

Dipartimento di Ingegneria Gestionale, dell'Informazione e della Produzione



# IDENTIFICAZIONE DEI MODELLI E ANALISI DEI DATI (IMAD)

Lezione 4: Stima a massima verosimiglianza (maximum likelihood estimation)

Corso di Laurea Magistrale in INGEGNERIA INFORMATICA

**SPEAKER** 

Prof. Mirko Mazzoleni

**PLACE** 

Università degli Studi di Bergamo

## **Syllabus**

#### Parte I: sistemi statici

- 1. Richiami di statistica
- 2. Teoria della stima
  - 2.1 Proprietà degli stimatori
- 3. Stima a minimi quadrati
  - 3.1 Stima di modelli lineari
  - 3.2 Algoritmo del gradient descent
- 4. Stima a massima verosimiglianza
  - 4.1 Proprietà della stima
  - 4.2 Stima di modelli lineari

- 5. Regressione logistica
  - 5.1 Stima di un modello di regressione logistica
- 6. Fondamenti di machine learning
  - 6.1 Bias-Variance tradeoff
  - 6.2 Overfitting
  - 6.3 Regolarizzazione
  - 6.4 Validazione
- 7. Cenni di stima Bayesiana
  - 7.1 Probabilità congiunte, marginali e condizionate
  - 7.2 Connessione con Filtro di Kalman



#### Parte I: sistemi statici

#### Stima parametrica $\hat{\theta}$

- <u>θ deterministico</u>
  - NO assunzioni su ddp dei dati
    - ✓ Stima parametri popolazione
    - ✓ Stima modello lineare: minimi quadrati
  - SI assunzioni su ddp dei dati
    - ✓ Stima massima verosimiglianza parametri popolazione
    - ✓ Stima modello lineare: massima verosimiglianza
    - ✓ Regressione logistica
- <u>θ variabile casuale</u>
  - SI assunzioni su ddp dei dati
    - ✓ Stima Bayesiana

#### **Machine learning**



#### Parte II: sistemi dinamici

#### Stima parametrica $\hat{\theta}$

- <u>θ deterministico</u>
  - NO assunzioni su ddp dei dati
    - ✓ Modelli lineari di pss
    - ✓ Predizione
    - Identificazione
    - Persistente eccitazione
    - ✓ Analisi asintotica metodi PEM
    - ✓ Analisi incertezza stima (numero dati finito)
    - ✓ Valutazione del modello

#### **Outline**

- 1. Stima a massima verosimiglianza
- 2. Stima a massima verosimiglianza di parametri della popolazione
- 3. Stima a massima verosimiglianza di modelli lineari

#### **Outline**

#### 1. Stima a massima verosimiglianza

- 2. Stima a massima verosimiglianza di parametri della popolazione
- 3. Stima a massima verosimiglianza di modelli lineari

Abbiamo presentato finora diversi tipi di stimatori:

• Media campionaria: 
$$\hat{\mu} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} y(i)$$
  $\widehat{\theta} = \mu \in \mathbb{R}$ 

• Varianza campionaria: 
$$S_{N-1}^2 = \frac{1}{N-1} \cdot \sum_{i=1}^N (y(i) - \hat{\mu})^2 \quad \Box \qquad \hat{\theta} = \sigma^2 \in \mathbb{R}$$

un modello lineare:

Stimatore a minimi quadrati di 
$$y(i) = \theta_0 + \theta_1 \varphi_1(i) + \cdots + \theta_{d-1} \varphi_{d-1}(i) + \epsilon(i)$$
 un modello lineare: 
$$\epsilon(i) \text{ indipendenti media nulla e varianza } \lambda^2$$

Gli stimatori presentati sono parametrici, nel senso che stimano dei parametri del sistema che ha generato i dati

• Nel fare ciò, non abbiamo mai fatto assunzioni sulla distribuzione di probabilità dei dati  $\mathcal{D} = \{y(1), y(2), ..., y(N)\}$ 

Il metodo della **massima verosimiglianza** (MLE – Maximum Likelihood Estimation) è una procedura di stima che, **dato un modello probabilistico**, stima i suoi **parametri** in modo tale che siano **più coerenti con i dati** osservati

Supponiamo di avere a disposizione N osservazioni  $Y = [y(1), y(2), ..., y(N)]^T$ , dove

Probability density function

La pdf congiunta dei dati è  $f_Y(y(1), y(2), ..., y(N)|\mu, \sigma^2) = f_Y(Y|\mu, \sigma^2) = \prod_{i=1}^N \mathcal{N}(y(i)|\mu, \sigma^2)$ 

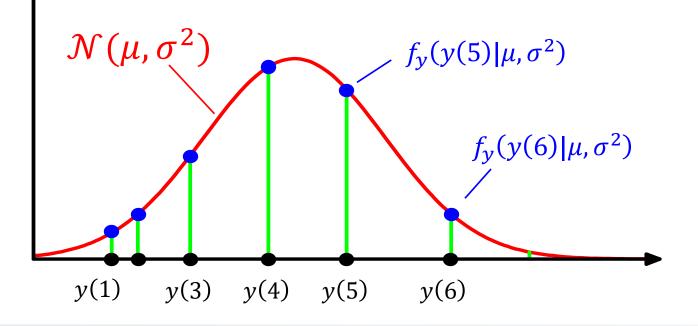
La pdf congiunta  $f_Y(Y|\mu,\sigma^2)$  indica la probabilità che si realizzi il vettore di dati osservato

• Siccome le y(i) sono i.i.d., la probabilità di osservare y(1) AND y(2) AND ... AND y(N) è il **prodotto delle pdf** delle singole variabili

# Esempio: calcolo pdf congiunta, parametri noti

Supponiamo di avere N=6 dati  $\mathcal{D}=\{y(1),y(2),...,y(6)\},\ y(i)\sim\mathcal{N}(\mu,\sigma^2)$  i. i. d.

Il valore assunto dalla pdf congiunta  $f_Y(Y|\mu,\sigma^2)$ , con  $\mu$  e  $\sigma^2$  **noti**, valutata nei dai osservati  $\mathcal{D}$ , è il prodotto dei **pallini blu** 



$$f_{Y}(Y|\mu,\sigma^{2}) = f_{y}(y(1)|\mu,\sigma^{2}) \cdot f_{y}(y(2)|\mu,\sigma^{2}) \cdot f_{y}(y(6)|\mu,\sigma^{2})$$

$$\vdots$$

Se funzione dei dati *Y*, la pdf congiunta è una **distribuzione multivariabile**. lo però **conosco il valore di** *Y*, dato che ho osservato i dati

Se conoscessi anche  $\mu$  e  $\sigma$ , potrei calcolare la probabilità di avere osservato Y. Però **non conosco**  $\mu$  e  $\sigma$ ! E' proprio quello che voglio stimare!

Quando  $f_Y(Y|\mu,\sigma^2)$  (la **pdf congiunta**) è vista in funzione dei parametri  $\mu$  and  $\sigma$ , è chiamata funzione di **likelihood**  $\mathcal{L}(\mu,\sigma^2|Y)$ 

Cambia solo l'interpretazione, ma  $f_Y(Y|\mu,\sigma^2)$  e  $\mathcal{L}(\mu,\sigma^2|Y)$  sono lo stesso oggetto matematico!

#### **Riassunto:**

Variabili non Parametri NOTI note

• Se  $f_Y(Y|\mu,\sigma^2)$  è funzione dei dati Y: pdf multivariabile

Dati NOTI Variabili non note

• Se  $f_Y(Y|\mu, \sigma^2)$  è funzione dei parametri  $\mu$  e  $\sigma^2$ : likelihood  $\mathcal{L}(\mu, \sigma^2|Y)$ 

Di solito si cambia la notazione di  $f_Y(Y|\mu,\sigma^2)$  in  $\mathcal{L}(\mu,\sigma^2|Y)$  per rendere più chiaro chi è supposto noto («a destra della barra |») e chi non è noto («a sinistra della barra |»)

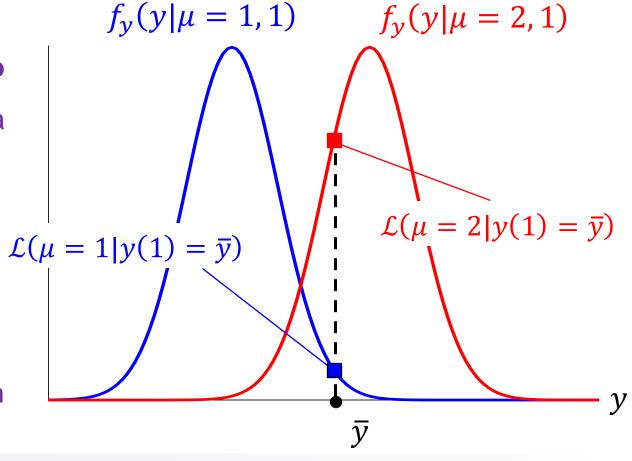
La stima a massima verosimiglianza è quel valore del parametro  $\theta$  che massimizza la verosimiglianza  $\mathcal{L}(\theta|Y)$ 

Esempio: supponiamo di avere un solo dato  $y(1) \sim \mathcal{N}(\mu, \sigma^2 = 1)$ , e che il suo valore sia  $y(1) = \bar{y}$ . Il parametro da stimare è  $\theta = \mu$ 

Notiamo che:

$$\mathcal{L}(\mu = 2|y(1) = \overline{y}) > \mathcal{L}(\mu = 1|y(1) = \overline{y})$$

Per cui  $\mu=2$  è **più verosimile** di  $\mu=1$ , in base a questo modello e questi dati



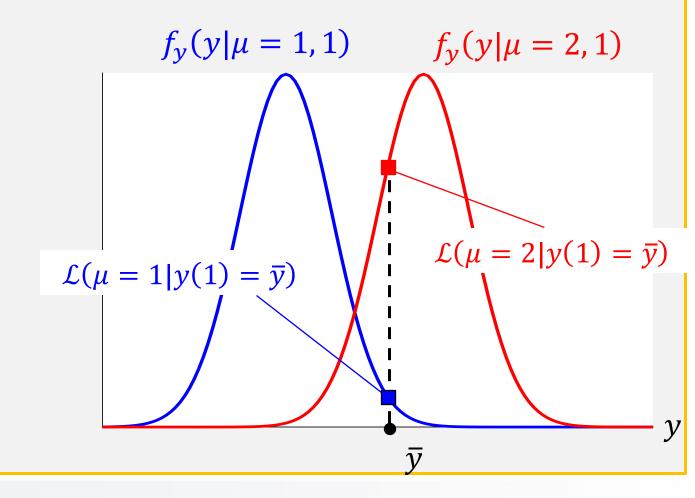
#### QUIZ!

In questo esempio, la **stima a massima verosimiglianza** è:

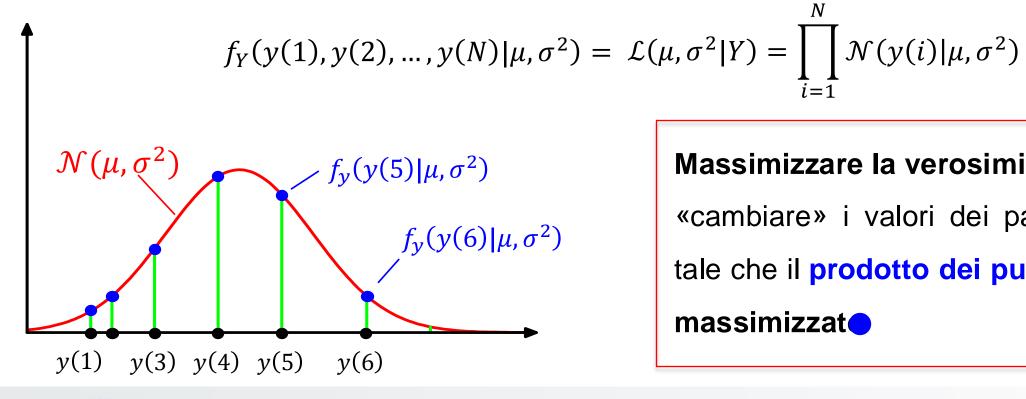
$$\Box \hat{\mu} = 2\bar{y}$$

$$\Box \hat{\mu} = \bar{y}$$

$$\Box \hat{\mu} = 2$$



L'esempio precedente considerava il caso in cui avevamo un solo dato osservato. Nel caso di più osservazioni i.i.d. di  $y \sim \mathcal{N}(\mu, \sigma^2)$ , ovvero  $Y = [y(1), y(2), ..., y(N)]^T$ , devo comunque massimizzare la varosimiglianza, cioè



Massimizzare la verosimiglianza significa «cambiare» i valori dei parametri  $\mu$  e  $\sigma^2$ tale che il prodotto dei puntini blu massimizzat



La stima a massima verosimiglianza dell'esempio precedente può essere espressa come:

$$\widehat{\boldsymbol{\theta}}_{\mathrm{ML}} = \begin{bmatrix} \widehat{\mu} \\ \widehat{\sigma}^2 \end{bmatrix} = \arg\max_{\boldsymbol{\theta}} \mathcal{L}(\boldsymbol{\theta}|Y) = \arg\max_{\boldsymbol{\theta}} \prod_{i=1}^{N} \mathcal{N}(y(i)|\mu, \sigma^2)$$

In generale posso attribuire ai dati qualsiasi distribuzione di probabilità  $d(\ )$ , sia continua che discreta

$$\widehat{\boldsymbol{\theta}}_{\mathrm{ML}} = \arg \max_{\boldsymbol{\theta}} \mathcal{L}(\boldsymbol{\theta}|Y)$$

Spesso, anziché massimizzare  $\mathcal{L}(\boldsymbol{\theta}|Y)$ , si massimizza il suo logaritmo naturale

- Dato che il logaritmo è una funzione monotona crescente,  $\ln \mathcal{L}(\boldsymbol{\theta}|Y)$  ha lo stesso argomento del massimo di  $\mathcal{L}(\boldsymbol{\theta}|Y)$
- Usare il logaritmo è efficiente da un punto di vista implementativo, perchè evita possibili underflow dati dal prodotto di piccole probabilità (sostituendolo con la somma delle logprobabilità)

$$\widehat{\boldsymbol{\theta}}_{\mathrm{ML}} = \arg \max_{\boldsymbol{\theta}} \ln \mathcal{L}(\boldsymbol{\theta}|Y)$$

A meno di casi particolari fortunati, l'ottimizzazione è effettuata con metodi iterativi

# Stima a massima verosimiglianza: proprietà

Lo stimatore a massima verosimiglianza gode di buone proprietà. Infatti, esso è:

1. As intoticamente corretto: 
$$\lim_{N\to+\infty} \mathbb{E}[\widehat{\boldsymbol{\theta}}_{\mathrm{ML}}] = \boldsymbol{\theta}^0$$

Lo stimatore può essere distorto. Per esempio lo stimatore a massima verosimiglianza della varianza di una popolazione Guassiana è distorto

- 2. Consistente: più N è grande, più la stima è precisa
- 3. Asintoticamente efficiente:  $\lim_{N\to+\infty} \mathrm{Var}\big[\widehat{\boldsymbol{\theta}}_{\mathrm{ML}}\big] = M^{-1}$  M: Matrice di informazione di Fisher
- 4. As intoticamente normale:  $\widehat{\boldsymbol{\theta}}_{\text{ML}} \sim \mathcal{N}(\boldsymbol{\theta}^0, M^{-1})$  per  $N \to +\infty$

#### **Outline**

1. Stima a massima verosimiglianza

#### 2. Stima a massima verosimiglianza di parametri della popolazione

3. Stima a massima verosimiglianza di modelli lineari

Consideriamo il caso in cui vogliamo stimare la media  $\mu$  di una popolazione di variabili casuali Gaussiane, supponendo di conoscere la varianza della distribuzione

Assumiamo di avere osservato **2 dati**  $y(i) \sim \mathcal{N}(\mu, \sigma^2 = 1), i = 1,2$ , i.i.d., tali che i valori osservati sono y(1) = 4, y(2) = 6

La forma della **pdf delle singole variabili** y(i) è:

$$f_{y}(y(i)|\mu,\sigma^{2}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^{2}}} \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{y(i)-\mu}{\sigma}\right)^{2}\right] = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left[-\frac{1}{2}(y(i)-\mu)^{2}\right]$$

Il valore assunto dalla pdf in corrispondenza delle due osservazioni è:

$$y(1) = 4$$

$$f_y(y(1) = 4|\mu, \sigma^2 = 1) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left[-\frac{1}{2}(4-\mu)^2\right]$$

$$y(2) = 6$$

$$f_{y}(y(1) = 4|\mu, \sigma^{2} = 1) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left[-\frac{1}{2}(4-\mu)^{2}\right] \qquad f_{y}(y(2) = 6|\mu, \sigma^{2} = 1) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left[-\frac{1}{2}(6-\mu)^{2}\right]$$

La **pdf congiunta** è il prodotto delle due pdf singole (essendo i dati i.i.d.)

$$f_Y(y(1), y(2) | \mu, \sigma^2 = 1) = \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left[-\frac{1}{2}(4 - \mu)^2\right]\right) \cdot \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left[-\frac{1}{2}(6 - \mu)^2\right]\right)$$

La pdf congiunta è funzione solo di  $\mu$ , poichè il valore dei dati è noto. Con questa interpretazione, la pdf congiunta è la funzione di verosimiglianza (likelihood function)

$$\mathcal{L}(\mu|y(1) = 4, y(2) = 6) = \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left[-\frac{1}{2}(4-\mu)^2\right]\right) \cdot \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left[-\frac{1}{2}(6-\mu)^2\right]\right)$$

La stima  $\hat{\mu}_{\mathrm{ML}}$  è valore di  $\mu$  che **massimizza** la verosimiglianza

$$\hat{\mu}_{\text{ML}} = \arg \max_{\mu} \ln \mathcal{L}(\mu | y(1) = 4, y(2) = 6)$$

È più conveniente massimizzare il logaritmo della verosimiglianza. Questa nuova funzione (la

log-verosimiglianza) ha lo stesso massimo della verosimiglianza

$$\ln(\mathcal{L}) = \ln\left[\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{1}{2}(4-\mu)^2\right) \cdot \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{1}{2}(6-\mu)^2\right)\right]$$

$$= \ln\left[\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{1}{2}(4-\mu)^2\right)\right] + \ln\left[\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{1}{2}(6-\mu)^2\right)\right]$$

$$= \ln\frac{1}{\sqrt{2\pi}} + \ln\left[\exp\left(-\frac{1}{2}(4-\mu)^2\right)\right] + \ln\frac{1}{\sqrt{2\pi}} + \ln\left[\exp\left(-\frac{1}{2}(6-\mu)^2\right)\right]$$

$$= 2 \cdot \ln\frac{1}{\sqrt{2\pi}} - \frac{1}{2}(4-\mu)^2 - \frac{1}{2}(6-\mu)^2$$

Massimizzando l'espressione ottenuta rispetto a  $\mu$  otteniamo:

$$\frac{\partial \ln \mathcal{L}}{\partial \mu} = 0 \Rightarrow (4 - \mu) + (6 - \mu) = 0 \Rightarrow \qquad \hat{\mu}_{ML} = \frac{4 + 6}{2} = \boxed{5}$$

La **stima a massima verosimiglianza** del parametro  $\mu$  per il modello Gaussiano è uguale allo stima ottenuta tramite lo **stimatore media campionaria!** 

Questo risultato, seppur non generalizzabile, rende molto interpretabile ed intuitivo lo stimatore a massima verosimiglianza

Osservazione: massimizzare la «log-verosimiglianza» equivale a minimizzare la «meno log-verosimiglianza»

$$\widehat{\boldsymbol{\theta}}_{\mathrm{ML}} = \arg \max_{\boldsymbol{\theta}} \ln[\mathcal{L}(\boldsymbol{\theta}|Y)] = \arg \min_{\boldsymbol{\theta}} \left[ \mathcal{L}(\boldsymbol{\theta}|Y) \right]$$

Formulando il problema di stima a massima verosimiglianza in questo modo, abbiamo un problema di minimizzazione proprio come con lo stimatore a minimi quadrati!

$$\widehat{\boldsymbol{\theta}}_{LS} = \arg\min_{\boldsymbol{\theta}} J(\boldsymbol{\theta}) \qquad J(\boldsymbol{\theta}) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} (y(i) - \boldsymbol{\varphi}^{\mathsf{T}}(i)\boldsymbol{\theta})^{2}$$

$$d \times 1$$

#### **Outline**

- 1. Stima a massima verosimiglianza
- 2. Stima a massima verosimiglianza di parametri della popolazione
- 3. Stima a massima verosimiglianza di modelli lineari

Il metodo della massima verosimiglianza (ML) può essere usato anche per stimare modelli lineari. Quello che bisogna fare è imporre un modello probabilistico alle osservazioni y(i)

$$y(i) = \theta_0 + \theta_1 \varphi_1(i) + \dots + \theta_{d-1} \varphi_{d-1}(i) + \epsilon(i) = \boldsymbol{\varphi}^{\mathsf{T}}(i) \boldsymbol{\theta} + \epsilon(i)$$

$$1 \times d \quad d \times 1 \quad 1 \times 1$$

In particulare, se **assumiamo** che  $\epsilon(i) \sim \mathcal{N}(0, \lambda^2)$  i. i. d.

$$y(i) \sim \mathcal{N}(\boldsymbol{\varphi}^{\mathsf{T}}(i)\boldsymbol{\theta}, \lambda^2)$$
 i. i. d.

$$oldsymbol{arphi} = egin{bmatrix} 1 \ arphi_1 \ draphi_{d imes 1} \end{bmatrix} \quad oldsymbol{ heta} = egin{bmatrix} heta_0 \ heta_1 \ draphi \ heta_{d-1} \end{bmatrix}$$

La media  $\mu(i)$  di y(i) è espressa come combinazione lineare dei regressori,  $\mu(i) = \boldsymbol{\varphi}(i)^{\mathsf{T}} \boldsymbol{\theta}!$ 

La distribuzione congiunta dei dati è:

$$f_Y(y(1), y(2), ..., y(N)|X, \boldsymbol{\theta}, \lambda^2) \stackrel{\text{i.i.d.}}{=} \prod_{i=1}^N f_Y(y(i)|\boldsymbol{\varphi}(i), \boldsymbol{\theta}, \lambda^2)$$

$$= \prod_{i=1}^{N} \mathcal{N}(y(i)|\boldsymbol{\varphi}(i),\boldsymbol{\theta},\lambda^{2})$$

$$= \prod_{i=1}^{N} \frac{1}{\sqrt{2\pi\lambda^2}} \exp \left[ -\frac{1}{2} \left( \frac{y(i) - \boldsymbol{\varphi}^{\mathsf{T}}(i)\boldsymbol{\theta}}{\lambda} \right)^2 \right]$$

= 
$$\mathcal{L}(\boldsymbol{\theta}|Y,X,\lambda^2)$$
 Supponiamo  $\lambda^2$  noto

Calcoliamo la log-verosimiglianza

$$\ln[\mathcal{L}(\boldsymbol{\theta}|Y,X,\lambda^2)] = \ln\left[\prod_{i=1}^{N} \frac{1}{\sqrt{2\pi\lambda^2}} \exp\left[-\frac{1}{2} \left(\frac{y(i) - \boldsymbol{\varphi}^{\mathsf{T}}(i)\boldsymbol{\theta}}{\lambda}\right)^2\right]\right]$$

$$= \sum_{i=1}^{N} \ln \left[ \frac{1}{\sqrt{2\pi\lambda^2}} \exp \left[ -\frac{1}{2} \left( \frac{y(i) - \boldsymbol{\varphi}^{\mathsf{T}}(i)\boldsymbol{\theta}}{\lambda} \right)^2 \right] \right]$$

$$= \sum_{i=1}^{N} \ln \frac{1}{\sqrt{2\pi\lambda^2}} + \sum_{i=1}^{N} \ln \left[ \exp \left[ -\frac{1}{2} \left( \frac{y(i) - \boldsymbol{\varphi}^{\mathsf{T}}(i)\boldsymbol{\theta}}{\lambda} \right)^2 \right] \right]$$

$$\ln[\mathcal{L}(\boldsymbol{\theta}|Y,X,\lambda^2)] = N \cdot \ln \frac{1}{\sqrt{2\pi\lambda^2}} + \sum_{i=1}^{N} -\frac{1}{2} \left( \frac{y(i) - \boldsymbol{\varphi}^{\mathsf{T}}(i)\boldsymbol{\theta}}{\lambda} \right)^2$$

$$= N \cdot \ln(2\pi\lambda^{2})^{-\frac{1}{2}} - \frac{1}{2\lambda^{2}} \sum_{i=1}^{N} (y(i) - \boldsymbol{\varphi}^{\mathsf{T}}(i)\boldsymbol{\theta})^{2}$$

$$= -\frac{1}{2}N \cdot \ln 2\pi \lambda^2 - \frac{1}{2\lambda^2} \sum_{i=1}^{N} (y(i) - \boldsymbol{\varphi}^{\mathsf{T}}(i)\boldsymbol{\theta})^2$$

Calcolare il massimo di  $ln[\mathcal{L}(\boldsymbol{\theta}|Y,X,\lambda^2)]$  è equivalente a calcolare il minimo di

 $-\ln[\mathcal{L}(\boldsymbol{\theta}|Y,X,\lambda^2)]$ , per cui:

Siccome non dipende da  $\theta$ , questo termine non contribuisce al calcolo del minimo

$$-\ln[\mathcal{L}(\boldsymbol{\theta}|Y,X,\lambda^2)] = +\frac{1}{2}N\cdot\ln 2\pi\lambda^2 + \frac{1}{2\lambda^2}\sum_{i=1}^{N}(y(i)-\boldsymbol{\varphi}^{\mathsf{T}}(i)\boldsymbol{\theta})^2$$

$$\widehat{\boldsymbol{\theta}}_{\text{ML}} = \arg\min_{\boldsymbol{\theta}} \frac{1}{2\lambda^2} \sum_{i=1}^{N} (y(i) - \boldsymbol{\varphi}^{\mathsf{T}}(i)\boldsymbol{\theta})^2$$

La stima ML del modello lineare  $y(i) = \varphi^{T}(i)\theta + \epsilon(i)$ , con  $\epsilon(i) \sim \mathcal{N}(0, \lambda^2)$  i. i. d., è **equivalente** alla stima a minimi quadrati (che non aveva assunzioni sulla pdf dei dati)

Osservazione: cambiando ipotesi sulla distribuzione del rumore (e quindi dei dati), si ottengono altre funzioni di costo e altri modelli, che modellano i dati in modo diverso rispetto alla regressione lineare

Uno di questi altri modelli (che vedremo nella prossima lezione) è il modello di regressione logistica



UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI BERGAMO

Dipartimento di Ingegneria Gestionale, dell'Informazione e della Produzione