Regresión lineal y estimación

Mauricio A. Álvarez

Modelos probabilísticos profundos AIR Institute

Contenido

Modelo lineal

Máxima verosimilituo

Regularización

Laboratorio

Regresión Bayesiana Lineal

Laboratorio

Tema adicional: expresión para $\ln p(\mathbf{t}|\alpha,\beta)$

Modelo de base lineal

 Regresión lineal. El modelo más simple de regresión lineal consiste de una combinación lineal de las variables de entrada

$$y(\mathbf{x}, \mathbf{w}) = w_0 + w_1 x_1 + \ldots + w_D x_D.$$

 El modelo anterior se puede extender para combinaciones lineales de funciones no lineales fijas de las variables de entrada,

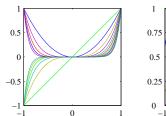
$$y(\mathbf{x}, \mathbf{w}) = w_0 + \sum_{i=1}^{M-1} w_i \phi_i(\mathbf{x}) = \mathbf{w}^{\top} \phi(\mathbf{x}),$$

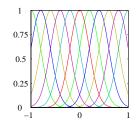
donde $\phi_i(\mathbf{x})$ son funciones base, M es el número de parámetros del modelo, y w_0 es el desplazamiento.

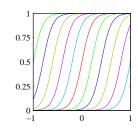
□ Igualmente, $\mathbf{w} = [w_0 \cdots w_{M-1}]^\top$, $\phi(\mathbf{x}) = [\phi_0(\mathbf{x}) \cdots \phi_{M-1}(\mathbf{x})]^\top$.



Ejemplos funciones base







Polinomial:
$$\phi_i(x) = x^i$$
.

Exponencial:
$$\phi_i(x) = \exp\left\{-\frac{(x-\mu_i)^2}{2s^2}\right\}$$

Sigmoidal:
$$\phi_i(x) = \sigma(\frac{x-\mu_i}{s}), \ \sigma(a) = 1/(1 + \exp(-a)).$$

Contenido

Modelo lineal

Máxima verosimilitud

Regularización

Laboratorio

Regresión Bayesiana Lineal

Laboratorio

Tema adicional: expresión para $\ln p(\mathbf{t}|\alpha,\beta)$

Máxima verosimilitud (I)

Supongamos t dado como

$$t = y(\mathbf{x}, \mathbf{w}) + \epsilon,$$

donde $\epsilon \sim \mathcal{N}(0, \beta^{-1})$.

La incertidumbre en t está dada como

$$p(t|\mathbf{x}, \mathbf{w}, \beta) = \mathcal{N}(t|y(\mathbf{x}, \mathbf{w}), \beta^{-1}).$$

Consideremos un conjunto de datos (de entrenamiento)

$$\begin{aligned} \boldsymbol{X} &= \{\boldsymbol{x}_1, \cdots, \boldsymbol{x}_N\}, \\ \boldsymbol{t} &= \{t_1, \cdots, t_N\} \end{aligned}$$

Máxima verosimilitud (II)

Suponiendo que los datos son iid

$$p(\mathbf{t}|\mathbf{X},\mathbf{w},\beta) = \prod_{n=1}^{N} \mathcal{N}(t_n|\mathbf{w}^{\top}\phi(\mathbf{x}_n),\beta^{-1}).$$

Tomando el logaritmo de la verosimilitud se tiene

$$\ln p(\mathbf{t}|\mathbf{X}, \mathbf{w}, \beta) = \sum_{n=1}^{N} \mathcal{N}(t_n | \mathbf{w}^{\top} \phi(\mathbf{x}_n), \beta^{-1})$$
$$= \frac{N}{2} \ln \beta - \frac{N}{2} \ln(2\pi) - \beta E_D(\mathbf{w}),$$

donde

$$E_D(\mathbf{w}) = \frac{1}{2} \sum_{n=1}^{N} \{t_n - y(\mathbf{x}_n)\}^2.$$

 \Box Cuáles son los **w**, y el parámetro β que mejor explican los datos.



Máxima verosimilitud (III)

- □ Maximizar la verosimilitud es equivalente a minimizar $-\beta E_D(\mathbf{w})$.
- De nuevo,

$$E_D(\mathbf{w}) = \frac{1}{2} \sum_{n=1}^{N} \{t_n - \mathbf{w}^{\top} \phi(\mathbf{x}_n)\}^2$$
$$= \frac{1}{2} (\mathbf{t} - \Phi \mathbf{w})^{\top} (\mathbf{t} - \Phi \mathbf{w}),$$

donde

$$\boldsymbol{\Phi} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{\phi}(\mathbf{x}_1)^\top \\ \boldsymbol{\phi}(\mathbf{x}_2)^\top \\ \vdots \\ \boldsymbol{\phi}(\mathbf{x}_N)^\top \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \phi_0(\mathbf{x}_1) & \phi_1(\mathbf{x}_1) & \cdots & \phi_{M-1}(\mathbf{x}_1) \\ \phi_0(\mathbf{x}_2) & \phi_1(\mathbf{x}_2) & \cdots & \phi_{M-1}(\mathbf{x}_2) \\ \vdots \\ \phi_0(\mathbf{x}_N) & \phi_1(\mathbf{x}_N) & \cdots & \phi_{M-1}(\mathbf{x}_N) \end{bmatrix}$$

Máxima verosimilitud (IV)

La verosimilitud logarítmica está dada entonces como

$$\ln p(\mathbf{t}|\mathbf{X},\mathbf{w},\beta) = \frac{N}{2} \ln \beta - \frac{N}{2} \ln(2\pi) - \frac{\beta}{2} \left(\mathbf{t} - \Phi \mathbf{w}\right)^{\top} \left(\mathbf{t} - \Phi \mathbf{w}\right),$$

Se tiene entonces,

$$\begin{split} \frac{\partial \ln \rho(\mathbf{t}|\mathbf{X},\mathbf{w},\beta)}{\partial \mathbf{w}} &= -\frac{\beta}{2} \frac{\partial}{\partial \mathbf{w}} \left[(\mathbf{t} - \Phi \mathbf{w})^{\top} (\mathbf{t} - \Phi \mathbf{w}) \right] \\ &= -\frac{\beta}{2} \frac{\partial}{\partial \mathbf{w}} \left[\mathbf{t}^{\top} \mathbf{t} - 2 \mathbf{t}^{\top} \Phi \mathbf{w} + \mathbf{w}^{\top} \Phi^{\top} \Phi \mathbf{w} \right] \end{split}$$

Recordemos las siguientes derivadas

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} (\mathbf{a}^{\top} \mathbf{x}) = \mathbf{a}, \qquad \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} (\mathbf{x}^{\top} \mathbf{A} \mathbf{x}) = (\mathbf{A} + \mathbf{A}^{\top}) \mathbf{x}.$$



Máxima verosimilitud (V)

Esto significa que

$$\frac{\partial \ln \textit{p}(\mathbf{t}|\mathbf{X},\mathbf{w},\beta)}{\partial \mathbf{w}} = \beta \left[\mathbf{\Phi}^{\top}\mathbf{t} - \mathbf{\Phi}^{\top}\mathbf{\Phi}\mathbf{w} \right].$$

□ La solución de máxima verosimilitud para **w** está dada como

$$\mathbf{w}_{\mathit{ML}} = (\mathbf{\Phi}^{\top}\mathbf{\Phi})^{-1}\mathbf{\Phi}^{\top}\mathbf{t},$$

donde $\Phi^{\dagger} \equiv (\Phi^{\top}\Phi)^{-1}\Phi^{\top}$ es la pseudo-inversa Moore-Penrose.

 $lue{}$ La solución de máxima verosimilitud para eta se obtiene de

$$\frac{\partial \ln p(\mathbf{t}|\mathbf{X}, \mathbf{w}, \beta)}{\partial \beta} = \frac{N}{2\beta} - \frac{1}{2} (\mathbf{t} - \Phi \mathbf{w})^{\top} (\mathbf{t} - \Phi \mathbf{w}).$$

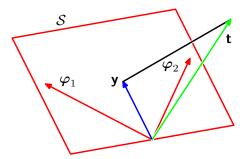
Y así,

$$\frac{1}{\beta_{ML}} = \frac{1}{N} (\mathbf{t} - \mathbf{\Phi} \mathbf{w}_{ML})^{\top} (\mathbf{t} - \mathbf{\Phi} \mathbf{w}_{ML}) = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^{N} \{t_n - \mathbf{w}_{ML}^{\top} \phi(\mathbf{x}_n)\}^2.$$



Interpretación geométrica

Se quiere aproximar el vector t usando el vector y



La aproximación corresponde a la proyección ortogonal del vector ${\bf t}$ en el subespacio de los φ_i , donde φ_i es una columna de Φ .

Contenido

Modelo lineal

Máxima verosimilituo

Regularización

Laboratorio

Regresión Bayesiana Lineal

Laboratorio

Tema adicional: expresión para $\ln p(\mathbf{t}|\alpha,\beta)$

Definición

- Controlar el sobre entrenamiento.
- La función de error toma la forma

$$E_D(\mathbf{w}) + \lambda E_W(\mathbf{w}) = \frac{1}{2} \sum_{n=1}^N \{t_n - \mathbf{w}^\top \phi(\mathbf{x}_n)\}^2 + \frac{\lambda}{2} \mathbf{w}^\top \mathbf{w},$$

donde $E_W(\mathbf{w}) = \frac{1}{2}\mathbf{w}^{\top}\mathbf{w}$.

 \square El valor de **w** que minimiza $E_D(\mathbf{w}) + \lambda E_W(\mathbf{w})$ está dado por

$$\mathbf{W} = (\lambda \mathbf{I} + \mathbf{\Phi}^{\top} \mathbf{\Phi})^{-1} \mathbf{\Phi}^{\top} \mathbf{t}.$$

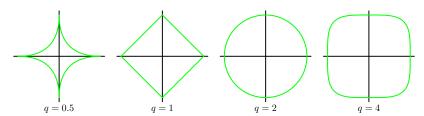


Alternativas de regularización

En general, la función de error toma la forma

$$E(\mathbf{w}) = \frac{1}{2} \sum_{n=1}^{N} \{t_n - \mathbf{w}^{\top} \phi(\mathbf{x}_n)\}^2 + \frac{\lambda}{2} \sum_{j=0}^{M-1} |w_j|^q.$$

- \Box El caso q = 2 es el regularizador cuadrático anterior.
- \Box El caso q = 1 se conoce como la regresión **lasso**.



Contenido

Modelo lineal

Máxima verosimilituo

Regularización

Laboratorio

Regresión Bayesiana Lineal

Laboratorio

Tema adicional: expresión para $\ln p(\mathbf{t}|\alpha,\beta)$

Laboratorio I

Python: máxima verosimilitud para regresión.

Contenido

Modelo lineal

Máxima verosimilituo

Regularización

Laboratorio

Regresión Bayesiana Lineal

Laboratorio

Tema adicional: expresión para $\ln p(\mathbf{t}|\alpha,\beta)$

Definiciones

- Una alternativa a la regularización es el tratamiento Bayesiano.
- Como hemos dicho, la verosimilitud del modelo está dada como

$$p(\mathbf{t}|\mathbf{w},\beta) = \mathcal{N}(\mathbf{t}|\mathbf{\Phi}\mathbf{w},\beta^{-1}\mathbf{I}).$$

- Lo que se hizo en máxima verosimilitud fue realizar una estimación puntual para \mathbf{w} , que denotamos como \mathbf{w}_{ML} .
- En estimación Bayesiana, asumimos un prior para w y calculamos la probabilidad a posteriori de w dados los datos t.
- El posterior sobre w se usa para hacer predicciones.

Teorema de Bayes

Para calcular el posterior sobre w usamos el teorema de Bayes

$$p(\mathbf{w}|\mathbf{t}) = \frac{p(\mathbf{t}|\mathbf{w})p(\mathbf{w})}{p(\mathbf{t})},$$

donde $p(\mathbf{t})$ es la evidencia, $p(\mathbf{t}|\mathbf{w})$ es la verosimilitud y $p(\mathbf{w})$ es el prior.

- Usando el modelo $t = y(\mathbf{w}, \mathbf{x}) + \epsilon$ (con $\epsilon \sim \mathcal{N}(0, \beta^{-1})$), la verosimilitud es conocida.
- Dependiendo del prior que se escoja para w, es posible calcular analíticamente el posterior.
- Se dice que un prior es conjugado a una verosimilitud, si el posterior tiene la misma forma del prior.

Prior y posterior

- Asumiendo que el prior es Gaussiano, el posterior es igualmente Gaussiano.
- □ En particular, supongamos que $p(\mathbf{w}) = \mathcal{N}(\mathbf{w}|\mathbf{m}_0, \mathbf{S}_0)$.
- Usando propiedades de la Gaussiana, se puede demostrar que

$$\rho(\mathbf{w}|\mathbf{t}) = \frac{\rho(\mathbf{t}|\mathbf{w})\rho(\mathbf{w})}{\rho(\mathbf{t})} = \frac{\mathcal{N}(\mathbf{t}|\Phi\mathbf{w}, \beta^{-1}\mathbf{I})\mathcal{N}(\mathbf{w}|\mathbf{m}_0, \mathbf{S}_0)}{\rho(\mathbf{t})} = \mathcal{N}(\mathbf{w}|\mathbf{m}_N, \mathbf{S}_N),$$

donde

$$\begin{aligned} \mathbf{m}_N &= \mathbf{S}_N (\mathbf{S}_0^{-1} \mathbf{m}_0 + \beta \boldsymbol{\Phi}^\top \mathbf{t}) \\ \mathbf{S}_N^{-1} &= \mathbf{S}_0^{-1} + \beta \boldsymbol{\Phi}^\top \boldsymbol{\Phi}. \end{aligned}$$



Un paréntesis: propiedades de la Gaussiana

Dadas una distribución Gaussiana marginal para \mathbf{x} , y una distribución Gaussiana condicional para \mathbf{y} , dado \mathbf{x} , de la forma

$$egin{aligned}
ho(\mathbf{x}) &= \mathcal{N}(\mathbf{x}|oldsymbol{\mu}, oldsymbol{\Lambda}^{-1}) \
ho(\mathbf{y}|\mathbf{x}) &= \mathcal{N}(\mathbf{y}|\mathbf{A}\mathbf{x}+\mathbf{b}, \mathbf{L}^{-1}), \end{aligned}$$

la distribución marginal de \mathbf{y} , y la distribución condicional de \mathbf{x} dado \mathbf{y} están dadas como

$$egin{aligned} & oldsymbol{
ho}(\mathbf{y}) = \mathcal{N}(\mathbf{y}|\mathbf{A}oldsymbol{\mu} + \mathbf{b}, \mathbf{L}^{-1} + \mathbf{A}oldsymbol{\Lambda}^{-1}\mathbf{A}^{ op}) \ & oldsymbol{
ho}(\mathbf{x}|\mathbf{y}) = \mathcal{N}(\mathbf{x}|\mathbf{\Sigma}\{\mathbf{A}^{ op}\mathbf{L}(\mathbf{y} - \mathbf{b}) + \mathbf{\Lambda}oldsymbol{\mu}\}, \mathbf{\Sigma}), \end{aligned}$$

donde

$$\Sigma = (\Lambda + \mathbf{A}^{\top} \mathbf{L} \mathbf{A})^{-1}.$$

(Demostración: pgs 90-93, Bishop, C. (2006)).



Prior más simple

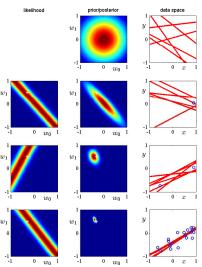
- un prior más sencillo sigue la forma $p(\mathbf{w}) = \mathcal{N}(\mathbf{w}|\mathbf{0}, \alpha^{-1}\mathbf{I}).$
- El posterior está dado como

$$p(\mathbf{w}|\mathbf{t}) = \mathcal{N}(\mathbf{w}|\mathbf{m}_N, \mathbf{S}_N),$$

donde

$$\mathbf{m}_{N} = \beta \mathbf{S}_{N} \mathbf{\Phi}^{\top} \mathbf{t}$$
$$\mathbf{S}_{N}^{-1} = \alpha \mathbf{I} + \beta \mathbf{\Phi}^{\top} \mathbf{\Phi}.$$

Ejemplo: posterior



$$\beta^{-1} = 0.04, \alpha = 2, w_0 = -0.3, w_1 = 0.5.$$



Maximum A Posteriori (MAP)

 La regularización se puede ver como estimación Maximum A Posteriori (MAP).

El logaritmo del posterior es una función de w

$$\ln p(\mathbf{w}|\mathbf{t}) = -\frac{\beta}{2} \sum_{n=1}^{N} \{t_n - \mathbf{w}^{\top} \phi(\mathbf{x}_n)\}^2 - \frac{\alpha}{2} \mathbf{w}^{\top} \mathbf{w} + \text{const.}$$

□ Equivalente a la regularización si $\lambda = \alpha/\beta$.

Distribución predictiva

- □ **Objetivo**: hacer predicciones de *t* para nuevos valores **x**.
- Denotemos ese nuevo valor de entrada como \mathbf{x}_* , y la predicción resultante como t_* .
- $lue{}$ La distribución predictiva para t_* está dada como

$$p(t_*|\mathbf{t},\alpha,\beta,\mathbf{x}_*) = \int p(t_*|\mathbf{w},\beta,\mathbf{x}_*)p(\mathbf{w}|\mathbf{t},\alpha,\beta)d\mathbf{w}.$$

 Usando las propiedades de la Gaussiana (diapositiva anterior) se puede demostrar que

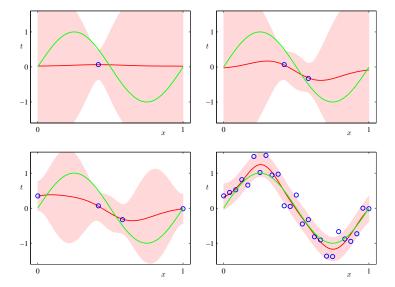
$$\rho(t_*|\mathbf{t},\alpha,\beta,\mathbf{x}_*) = \mathcal{N}(t_*|\mathbf{m}_N^\top \phi(\mathbf{x}_*),\sigma_N^2(\mathbf{x}_*)),$$

donde
$$\sigma_N^2(\mathbf{x}_*) = \beta^{-1} + \phi(\mathbf{x}_*)^{\top} \mathbf{S}_N \phi(\mathbf{x}_*).$$

□ *Importante*: nótese que se ha asumido que β y α son conocidos.

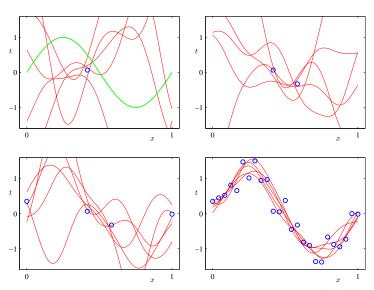


Ejemplo: distribución predictiva



Ejemplo: otra representación

Se muestrea el posterior $p(\mathbf{w}|\mathbf{t})$, y luego se grafica $y(\mathbf{x}, \mathbf{w})$.



Aproximación de la evidencia (I)

 $\ \square$ Si no se conocen α y β , cómo se pueden estimar a partir del conjunto de entrenamiento?

 $\hfill\Box$ En un tratamiento Bayesiano general, se ponen priors sobre α y β y se calculan los posteriores.

Alternativamente, se puede estimar como los parámetros que maximizan la evidencia $p(\mathbf{t}|\alpha,\beta)$.

Este método se conoce como máxima verosimilitud tipo II, aproximación de la evidencia, Bayes empírico.

Aproximación de la evidencia (II)

La evidencia está dada como

$$p(\mathbf{t}|\alpha,\beta) = \int p(\mathbf{t}|\mathbf{w},\beta)p(\mathbf{w}|\alpha)d\mathbf{w},$$
 evidencia $= \int \text{verosimilitud x prior}$

Reemplazando en la integral $p(\mathbf{t}|\mathbf{w}, \beta)$, y $p(\mathbf{w}|\alpha)$ se obtiene

$$p(\mathbf{t}|\alpha,\beta) = \left(\frac{\beta}{2\pi}\right)^{N/2} \left(\frac{\alpha}{2\pi}\right)^{M/2} \int \exp\{-E(\mathbf{w})\} d\mathbf{w},$$

donde

$$\begin{split} E(\mathbf{w}) &= \beta E_{D}(\mathbf{w}) + \alpha E_{W}(\mathbf{w}) \\ &= \frac{\beta}{2} \|\mathbf{t} - \mathbf{\Phi} \mathbf{w}\|^{2} + \frac{\alpha}{2} \mathbf{w}^{\top} \mathbf{w}. \end{split}$$

Aproximación de la evidencia (III)

 Se quiere integrar sobre w. Para eso se completa el cuadrado obteniéndose

$$E(\mathbf{w}) = E(\mathbf{m}_N) + \frac{1}{2} (\mathbf{w} - \mathbf{m}_N)^{\top} \mathbf{A} (\mathbf{w} - \mathbf{m}_N),$$

donde $\mathbf{m}_N = \beta \mathbf{A}^{-1} \mathbf{\Phi}^{\top} \mathbf{t}$, $\mathbf{A} = \alpha \mathbf{I} + \beta \mathbf{\Phi}^{\top} \mathbf{\Phi}$, y

$$E(\mathbf{m}_N) = \frac{\beta}{2} \|\mathbf{t} - \Phi \mathbf{m}_N\|^2 + \frac{\alpha}{2} \mathbf{m}_N^\top \mathbf{m}_N.$$

Nótese que

$$\nabla \nabla E(\mathbf{w}) = \mathbf{A},$$

es la matriz Hessiana.



Aproximación de la evidencia (IV)

Para calcular la integral se tiene entonces

$$\begin{split} \int \exp\{-E(\mathbf{w})\}d\mathbf{w} &= \exp\{-E(\mathbf{m}_N)\} \times \\ &\int \exp\left\{-\frac{1}{2} \left(\mathbf{w} - \mathbf{m}_N\right)^\top \mathbf{A} \left(\mathbf{w} - \mathbf{m}_N\right)\right\} d\mathbf{w} \\ &= \exp\{-E(\mathbf{m}_N)\} (2\pi)^{M/2} |\mathbf{A}|^{-1/2}. \end{split}$$

La evidencia logarítmica es entonces igual a

$$\ln p(\mathbf{t}|\alpha,\beta) = \frac{M}{2}\ln(\alpha) + \frac{N}{2}\ln(\beta) - E(\mathbf{m}_N) - \frac{1}{2}\ln|\mathbf{A}| - \frac{N}{2}\ln(2\pi).$$

Maximización con respecto a α (I)

 Recordemos que el determinante de una matriz cuadrada P se puede calcular como

$$|\mathbf{P}| = \prod_i p_i, \qquad p_i = eig(\mathbf{P}).$$

En la expresión anterior

$$|\mathbf{A}| = |\alpha \mathbf{I} + \beta \mathbf{\Phi}^{\top} \mathbf{\Phi}| = \prod_{i} (\alpha + \lambda_{i}),$$

donde λ_i es el *i*-ésimo valor propio de la matriz $\beta \Phi^{\top} \Phi$.

 $lue{}$ El valor propio λ_i se puede calcular resolviendo la siguiente ecuación espectral

$$(\beta \mathbf{\Phi}^{\top} \mathbf{\Phi}) \mathbf{u}_i = \lambda_i \mathbf{u}_i.$$



Maximización con respecto a α (II)

Usando el resultado anterior, la derivada de $\ln p(\mathbf{t}|\alpha,\beta)$ con respecto a α sigue

$$\frac{\partial \ln \textit{p}(\textbf{t}|\alpha,\beta)}{\partial \alpha} = \frac{\textit{M}}{2\alpha} - \frac{1}{2} \textbf{m}_{\textit{N}}^{\top} \textbf{m}_{\textit{N}} - \frac{1}{2} \sum_{\textit{i}} \frac{1}{\alpha + \lambda_{\textit{i}}}.$$

 $lue{}$ Igualando a cero y despejando lpha se encuentra

$$\alpha = \frac{\gamma}{\mathbf{m}_{N}^{\top} \mathbf{m}_{N}},$$

donde
$$\gamma = \sum_{i} \frac{\lambda_i}{\alpha + \lambda_i}$$
.

Nótese que esta es una solución implícita para α , porque γ y \mathbf{m}_N dependen de α . La solución es iterativa.

Maximización con respecto a β (I)

$$\lambda_i \mathbf{u}_i = (\beta \mathbf{\Phi}^\top \mathbf{\Phi}) \mathbf{u}_i.$$

 $lue{}$ Derivando a ambos lados la expresión anterior con respecto a eta

$$\frac{\mathbf{d}\lambda_i}{\mathbf{d}\beta} = \frac{\lambda_i}{\beta}.$$

Maximización con respecto a β (II)

Usando el resultado anterior, la derivada de $\ln p(\mathbf{t}|\alpha,\beta)$ con respecto a β sigue

$$\frac{\partial \ln p(\mathbf{t}|\alpha,\beta)}{\partial \beta} = \frac{N}{2\beta} - \frac{1}{2} \|\mathbf{t} - \mathbf{\Phi} \mathbf{m}_N\|^2 - \frac{\gamma}{2\beta}.$$

 $lue{}$ Igualando a cero y despejando eta se obtiene

$$\frac{1}{\beta} = \frac{1}{N - \gamma} \|\mathbf{t} - \Phi \mathbf{m}_N\|^2.$$

De nuevo esta es una solución implícita para β , porque \mathbf{m}_N depende de β . La solución es iterativa.

Contenido

Modelo lineal

Máxima verosimilituo

Regularización

Laboratorio

Regresión Bayesiana Linea

Laboratorio

Tema adicional: expresión para $\ln p(\mathbf{t}|\alpha,\beta)$

Laboratorio I

Python: regresión lineal Bayesiana.

Contenido

Modelo lineal

Máxima verosimilituo

Regularización

Laboratorio

Regresión Bayesiana Lineal

Laboratorio

Tema adicional: expresión para $\ln p(\mathbf{t}|\alpha,\beta)$

Solución 1 (a)

Se comienza con

$$\begin{aligned} & p(\mathbf{w}) = \mathcal{N}(\mathbf{w}|\mathbf{0}, \alpha^{-1}\mathbf{I}) \\ & p(\mathbf{t}|\mathbf{w}) = \mathcal{N}(\mathbf{t}|\mathbf{\Phi}\mathbf{w}, \beta^{-1}\mathbf{I}). \end{aligned}$$

 Marginalizando w, usando propiedades de las Gaussianas multivariadas

$$p(\mathbf{t}|\alpha,\beta) = \mathcal{N}(\mathbf{t}|\mathbf{0},\beta^{-1}\mathbf{I} + \alpha^{-1}\mathbf{\Phi}\mathbf{\Phi}^{\top}).$$

■ El logaritmo ln $p(\mathbf{t}|\alpha,\beta)$ está dado como

$$-\frac{N}{2}\ln 2\pi - \frac{1}{2}\ln |\beta^{-1}\mathbf{I} + \alpha^{-1}\mathbf{\Phi}\mathbf{\Phi}^{\top}| - \frac{1}{2}\mathbf{t}^{\top}(\beta^{-1}\mathbf{I} + \alpha^{-1}\mathbf{\Phi}\mathbf{\Phi}^{\top})^{-1}\mathbf{t}$$



Solución 1 (b)

 Se aplica la identidad de Woodbury, y el lemma del determinante de matrices

$$(\beta^{-1}\mathbf{I} + \alpha^{-1}\mathbf{\Phi}\mathbf{\Phi}^{\top})^{-1} = \beta\mathbf{I} - \beta\mathbf{I}\mathbf{\Phi}(\alpha\mathbf{I} + \beta\mathbf{\Phi}^{\top}\mathbf{\Phi})^{-1}\mathbf{\Phi}^{\top}(\beta\mathbf{I}),$$
$$|\beta^{-1}\mathbf{I} + \alpha^{-1}\mathbf{\Phi}\mathbf{\Phi}^{\top}| = |\alpha\mathbf{I} + \beta\mathbf{\Phi}^{\top}\mathbf{\Phi}||\alpha^{-1}\mathbf{I}||\beta^{-1}\mathbf{I}|$$

Reemplazando en la expresión del logaritmo

$$\begin{split} & -\frac{\textit{N}}{2} \ln 2\pi - \frac{1}{2} \ln |\mathbf{A}| + \frac{\textit{M}}{2} \ln \alpha + \frac{\textit{N}}{2} \ln \beta \\ & -\frac{1}{2} \mathbf{t}^\top \left[\beta \mathbf{I} - \beta \mathbf{I} \mathbf{\Phi} (\alpha \mathbf{I} + \beta \mathbf{\Phi}^\top \mathbf{\Phi})^{-1} \mathbf{\Phi}^\top (\beta \mathbf{I}) \right] \mathbf{t} \end{split}$$

Solución 1 (c)

La expresión anterior se puede escribir como

$$\begin{split} &\frac{M}{2}\ln\alpha + \frac{N}{2}\ln\beta - \frac{1}{2}\ln|\mathbf{A}| - \frac{N}{2}\ln2\pi \\ &-\frac{\beta}{2}\mathbf{t}^{\top}\mathbf{t} + \frac{1}{2}\mathbf{t}^{\top}(\beta\mathbf{I})\mathbf{\Phi}\mathbf{A}^{-1}\mathbf{\Phi}^{\top}(\beta\mathbf{I})\mathbf{t} \end{split}$$

Queda por demostrar que

$$\begin{split} -E(\mathbf{m}_N) &= -\frac{\beta}{2} \|\mathbf{t} - \mathbf{\Phi} \mathbf{m}_N\|^2 - \frac{\alpha}{2} \mathbf{m}_N^\top \mathbf{m}_N \\ &= -\frac{\beta}{2} \mathbf{t}^\top \mathbf{t} + \frac{1}{2} \mathbf{t}^\top (\beta \mathbf{I}) \mathbf{\Phi} \mathbf{A}^{-1} \mathbf{\Phi}^\top (\beta \mathbf{I}) \mathbf{t} \\ &= -\frac{\beta}{2} \mathbf{t}^\top \mathbf{t} + \frac{\beta^2}{2} \mathbf{t}^\top \mathbf{\Phi} \mathbf{A}^{-1} \mathbf{\Phi}^\top \mathbf{t} \end{split}$$

Solución 1 (d)

- □ Recordemos que $\mathbf{m}_N = \beta \mathbf{A}^{-1} \mathbf{\Phi}^{\top} \mathbf{t}$.
- De esta forma

$$\begin{split} &-\frac{\beta}{2}\|\mathbf{t}-\boldsymbol{\Phi}\mathbf{m}_{N}\|^{2}-\frac{\alpha}{2}\mathbf{m}_{N}^{\top}\mathbf{m}_{N}\\ &-\frac{\beta}{2}\mathbf{t}^{\top}\mathbf{t}+\beta\mathbf{t}^{\top}\boldsymbol{\Phi}\mathbf{m}_{N}-\frac{\beta}{2}\mathbf{m}_{N}^{\top}\boldsymbol{\Phi}^{\top}\boldsymbol{\Phi}\mathbf{m}_{N}-\frac{\alpha}{2}\mathbf{m}_{N}^{\top}\mathbf{m}_{N}\\ &-\frac{\beta}{2}\mathbf{t}^{\top}\mathbf{t}+\beta\mathbf{t}^{\top}\boldsymbol{\Phi}\mathbf{m}_{N}-\frac{1}{2}\mathbf{m}_{N}^{\top}(\beta\boldsymbol{\Phi}^{\top}\boldsymbol{\Phi}+\alpha\mathbf{I})\mathbf{m}_{N}\\ &-\frac{\beta}{2}\mathbf{t}^{\top}\mathbf{t}+\beta\mathbf{t}^{\top}\boldsymbol{\Phi}\beta\mathbf{A}^{-1}\boldsymbol{\Phi}^{\top}\mathbf{t}-\frac{\beta}{2}\mathbf{t}^{\top}\boldsymbol{\Phi}\mathbf{A}^{-\top}\mathbf{A}\beta\mathbf{A}^{-1}\boldsymbol{\Phi}^{\top}\mathbf{t}\\ &-\frac{\beta}{2}\mathbf{t}^{\top}\mathbf{t}+\beta^{2}\mathbf{t}^{\top}\boldsymbol{\Phi}\mathbf{A}^{-1}\boldsymbol{\Phi}^{\top}\mathbf{t}-\frac{\beta^{2}}{2}\mathbf{t}^{\top}\boldsymbol{\Phi}\mathbf{A}^{-1}\boldsymbol{\Phi}^{\top}\mathbf{t}\\ &-\frac{\beta}{2}\mathbf{t}^{\top}\mathbf{t}+\frac{\beta^{2}}{2}\mathbf{t}^{\top}\boldsymbol{\Phi}\mathbf{A}^{-1}\boldsymbol{\Phi}^{\top}\mathbf{t} \end{split}$$