

1. Problemas de optimización

Modelo general

$$t_n = \phi(x_n)^T w + \eta_n \quad \eta_n \sim N(0, \sigma^2)$$

donde $\phi: \mathbb{R}^p \rightarrow \mathbb{R}^a$

1. Mínimos cuadrados (OLS)

Problema de optimización

$$\min_w \sum_{n=1}^N (t_n - \phi(x_n)^T w)^2$$

solución

$$w^* = (\phi^T \phi)^{-1} \phi^T t$$

$\phi \in \mathbb{R}^{N \times a}$ es la matriz de diseño $\phi_n := \phi(x_n)^T$ y

$$t = [t_1, \dots, t_N]^T$$

2. Mínimos cuadrados regularizados

$$\min_w \sum_{n=1}^N (t_n - \phi(x_n)^T w)^2 + \lambda \|w\|^2$$

solución cerrada

$$w^* = (\phi^T \phi + \lambda I)^{-1} \phi^T t$$

3. Maxima verosimilitud (ML)

Dado el modelo probabilístico con ruido blanco

$$P(t_n | x_n, W) = N(t_n | \phi(x_n)^T W, \sigma_n^2)$$

log-verosimilitud

$$\log p(t|W) = -\frac{1}{2\sigma_n^2} \sum_{n=1}^N (t_n - \phi(x_n)^T W)^2 + \text{cte}$$

Maximizar esta expresión equivale a minimizar
cuadrados ordinarios

4. Máximo a posteriori (MAP)

incluimos un prior gaussiano sobre $W \sim N(0, \alpha^{-1} I)$

$$\log p(W|t) \propto \log p(t|W) + \log p(W)$$

$$= -\frac{1}{2\sigma_n^2} \sum (t_n - \phi(x_n)^T W)^2 - \frac{\alpha}{2} \|W\|^2$$

Equivalente a mínimos cuadrados regularizados

5. Regresión Bayesiana

se calcula la distribución posterior sobre W . No solo su valor MAP

$$P(W|t) = N(W | W_N, S_N)$$

con:

$$- S_N^{-1} = \alpha I + \beta \Phi^T \Phi$$

$$- W_N = \beta S_N \Phi^T \Phi$$

$$\cdot \beta = 1/\sigma_n^2$$

la predicción para un nuevo x_i :

$$P(t_* | x_*, D) = N(\phi(x_*)^T W_N + \phi(x_*)^T S_N \phi(x_*) + \sigma_n^2)$$

6. Regresión con Kernel

En lugar de trabajar con $\phi(x)$, usamos el Kernel Trick.

$$K_{ij} = K(x_i, x_j)$$

la solución tiene la forma dual

$$\varphi = (K + \lambda I)^{-1} t$$

Predicción

$$t_* = \sum_{n=1}^N \varphi_n K(x_n, x_*)$$

7. Procesos Gaussianos

Modelado completamente probabilístico sobre Funciones

$$f(x) \sim GP(0, K(x, x'))$$

dado el ruido σ_n^2 la predicción es:

$$P(t_* | x_*, D) = N(\mu_*, \sigma_*^2)$$

con

$$\mu_* = K_*^T (K + \sigma_n^2 I)^{-1} t$$

$$\sigma_*^2 = K(x_*, x_*) - K_*^T (K + \sigma_n^2 I)^{-1} K_*$$