso E

La variable latente a calcular corresponde a la pertenencia de cada uno de los  $n$  puntos en cada uno de los  $K$  componentes gaussianos.

Sea  $Z_i = k$  la variable que indica que  $x_i$  pertenece al componente  $k$ . Luego,

$$p(Z_i = k|x_i; \theta) = \frac{p(x_i|Z_i = k; \theta)p(Z_i = k; \theta)}{p(x_i; \theta)} = \frac{\alpha_k \cdot p(x_i|Z_i = k; \theta)}{\sum_{j=1}^K \alpha_j p(x_i|Z_i = j; \theta)}$$

Considerando que  $p(x_i|Z_i = k; \theta) = \mathcal{N}(x_i; \underline{\mu}_k, \Sigma_k)$ ,

$$p(Z_i = k|x_i; \theta) = \frac{\alpha_k \mathcal{N}(x_i; \underline{\mu}_k, \Sigma_k)}{\sum_{j=1}^K \alpha_j \mathcal{N}(x_i; \underline{\mu}_j, \Sigma_j)} = \gamma(z_{ik})$$

$\gamma(z_{ik})$  se denomina responsabilidad del componente  $k$  por la observación  $i$

La log-verosimilitud esperada con respecto a la distribución de las variables latentes se escribe como una suma ponderada de las log-verosimilitudes de todos los puntos bajo cada uno de los componentes:

$$Q(\theta) = \sum_{i=1}^n \sum_{k=1}^K \gamma(z_{ik}) \log \alpha_k \mathcal{N}(x_i | \mu_k, \Sigma_k)$$

Esta función  $Q$  representa la log-verosimilitud esperada sobre los datos observados y las distribuciones estimadas de variables latentes



## Paso M

- $\theta$  corresponde a los vectores de medias, matrices de covarianza y pesos de mezcla.
- En este paso se actualizan los parámetros en  $\theta$  de manera que se maximice la log-verosimilitud esperada  $Q(\theta)$
- Las **medias** de cada componente se actualizan mediante

$$\underline{\mu}_k^* = \frac{\sum_{i=1}^n \gamma(z_{ik}) \mathbf{x}_i}{\sum_{i=1}^n \gamma(z_{ik})}$$

- El vector de medias del  $k$ -ésimo componente corresponde a una promedio ponderado de todos los puntos, usando las probabilidades de pertenencia de cada punto
- Esta ecuación proviene de la maximización de la log-verosimilitud esperada ( $Q$ ) con respecto al vector de medias  $\rightarrow \frac{\partial Q}{\partial \underline{\mu}_k} = 0$

- Las **covarianzas** para componente se actualizan mediante

$$\Sigma_k^* = \frac{\sum_{i=1}^n \gamma(z_{ik})(\mathbf{x}_i - \underline{\mu}_k^*)(\mathbf{x}_i - \underline{\mu}_k^*)^T}{\sum_{i=1}^n \gamma(z_{ik})}$$

- La nueva matriz de covarianza corresponde a un promedio ponderado de las desviaciones de cada punto desde la media del componente.
- Los pesos de la mezcla se actualizan mediante

$$\alpha_k^* = \frac{\sum_{i=1}^n \gamma(z_{ik})}{n}$$

- El nuevo peso del componente  $k$ -ésimo corresponde a la probabilidad total de los puntos que pertenecen a este componente, normalizado por la cantidad de puntos

## Inicialización y convergencia

- Este procedimiento convierte a un máximo local
- Se repite hasta que la función de verosimilitud sufra cambios muy pequeños o permanezca constante.
- Toma bastantes más iteraciones que K-means
- Una alternativa es usar este último para encontrar una solución inicial, luego calcular las matrices de covarianza para cada grupo y finalmente, usar esta información para inicializar la mezcla de gaussianas.

## En síntesis ¿Qué es el algoritmo EM?

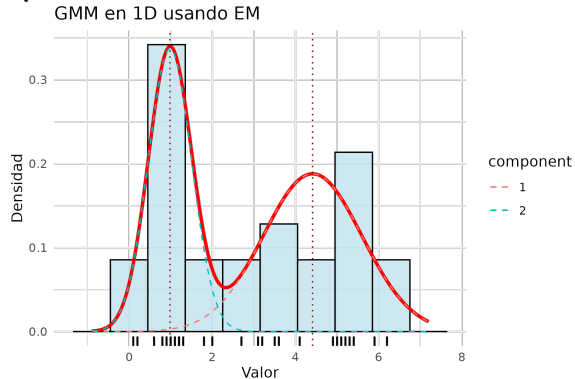
- **E-step (Expectation):** Calcula la probabilidad de que cada punto pertenezca a cada componente (responsabilidades).
- **M-step (Maximization):** Actualiza los parámetros de las gaussianas usando las responsabilidades.
- Se repite hasta que converge el log-likelihood.
- Utilizado para ajustar modelos de mezcla, como el **Gaussian Mixture Model (GMM)**.

# Ejemplo

Datos de entrada **Datos utilizados (1D):**

$$X = \{0.1, 0.2, 0.6, 1.2, 0.8, 1.0, 1.1, 0.9, 1.2, 1.3, 2.0, 1.8, 2.7, 3.2, 3.5, \\ 3.6, 3.1, 4.1, 5.0, 5.1, 4.9, 5.2, 5.3, 5.9, 6.2, 5.4\}$$

**Visualización (histograma):**



## Paso 0: Inicialización

- Se escogen aleatoriamente 2 medias iniciales (por ejemplo, 3.6 y 1.8).
- Se inicializan las varianzas y pesos:

$$\mu_1 = 3.6, \quad \mu_2 = 1.8, \quad \sigma_1^2 = \sigma_2^2 = \text{var}(X), \quad \pi_1 = \pi_2 = 0.5$$

## Paso 1: E-step

- Para cada punto  $x_i$ , calculamos:

$$\gamma_{ik} = \frac{\pi_k \cdot \mathcal{N}(x_i | \mu_k, \sigma_k^2)}{\sum_{j=1}^K \pi_j \cdot \mathcal{N}(x_i | \mu_j, \sigma_j^2)}$$

- Esto nos da una matriz  $N \times K$  de responsabilidades.

## Paso 2: M-step

- Usamos las responsabilidades para actualizar los parámetros:

$$N_k = \sum_{i=1}^N \gamma_{ik}$$

$$\mu_k = \frac{1}{N_k} \sum_{i=1}^N \gamma_{ik} x_i$$

$$\sigma_k^2 = \frac{1}{N_k} \sum_{i=1}^N \gamma_{ik} (x_i - \mu_k)^2$$

$$\pi_k = \frac{N_k}{N}$$



### Paso 3: Iteración y convergencia

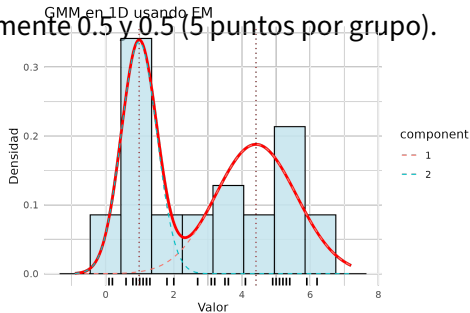
- Repetimos los pasos E y M hasta que:

$$|\text{log-likelihood}_t - \text{log-likelihood}_{t-1}| < \varepsilon$$

- En este ejemplo, converge en pocas iteraciones.

# Resultados finales

- Medias estimadas:  $\mu_1 \approx 1.1$ ,  $\mu_2 \approx 5.1$
- Varianzas pequeñas en cada grupo.
- Pesos aproximadamente 0.5 y 0.5 (5 puntos por grupo).



# Conclusión

- El algoritmo EM permite estimar los parámetros de una mezcla de gaussianas sin etiquetas.
- Es eficiente y converge rápidamente con buenos datos iniciales.
- Este ejemplo muestra cómo segmentar automáticamente dos grupos en datos 1D.