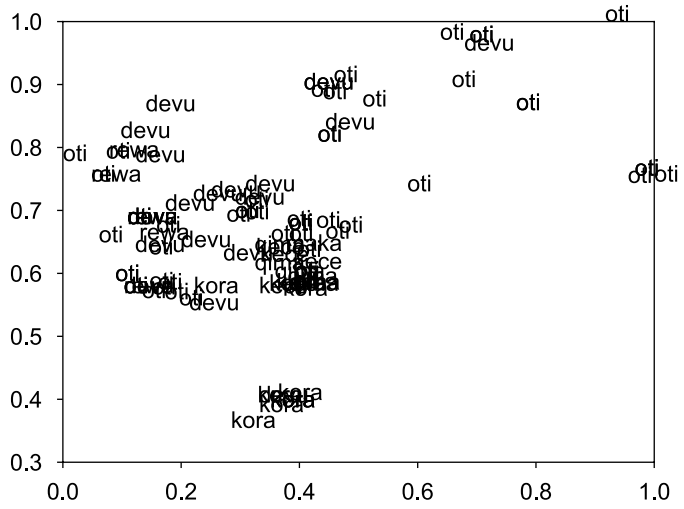
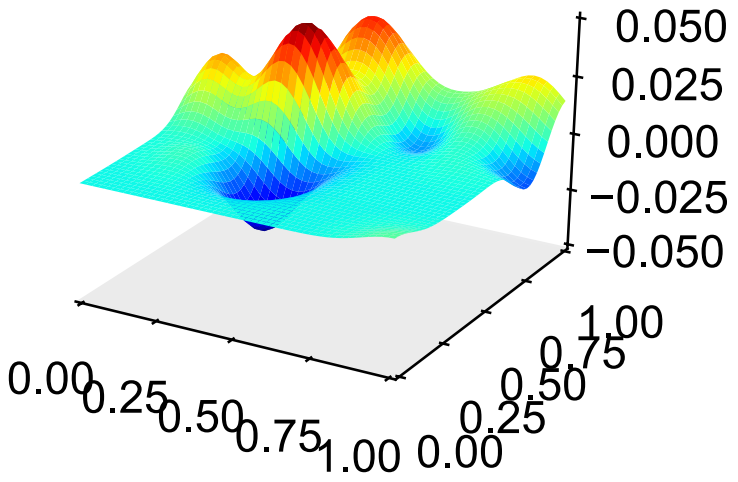
ガウス過程と機械学習





持橋大地
統計数理研究所
daichi@ism.ac.jp

Summer School 数理物理
2020-8-28 (土)

持橋担当分のスケジュール

- 1日目：概要と目次、ノンパラメトリックベイズ法
  (離散的な場合; 無限モデル)
- 2日目：ガウス過程とその適用
  (連続的な場合; ベイズ的関数回帰)
- 3日目：ノンパラメトリックベイズ法と自然言語処理への応用
  (研究紹介)

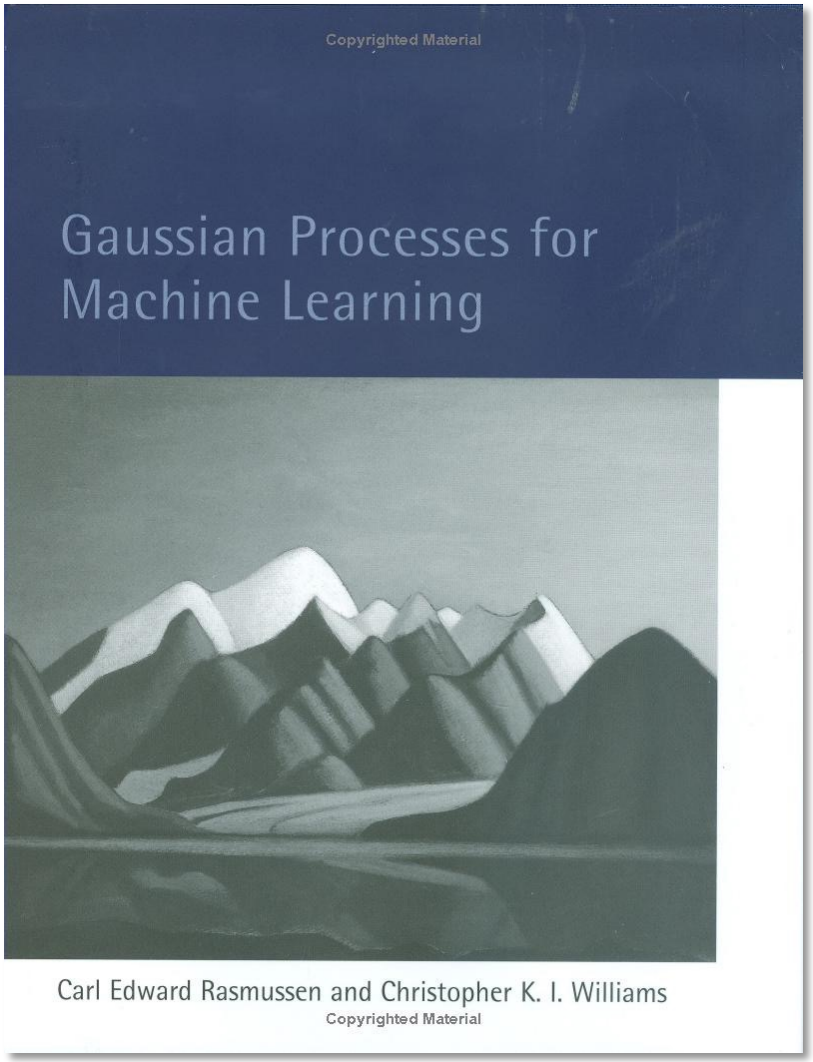
今日の概要

- はじめに: ガウス過程回帰とは何か
- 線形回帰モデル
- ガウス過程とガウス過程回帰
- カーネル関数の学習
- 深層学習との関係
- ガウス過程潜在変数モデル
- 様々な分野での応用

教科書「ガウス過程と機械学習」

- 講談社機械学習プロフェッショナルシリーズ(MLP), 2019
  - 持橋大地・大羽成征著
  - 現在、レビュー49件
- 線形回帰モデルの非常にやさしい導入から入っています
- 確率過程としての話ではなく、統計の道具としての意味と使い方の話

教科書 (GPML)



- “Gaussian Processes for Machine Learning” by Carl Rasmussen & Chris Williams (2006)
- 中級者以上向け
- 数学的な詳細やカーネル設計などについて知りたい場合はこちら
- PDFがフリーでダウンロード可能 http://www.gaussianprocess.org/gpml/

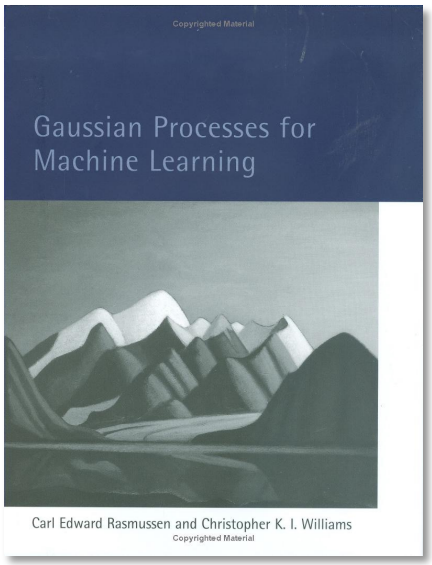
注意：二つの見方について

- ガウス過程には、回帰としての見方と関数解析としての見方の2つがある
  - GPMLでは “weight-space view” と “function-space view” と呼ばれている
- 本講演と教科書では、前者の見方を主に紹介する
- 後者の見方も時に重要だが (3日目の内容も参照) 、抽象的構成がわかれば、ガウス過程の全てを理解したということにはならない
  - カーネルの意味、ハイパーパラメータの学習
  - ガウス過程の様々な応用

ガウス過程(正規過程)の歴史

- 数学や信号処理では、古くから知られていた概念
- ケンブリッジのCavendish LabのMacKayが、1998年ごろ機械学習・データ解析への適用可能性を示した
- 2006年にGPML発売 (Rasmussen& Williams)
- 最近になり、特定の研究室以外でも様々な研究が広まりつつある

(飛田・櫃田,1976)



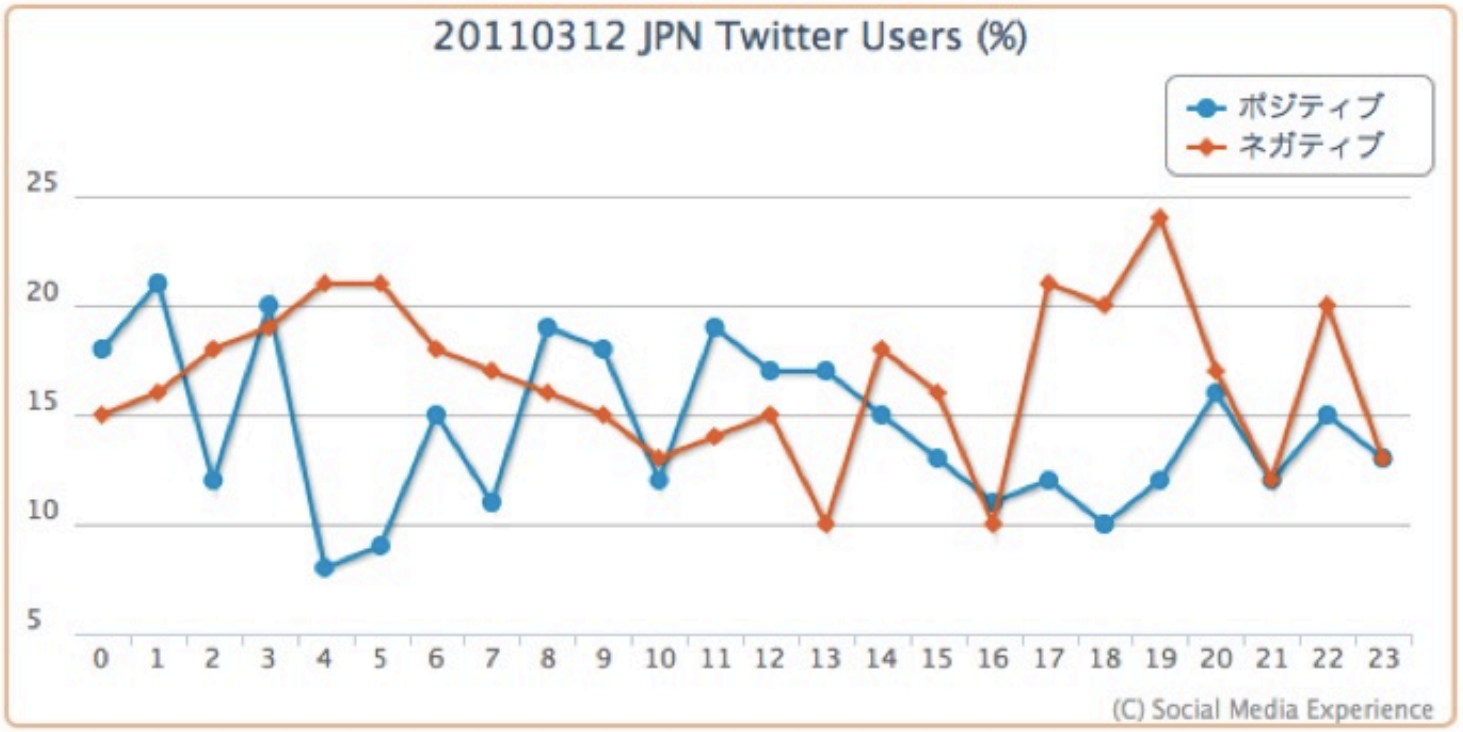
なぜガウス過程?

- 通常の線形回帰や一般化線形モデル (例: 緑本) にとどまらず、もっと柔軟な非線形な回帰を行いたい
- 空間的・時間的なスムージングを数学的に見通しよく行いたい
  - 空間統計学では、ガウス過程はKrigingとして知られている (ただし物理的な次元に限定)
- ニューラルネットの数学的代替：ニューラルネットは素子数→∞の極限でガウス過程に漸近 (Neal 1996)
  - ニューラルネットの重みを計算する必要がない！

なぜガウス過程？ (2)

- 自然言語処理でも、連続値を扱う機会が増えている／カテゴリに分類すれば終わりではない
  - 単語ベクトルの座標
  - 時間データ
  - 地理データ
  - 物理データ (ロボットや車の動作など)
  - 価格、得点、評価値など
- ニューラルネットにただ突っ込むだけでは、あまりにも貧しい (きちんとした道具が必要)

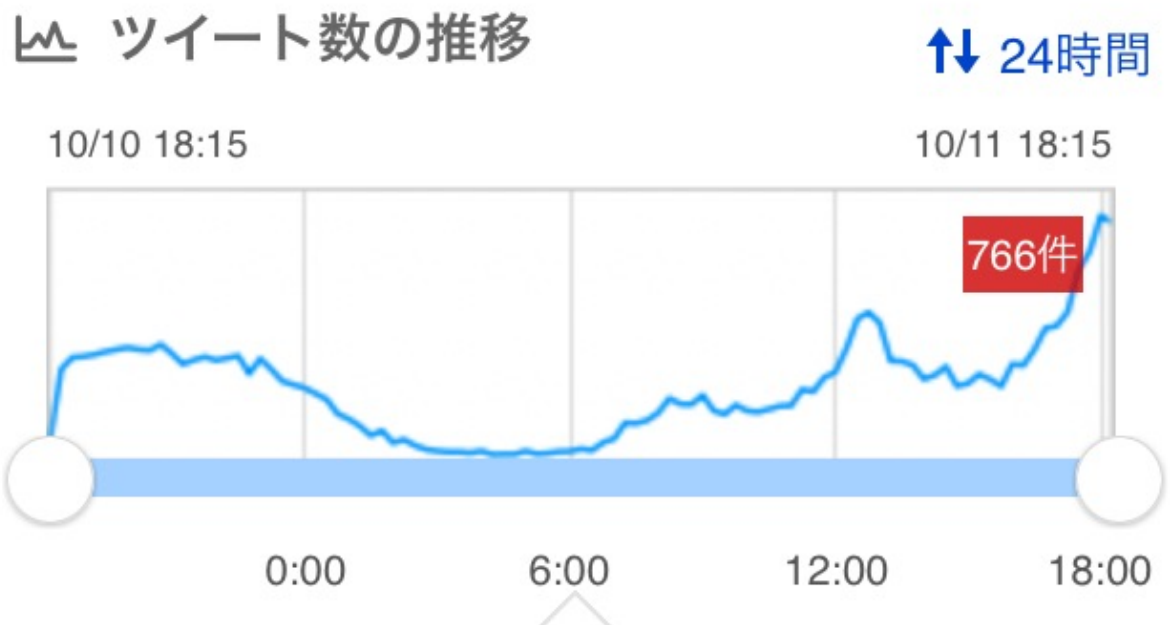
例) 時間によるツイート内容の推移



http://socialmediaexperience.jp/3192 より引用

- 東日本大震災後、2011/3/12のツイートの時間変化
  - 簡単な分布では表現できない！

例) おまけ・台風コロッケ

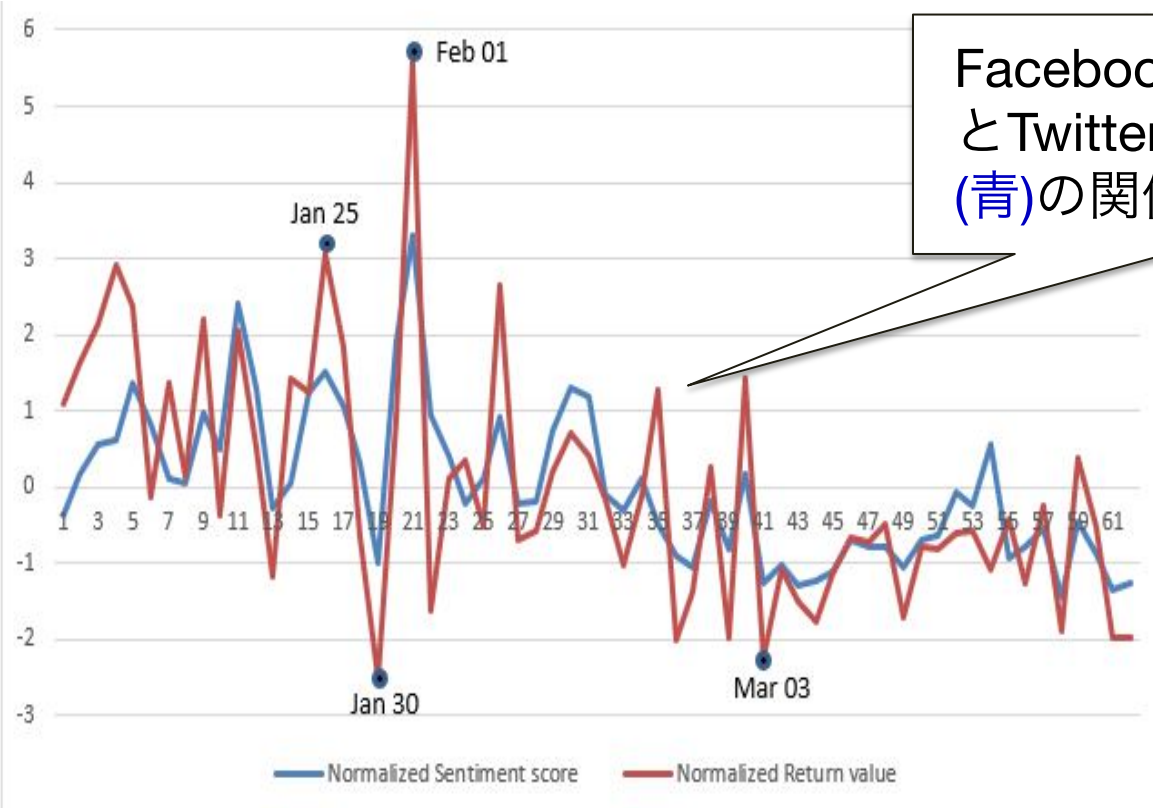


- 2019年10月11日の台風時の「コロッケ」のツイート頻度と時間の関係
- 非常に滑らかな関数！

例) Twitterの座標と言葉

- 2009年スーパーボウル時のツイートの単語頻度と座標 (New York Times)

例) 株価とツイートの感情分析

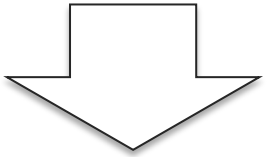


https://www.aclweb.org/anthology/W18-3102/ より引用

- “Causality Analysis of Twitter Sentiments and Stock Market Returns”, ACL 2018 WS in Economics and Natural Language Processing より

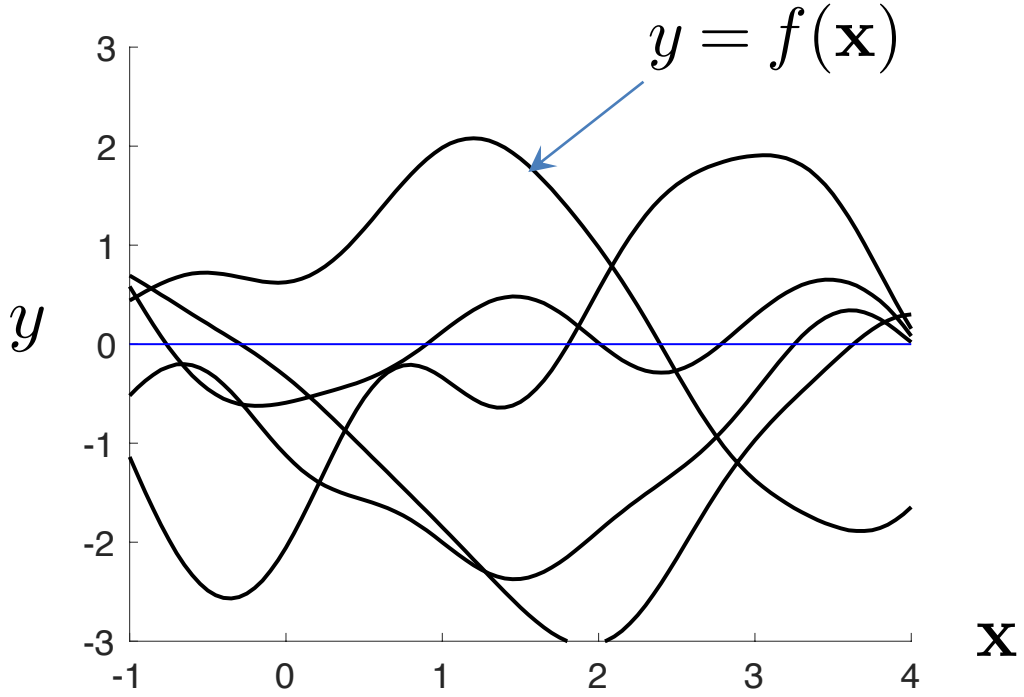
連続値への回帰問題

- これらは、入力 $\mathbf{x} \mapsto$ 出力 $y \in \mathbb{R}$ (連続値) を予測する問題 **(回帰問題、regression)**
  - 分類器では対応できない
  - 通常のガウス分布など単純な分布も使えない
- モデルがないと、無理矢理ニューラルネットに入れても解けない：動作がまったく保証されない



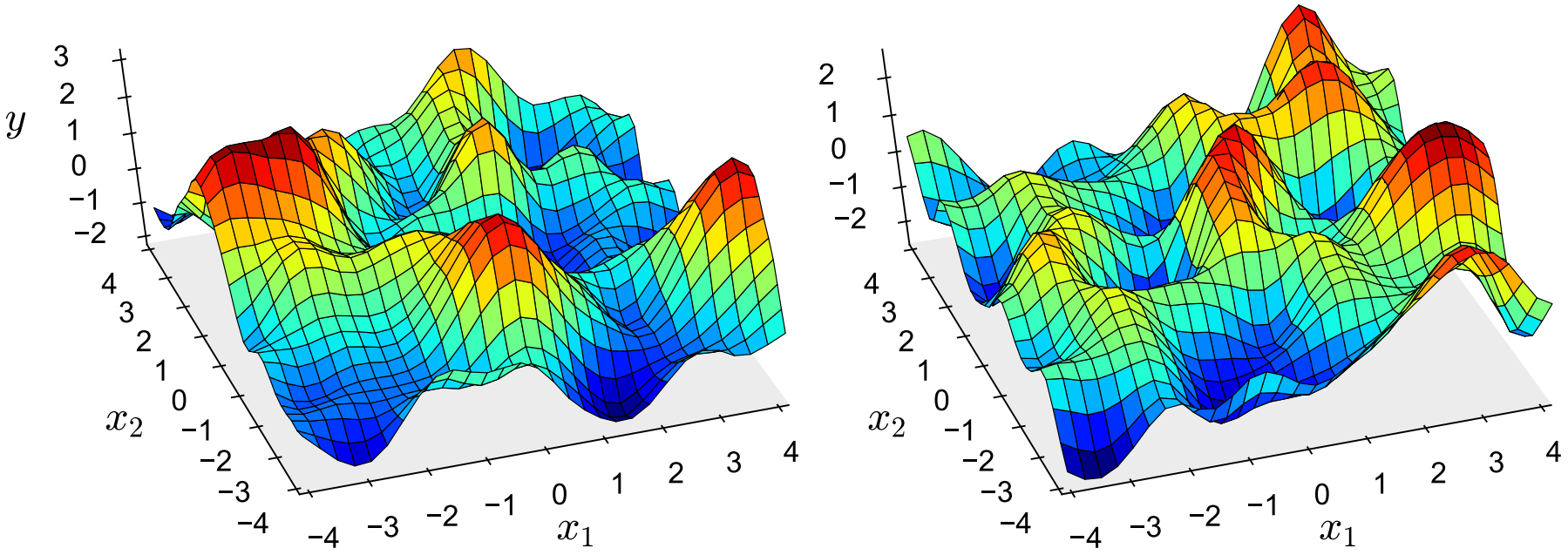
道具を増やす必要がある

ガウス過程とは?



- 非常に柔軟な回帰関数 $f : \mathbf{x} \mapsto y$ を生成する確率モデル (関数の確率分布)
- カーネル関数 $k(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$ によって様々な関数が生成できる (ベイズ的なカーネル法)

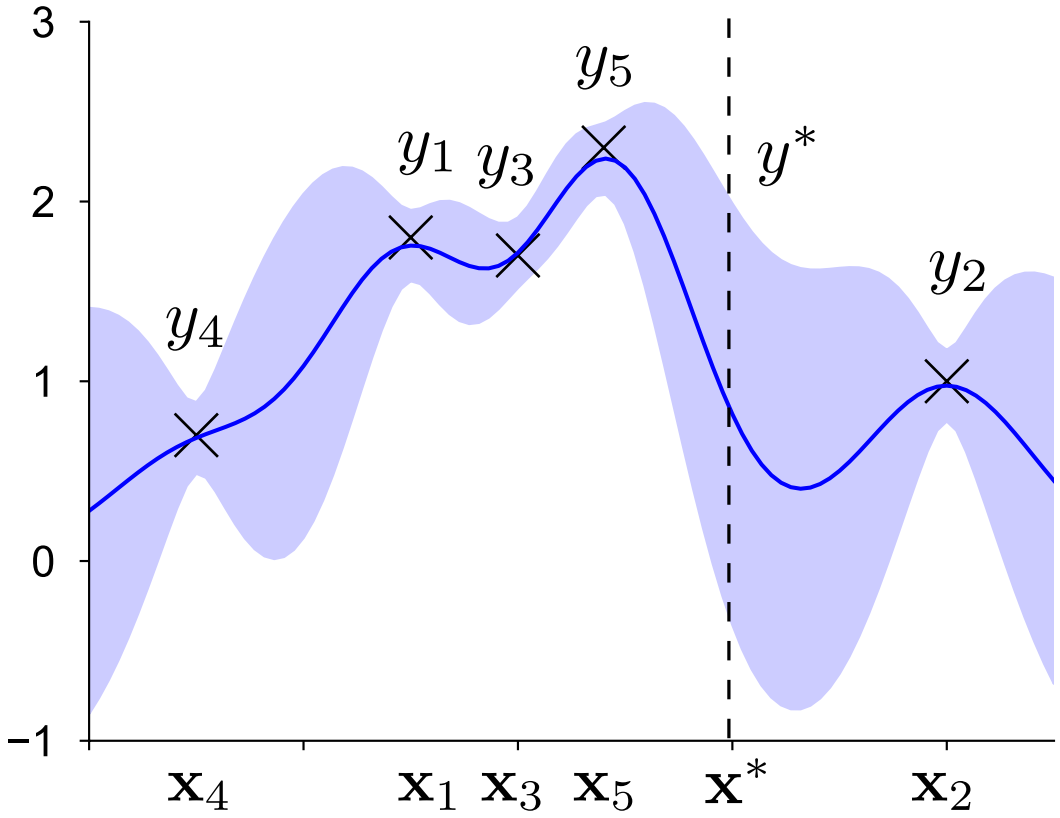
ガウス過程とは? (2)



- 入力が2次元の場合のガウス過程からのサンプル＝ランダムな連続曲面
- 入力xがもっと高次元な場合も同様のイメージ

ガウス過程とは? (3)

- 関数のベイズ推定：データが与えられると、関数の事後分布が得られる



- 青線は期待値
- データのない場所は分散が大きい
- 通常の最適化では分散は表現できない

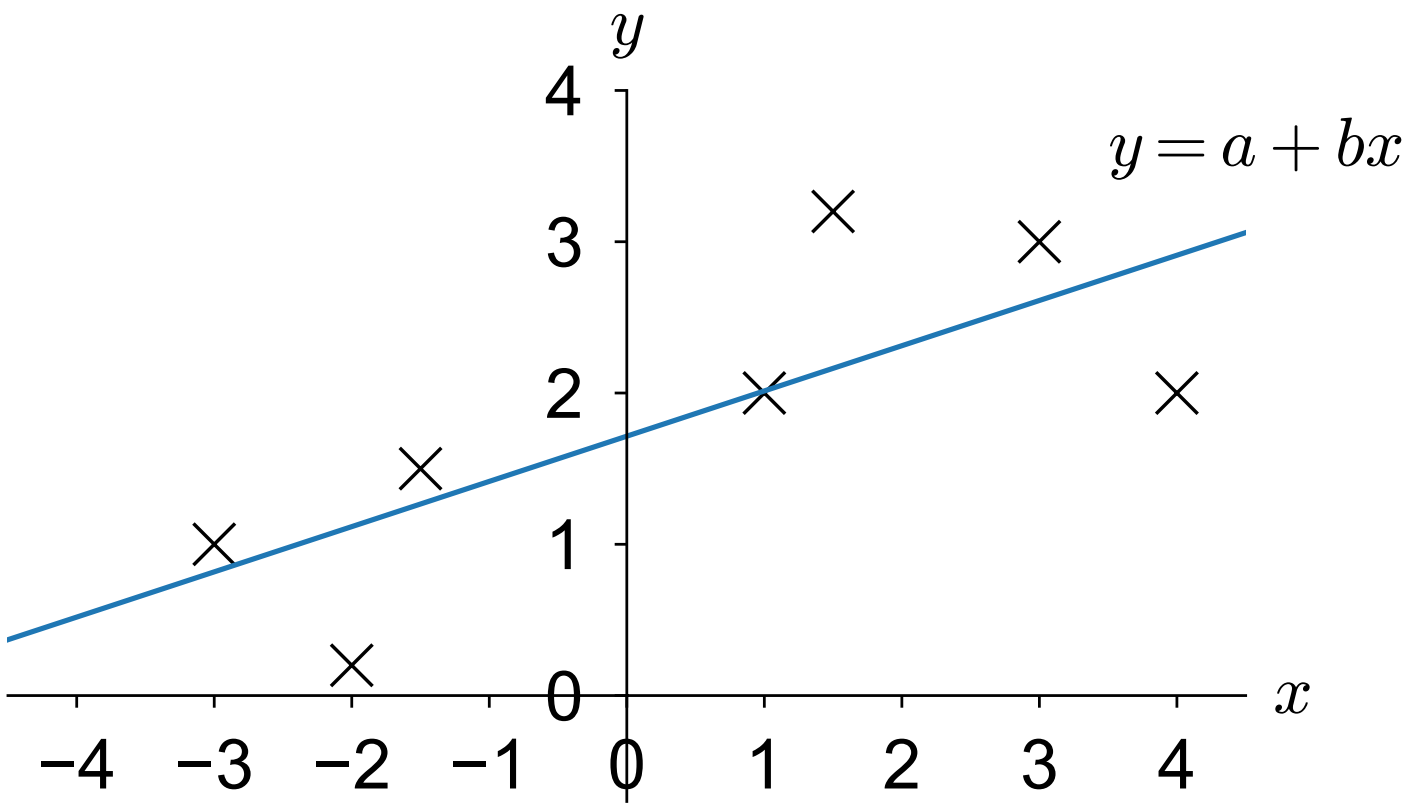
ガウス過程とは? (4)

- 柔軟な回帰関数を使える確率モデルなので、全体を見通しのよい統計モデルとして定義できる
  - 統計的な振る舞いが保証されている ($\leftrightarrow$ NN)
  - ハイパーパラメータも同時に学習できる
- カーネル法なので、多くの入力 $\mathbf{x}$ に対して自然に定義できる
  - 高次元の入力
  - 文字列、グラフ、木、確率モデル、..
- ニューラルネットは、素子数$\rightarrow \infty$でガウス過程になる (Neal 1996)

線形回帰モデル

単回帰モデル (simple regression)

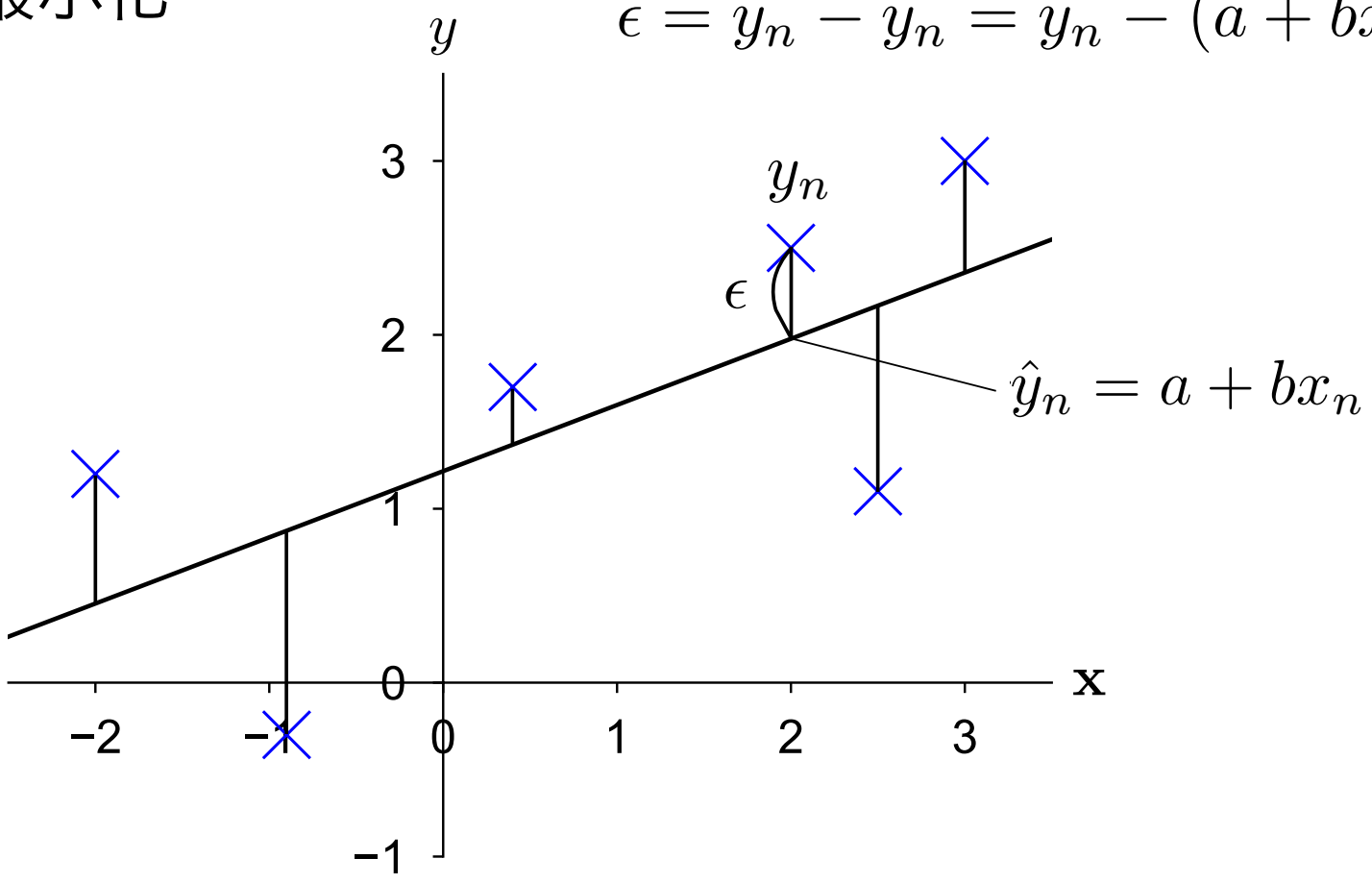
- 最も単純な回帰： $y = a + bx$
- aとbをどうやって決める?



誤差の最小化

- 実際の値 y_n と予測値 $\hat{y}_n = a + b\,x_n$ の誤差 ϵ を最小化

$$\epsilon = y_n - \hat{y}_n = y_n - (a + bx_n)$$



単回帰モデル (2)

- データ $\mathcal{D} = \{(x_1, y_1), (x_2, y_2), \cdots, (x_N, y_N)\}$ があったとする.
- 各 x_n に対する予測値 $\hat{y}_n$ は、一次式

$$\hat{y}_n = a + bx_n$$

- 観測値との差は

$$y_n - \hat{y}_n = y_n - (a + bx_n)$$

  – これを最小にしたい！

単回帰モデル (3)

- *n*=1,2,...,*N* について、
  誤差＝ $y_n - \hat{y}_n$ → 誤差の総和を最小にしたい
- 誤差は負のこともあるので、二乗した二乗誤差を最小化 (最小二乗法)：

$$E = \sum_{n=1}^{N} (y_n - \hat{y}_n)^2 = \sum_{n=1}^{N} (y_n - (a + bx_n))^2$$

  を最小にする a,b を求める

単回帰モデル (4)

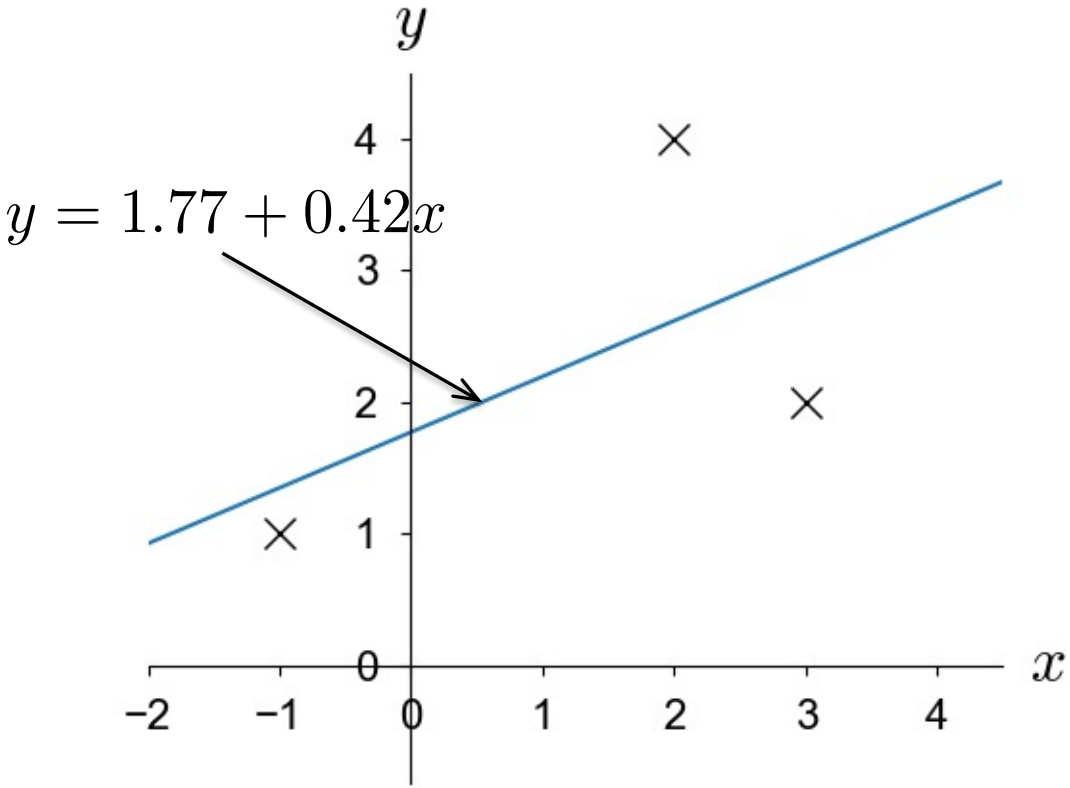
- Eの極小点ではa,bについての偏微分は0になるので、

$$\frac{\partial E}{\partial a} = \frac{\partial}{\partial a}\sum_{n=1}^{N}(y_n - (a + bx_n))^2$$
$$= \frac{\partial}{\partial a}\sum_{n=1}^{N}(y_n^2 + a^2 + b^2x_n^2 - 2ay_n - 2abx_n + 2bx_ny_n) = 0$$
$$\frac{\partial E}{\partial b} = \frac{\partial}{\partial b}\sum_{n=1}^{N}(y_n - (a + bx_n))^2$$
$$= \frac{\partial}{\partial b}\sum_{n=1}^{N}(y_n^2 + a^2 + b^2x_n^2 - 2ay_n - 2abx_n + 2bx_ny_n) = 0$$

- これを解いて、

$$a = \frac{\sum_n x_n^2 \sum_n y_n - \sum_n x_n \sum_n x_n y_n}{N\sum_n x_n^2 - (\sum_n x_n)^2}$$
$$b = \frac{N\sum_n x_n y_n - \sum_n x_n \sum_n y_n}{N\sum_n x_n^2 - (\sum_n x_n)^2}$$

単回帰モデルの計算例



一番単純な場合：
データD=
{(3,2),(2,4),(-1,1)}

$$\sum_{n=1}^{3} x_n = 3 + 2 - 1 = 4$$

$$\sum_{n=1}^{3} y_n = 2 + 4 + 1 = 7$$

$$\sum_{n=1}^{3} x_n^2 = 9 + 4 + 1 = 14$$

$$\sum_{n=1}^{3} x_n y_n = 3 \cdot 2 + 2 \cdot 4 + (-1) \cdot 1 = 13$$

- 公式に代入して、
  a = 1.77, b= 0.42

重回帰モデル

- 入力xが多次元なら? → 重回帰 (multiple regression)

$$\mathbf{x} = (x_1, x_2, \cdots, x_D)^T \text{ のとき、}$$

$$y = w_0 + w_1 x_1 + w_2 x_2 + \cdots + w_D x_D$$

- 二乗誤差は、

$$(y - \hat{y})^2 = (y - (w_0 + w_1 x_1 + w_2 x_2 + \cdots + w_D x_D))^2$$

- これを最小化
  → $E = \sum_{n=1}^{N} (y_n - \hat{y}_n)^2$ を $w_0, w_1, \cdots, w_D$ について微分して0とおき、連立方程式を解けばよい.

もっと見通しよく!

- x を新しく $\mathbf{x} = (1, x_1, x_2, \cdots, x_D)$ 、
  重みベクトルを $\mathbf{w} = (w_0, w_1, w_2, \cdots, w_D)$ と表せば、

$$
\begin{aligned}
\hat{y} &= w_0 + w_1 x_1 + w_2 x_2 + \cdots + w_D x_D \\
&= (w_0, w_1, w_2, \cdots, w_D) \begin{pmatrix} 1 \\ x_1 \\ \vdots \\ x_D \end{pmatrix} \\
&= \mathbf{w}^T \mathbf{x}
\end{aligned}
$$

もっと見通しよく! (2)

- よって、n=1,2,...,N について縦に並べれば、

$$\begin{pmatrix} \hat{y}_1 \\ \hat{y}_2 \\ \vdots \\ \hat{y}_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{w}^T\mathbf{x}_1 \\ \mathbf{w}^T\mathbf{x}_2 \\ \vdots \\ \mathbf{w}^T\mathbf{x}_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{x}_1^T \\ \mathbf{x}_2^T \\ \vdots \\ \mathbf{x}_N^T \end{pmatrix} \mathbf{w}$$

- つまり、

$$\underbrace{\begin{pmatrix} \hat{y}_1 \\ \hat{y}_2 \\ \vdots \\ \hat{y}_N \end{pmatrix}}_{\hat{\mathbf{y}}} = \underbrace{\begin{pmatrix} 1 & x_{11} & x_{12} & \cdots & x_{1D} \\ 1 & x_{21} & x_{22} & \cdots & x_{2D} \\ \vdots & & & & \vdots \\ 1 & x_{N1} & x_{N2} & \cdots & x_{ND} \end{pmatrix}}_{\mathbf{X}} \underbrace{\begin{pmatrix} w_0 \\ w_1 \\ w_2 \\ \vdots \\ w_D \end{pmatrix}}_{\mathbf{w}}$$

計画行列という

$\hat{\mathbf{y}} = \mathbf{X}\mathbf{w}$ と書ける!

行列・ベクトル表現

$$E = \sum_{n=1}^{N} (y_n - \hat{y}_n)^2 = (y_1 - \hat{y}_1, \cdots, y_N - \hat{y}_N) \begin{pmatrix} y_1 - \hat{y}_1 \\ \vdots \\ y_N - \hat{y}_N \end{pmatrix}$$

- なので、

$$\begin{aligned} E &= (\mathbf{y} - \mathbf{X}\mathbf{w})^T (\mathbf{y} - \mathbf{X}\mathbf{w}) \\ &= \mathbf{y}^T (\mathbf{y} - \mathbf{X}\mathbf{w}) - (\mathbf{X}\mathbf{w})^T (\mathbf{y} - \mathbf{X}\mathbf{w}) \\ &= \mathbf{y}^T \mathbf{y} - 2\mathbf{w}^T (\mathbf{X}^T \mathbf{y}) + \mathbf{w}^T \mathbf{X}^T \mathbf{X}\mathbf{w} \end{aligned}$$

重回帰モデルの解

$$E = \mathbf{y}^T\mathbf{y} - 2\mathbf{w}^T(\mathbf{X}^T\mathbf{y}) + \mathbf{w}^T\mathbf{X}^T\mathbf{X}\mathbf{w}$$

- を $\mathbf{w}$ で微分して、

$$\frac{\partial E}{\partial \mathbf{w}} = -2\mathbf{X}^T\mathbf{y} + 2\mathbf{X}^T\mathbf{X}\mathbf{w} = \mathbf{0}$$

- よって

$$\mathbf{X}^T\mathbf{X}\mathbf{w} = \mathbf{X}^T\mathbf{y} \qquad \text{(正規方程式)}$$

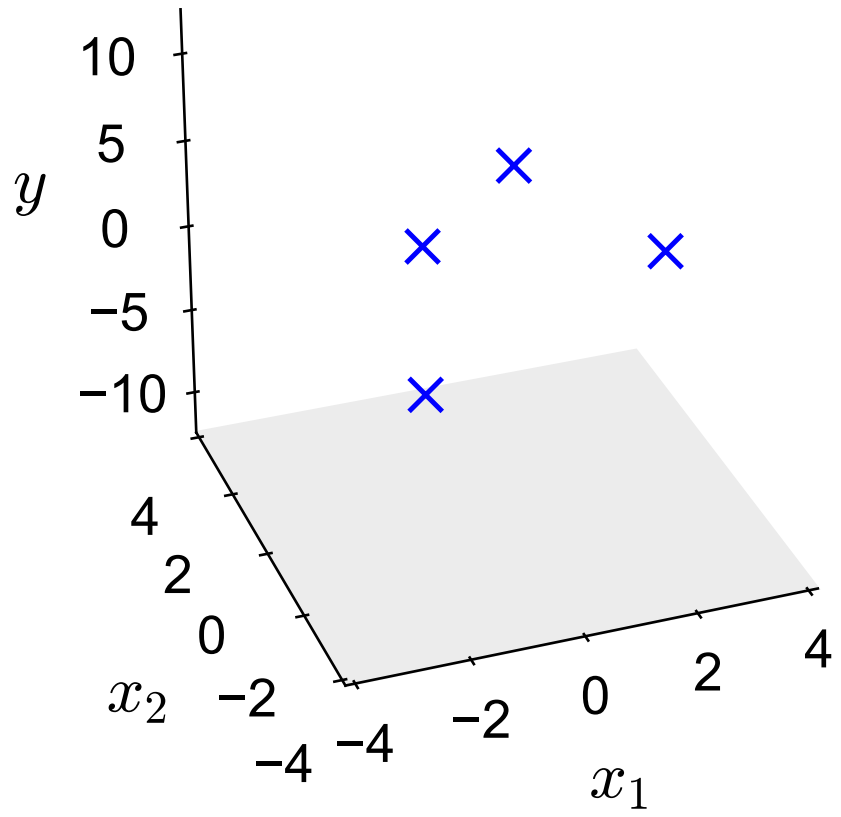
$$\therefore \quad \boxed{\mathbf{w} = (\mathbf{X}^T\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}^T\mathbf{y}\,.}$$

重回帰モデルの解

重回帰モデルの計算例

- データが下のとき、

$$\mathcal{D} = \{((1,2),4),((-1,1),2),((3,0),1),((-2,-2),-1)\}$$



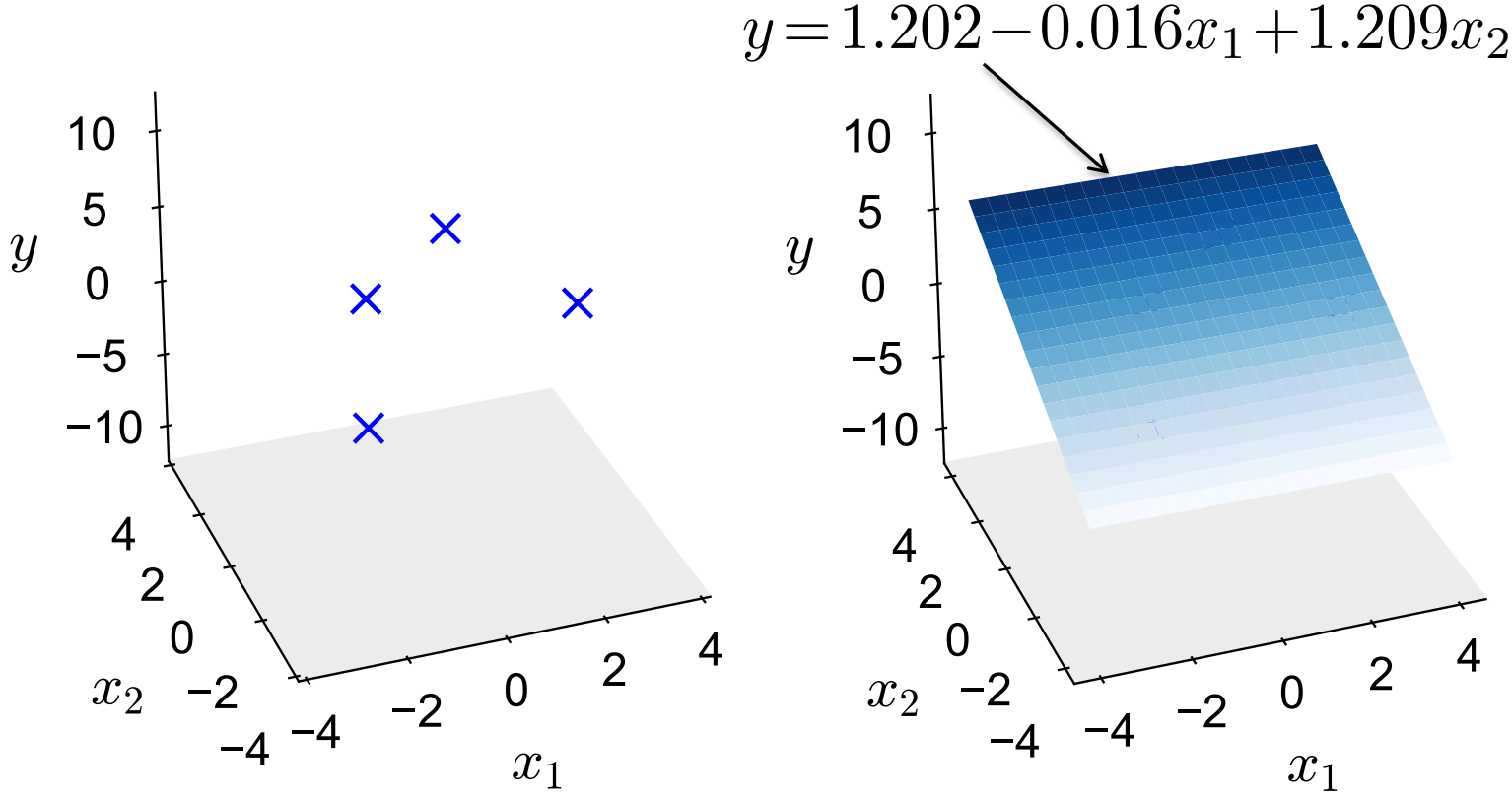
x_1	x_2	y
1	2	4
−1	1	2
3	0	1
−2	−2	−1

$$\mathbf{X} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 2 \\ 1 & -1 & 1 \\ 1 & 3 & 0 \\ 1 & -2 & -2 \end{pmatrix}$$

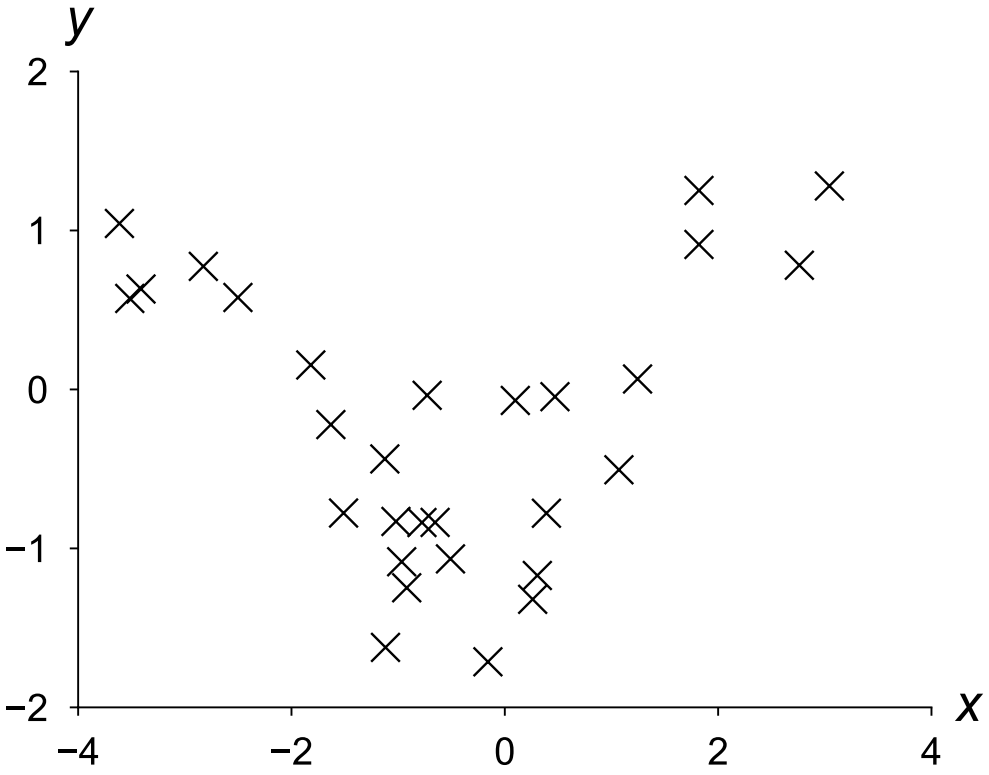
重回帰モデルの計算例 (2)

- よって、重みベクトルwの解は

$$\mathbf{w} = (\mathbf{X}^T\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}^T\mathbf{y} = (1.202 \ \ -0.016 \ 1.209)^T$$



もっと複雑にしたい!



- 直線や平面で表せない関係も多いのでは?

関数をもっと複雑にすればよい！

線形回帰モデル

$$y = w_0 + w_1 x + w_2 x^2 = \underbrace{\begin{pmatrix} w_0 & w_1 & w_2 \end{pmatrix}}_{\mathbf{w}^T} \underbrace{\begin{pmatrix} 1 \\ x \\ x^2 \end{pmatrix}}_{\boldsymbol{\phi}(x)}$$

$$y = w_0 + w_1 x + w_2 \sin(x) = \underbrace{\begin{pmatrix} w_0 & w_1 & w_2 \end{pmatrix}}_{\mathbf{w}^T} \underbrace{\begin{pmatrix} 1 \\ x \\ \sin(x) \end{pmatrix}}_{\boldsymbol{\phi}(x)}$$

- どれも、係数ベクトルの線形式として書ける！
  - $y = \mathbf{w}^T \boldsymbol{\phi}(\mathbf{x})$ … 線形回帰モデル (linear regression model)
- これをシグモイド関数に通したのがロジスティック回帰モデル $y = \sigma(\mathbf{w}^T \boldsymbol{\phi}(\mathbf{x}))$

線形回帰モデル (2)

$$y = \mathbf{w}^T \boldsymbol{\phi}(\mathbf{x}) \ (= \boldsymbol{\phi}(x)^T \mathbf{w})$$

- は、xがφ(x)に変わっただけで重回帰モデル $y = \mathbf{w}^T \mathbf{x}$ と同じなので、たとえば $\boldsymbol{\phi}(x) = (1, x, x^2, x^3)$ のとき、上をN個並べれば

$$\underbrace{\begin{pmatrix} \hat{y}_1 \\ \hat{y}_2 \\ \vdots \\ \hat{y}_N \end{pmatrix}}_{\hat{\mathbf{y}}} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{\phi}(\mathbf{x}_1)^T \\ \boldsymbol{\phi}(\mathbf{x}_2)^T \\ \vdots \\ \boldsymbol{\phi}(\mathbf{x}_N)^T \end{pmatrix} \mathbf{w} = \underbrace{\begin{pmatrix} 1 & x_1 & x_1^2 & x_1^3 \\ 1 & x_2 & x_2^2 & x_2^3 \\ \vdots & & & \vdots \\ 1 & x_N & x_N^2 & x_N^3 \end{pmatrix}}_{\boldsymbol{\Phi}} \underbrace{\begin{pmatrix} w_0 \\ w_1 \\ w_2 \\ w_3 \end{pmatrix}}_{\mathbf{w}}$$

新しい計画行列

線形回帰モデル (3)

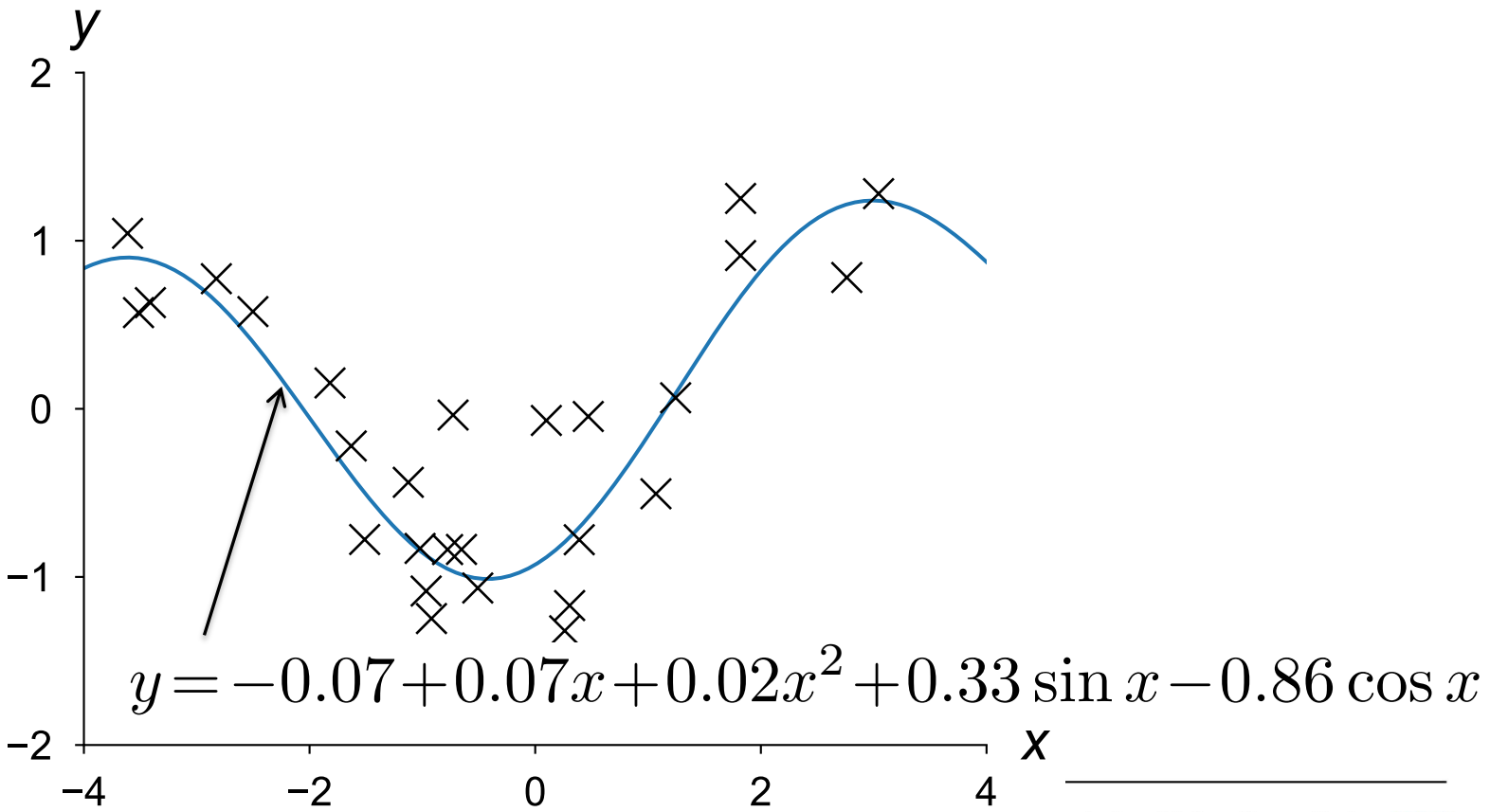
- つまり一般に、線形回帰モデルは以下のように書ける

$$\underbrace{\begin{pmatrix} \widehat{y}_1 \\ \widehat{y}_2 \\ \vdots \\ \widehat{y}_N \end{pmatrix}}_{\widehat{\mathbf{y}}} = \underbrace{\begin{pmatrix} 1 & \phi_1(x_1) & \cdots & \phi_H(x_1) \\ 1 & \phi_1(x_2) & \cdots & \phi_H(x_2) \\ \vdots & & & \vdots \\ 1 & \phi_1(x_N) & \cdots & \phi_H(x_N) \end{pmatrix}}_{\mathbf{\Phi}} \underbrace{\begin{pmatrix} w_0 \\ w_1 \\ \vdots \\ w_H \end{pmatrix}}_{\mathbf{w}}$$

- 計画行列Φを使って、$\widehat{\mathbf{y}} = \mathbf{\Phi}\mathbf{w}$ と書ける
- $\mathbf{X} \mapsto \mathbf{\Phi}$ 以外は重回帰と同じなので、$\mathbf{w} = (\mathbf{\Phi}^T\mathbf{\Phi})^{-1}\mathbf{\Phi}^T\mathbf{y}$

線形回帰モデルの例

- 特徴ベクトルを $\boldsymbol{\phi}(x) = (1, x, x^2, \sin x, \cos x)^T$ として先ほどのデータに適用すると、
  $\mathbf{w} = (-0.065, 0.068, 0.022, 0.333, -0.863)^T$ が解



線形回帰モデルと基底関数

$$y = \mathbf{w}^T \boldsymbol{\phi}(\mathbf{x})$$

$$\mathbf{w} = (w_0, w_1, w_2, \cdots, w_H)$$

$$\boldsymbol{\phi}(\mathbf{x}) = (\underbrace{\phi_0(\mathbf{x})}_{=1}, \phi_1(\mathbf{x}), \phi_2(\mathbf{x}), \cdots, \phi_H(\mathbf{x}))$$

- よって、$y = w_0 + w_1\phi_1(\mathbf{x}) + w_2\phi_2(\mathbf{x}) + \cdots + w_H\phi_H(\mathbf{x})$ は関数　$y = \phi_0(\mathbf{x})\ (= 1)$

  $y = \phi_1(\mathbf{x})$

  $y = \phi_2(\mathbf{x})$

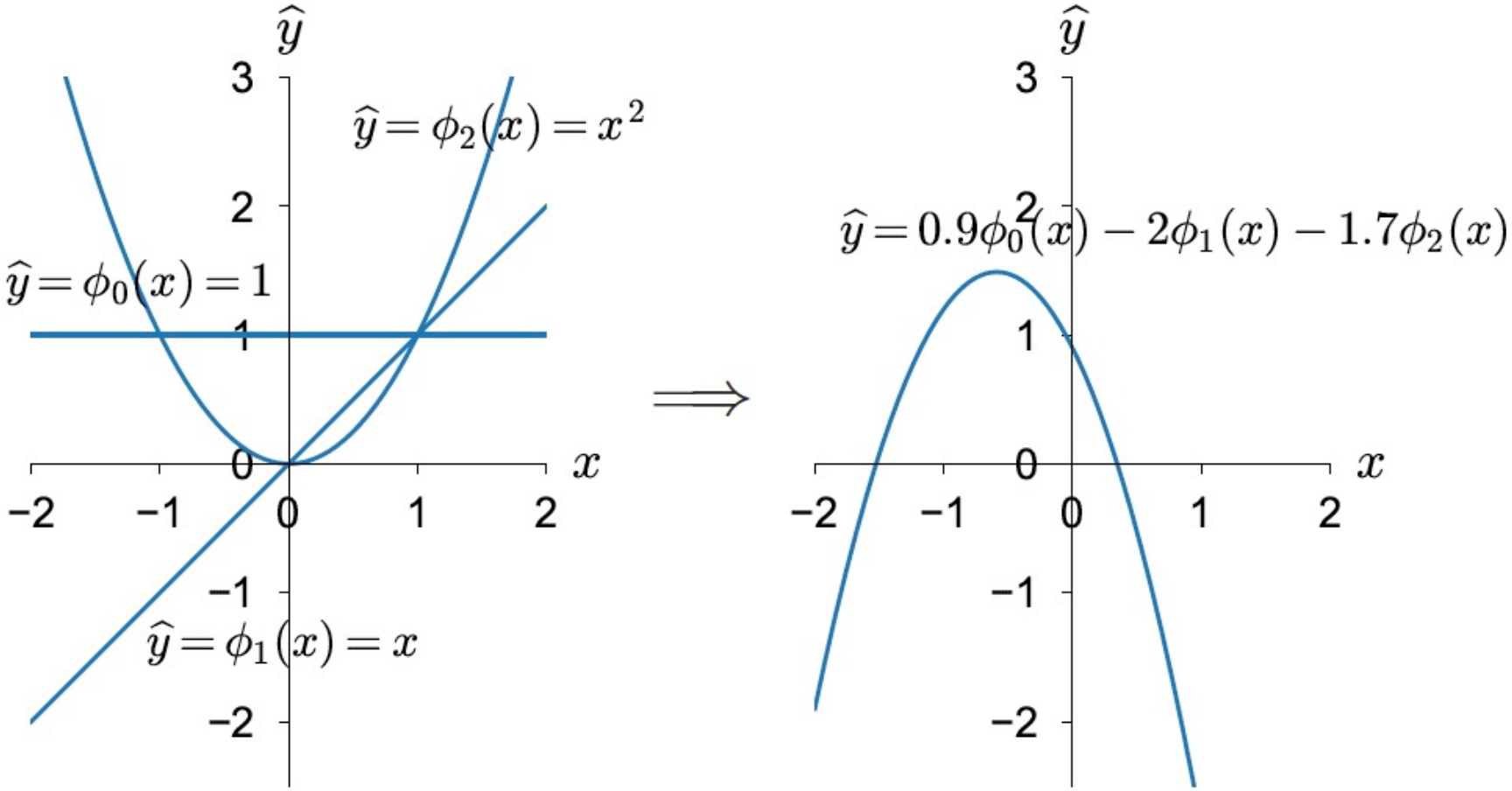
  $\vdots$

  $y = \phi_H(\mathbf{x})$

  の重みつき和 (線形結合) とみなせる

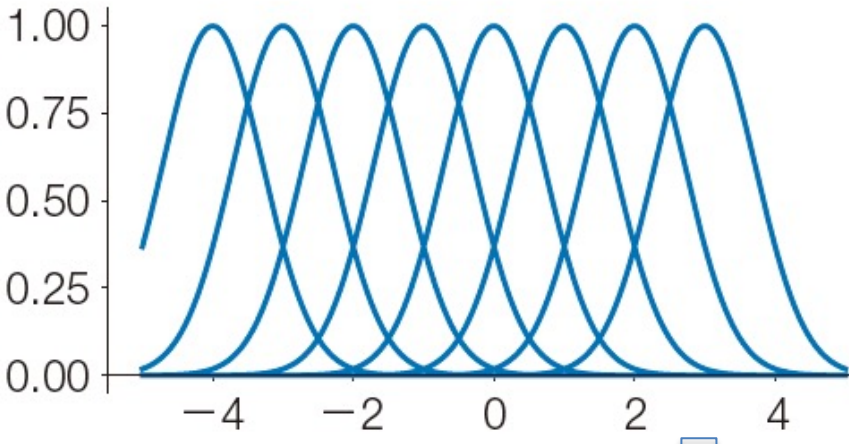
基底関数という

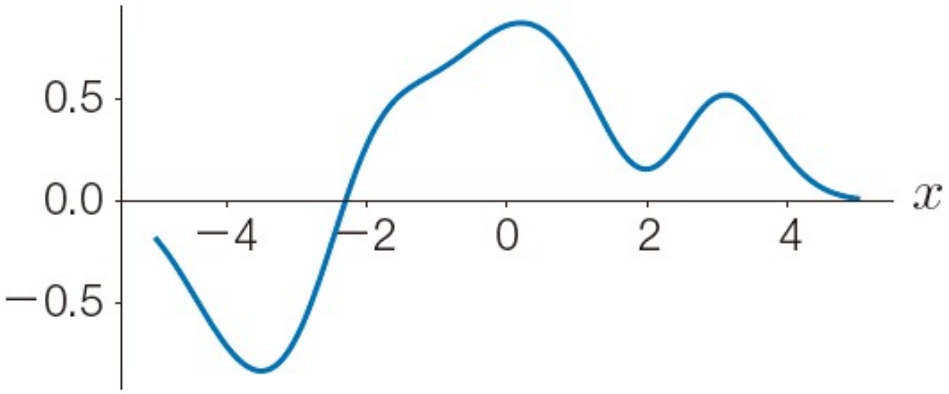
線形回帰モデルと基底関数



- 2次関数$y=-1.7x^2-2x+0.9$ は、関数 $y=1$, $y=x$, $y=x^2$の線形和

動径基底関数回帰



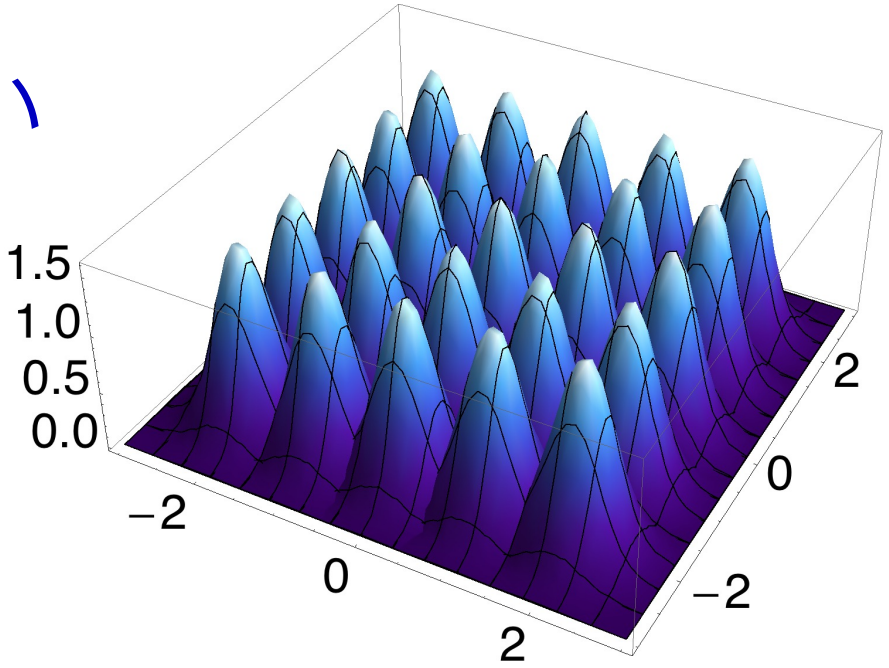


- それなら、$\phi_h(x) = \exp\left(-\frac{(x-\mu_h)^2}{\sigma^2}\right)$
  をたくさん用意すれば、任意の関数が表せるのでは?

動径基底関数回帰 (radial basis function regression)

次元の呪い

- しかし…



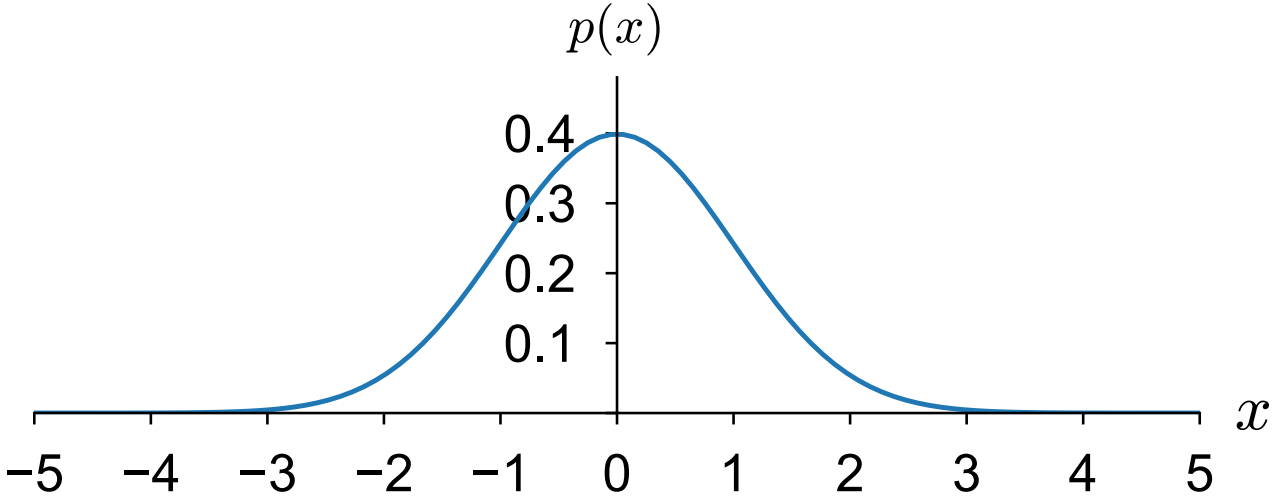
- 動径基底関数回帰に必要な基底関数の数(=パラメータの数)は、xの次元が増えると指数的に増加
  - 1おきに基底関数をとると、[-10,10]で1次元では21個
  - 2次元では21^2=441個
  - 10次元では21^{10}=16,679,880,978,201個！

  → 次元の呪い (curse of dimensionality)

ガウス分布とガウス過程

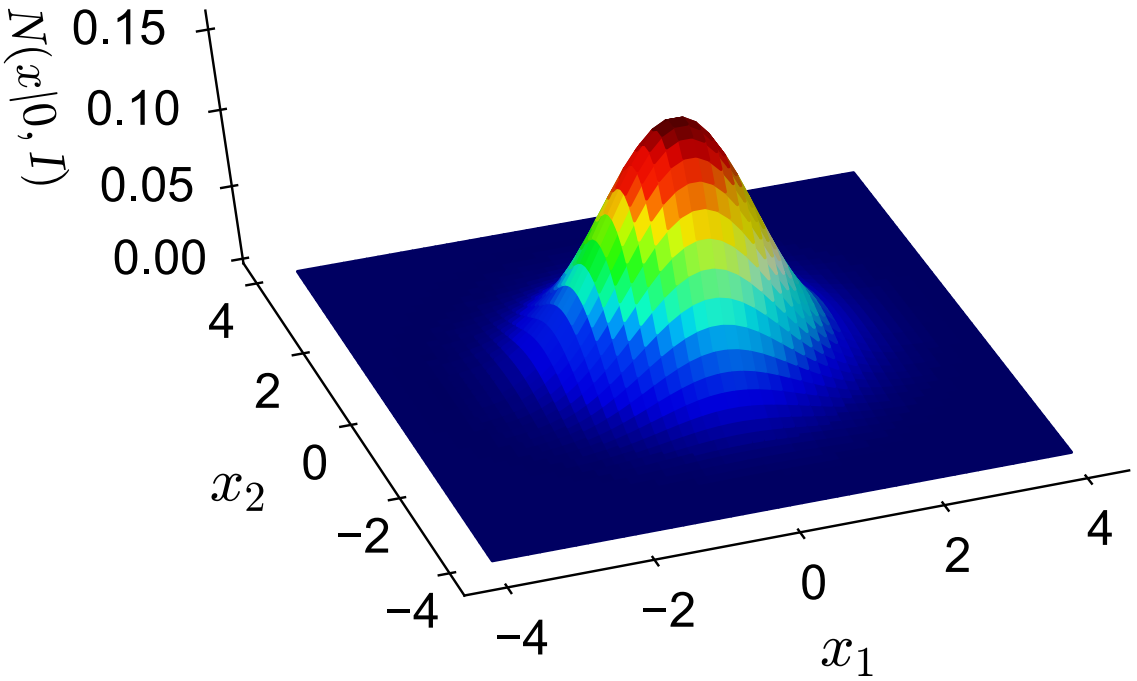
ガウス分布

- ガウス分布 (Gaussian distribution) または
  正規分布 (normal distribution)：最も基本的な確率分布



$$p(x) = \mathcal{N}(x|\mu, \sigma^2) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left(-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}\right)$$

多変量ガウス分布

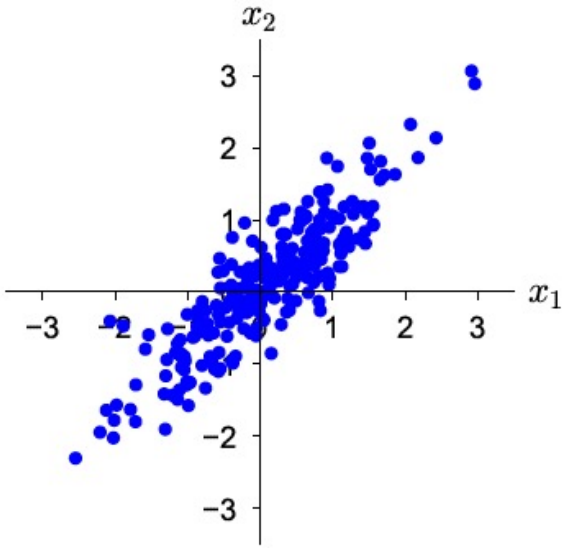


- $p(\mathbf{x}|\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma}) = \dfrac{1}{(\sqrt{2\pi})^D \sqrt{|\boldsymbol{\Sigma}|}} \exp\left(-\dfrac{1}{2}(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu})^T \boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu})\right)$

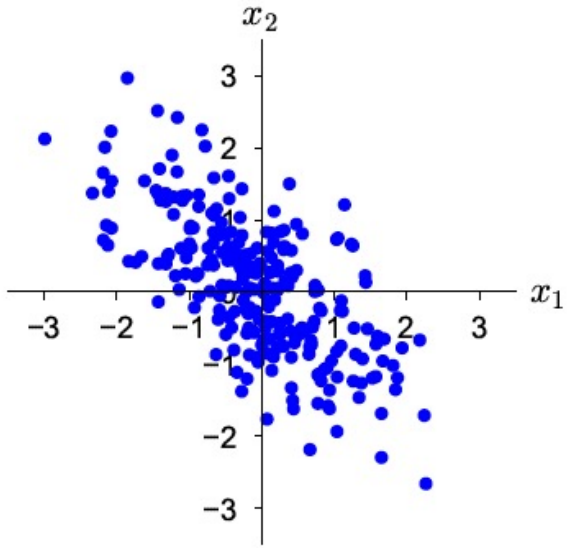
$$\boldsymbol{\mu} = \mathbb{E}[\mathbf{x}] \qquad \text{(平均ベクトル)}$$

$$\boldsymbol{\Sigma} = \mathbb{E}[\mathbf{x}\mathbf{x}^T] - \mathbb{E}[\mathbf{x}]\mathbb{E}[\mathbf{x}]^T \qquad \text{(共分散行列)}$$

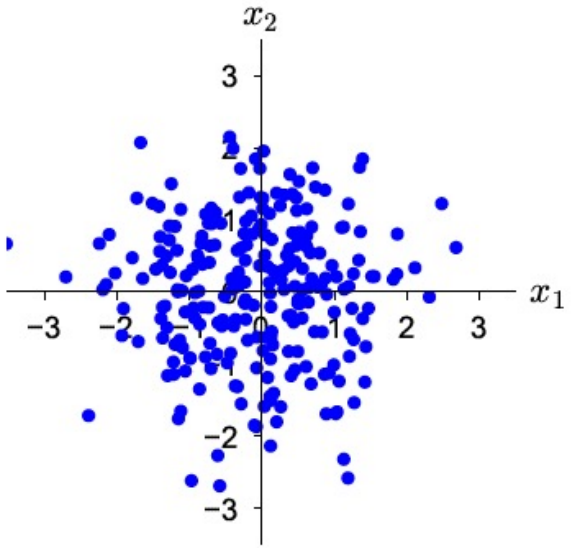
多変量ガウス分布からのサンプル



(a) $\boldsymbol{\Sigma} = \begin{pmatrix} 1 & 0.9 \\ 0.9 & 1 \end{pmatrix}$



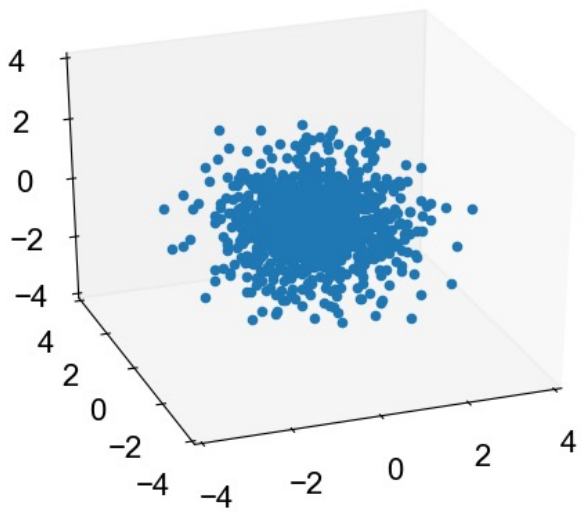
(b) $\boldsymbol{\Sigma} = \begin{pmatrix} 1 & -0.7 \\ -0.7 & 1 \end{pmatrix}$

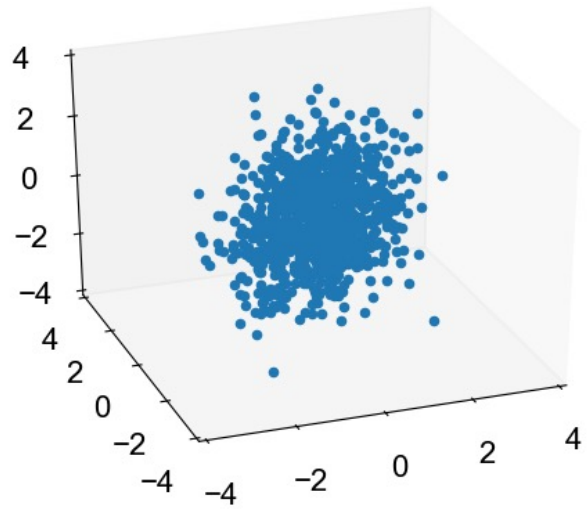


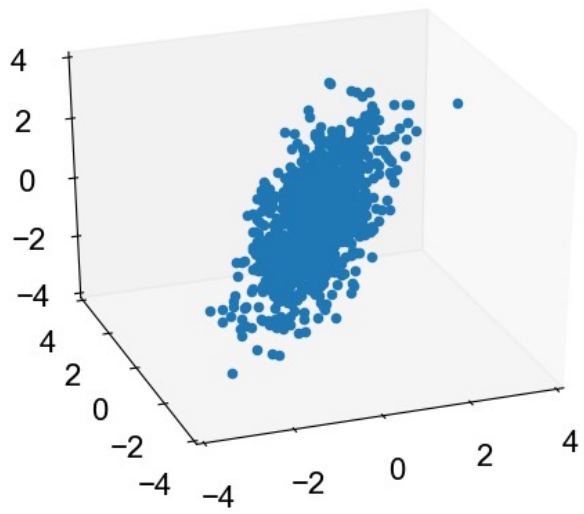
(c) $\boldsymbol{\Sigma} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$

- 共分散行列の要素の値が大きい(共分散が大)と、類似した値がサンプルされる
  - 負では逆相関、0ならば、無相関

多変量ガウス分布からのサンプル (2)







$$\boldsymbol{\Sigma} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \boldsymbol{\Sigma} = \begin{pmatrix} 1 & 0.5 & 0.2 \\ 0.5 & 1 & 0.5 \\ 0.2 & 0.5 & 1 \end{pmatrix} \quad \boldsymbol{\Sigma} = \begin{pmatrix} 1 & 0.8 & 0.6 \\ 0.8 & 1 & 0.8 \\ 0.6 & 0.8 & 1 \end{pmatrix}$$

- 3次元の場合

多変量ガウス分布の線形変換

- $\mathbf{x}$ が多変量ガウス分布に従っていて

$$p(\mathbf{x}) \propto \exp\left(-\frac{1}{2}\mathbf{x}^T\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\mathbf{x}\right)$$

のとき、

$\mathbf{x}=\mathbf{A}^{-1}\mathbf{y}$

- $\mathbf{x}$ を行列 $\mathbf{A}$で変換した $\mathbf{y}=\mathbf{A}\mathbf{x}$ の分布は

$$p(\mathbf{y}) \propto \exp\left(-\frac{1}{2}(\mathbf{A}^{-1}\mathbf{y})^T\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\mathbf{A}^{-1}\mathbf{y})\right)\left|\frac{\partial \mathbf{y}}{\partial \mathbf{x}}\right|$$

$$\propto \exp\left(-\frac{1}{2}\mathbf{y}^T\boldsymbol{\Lambda}\mathbf{y}\right) \quad (\boldsymbol{\Lambda} = (\mathbf{A}^{-1})^T\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\mathbf{A}^{-1}\mathbf{y})$$

  - よって、$\mathbf{y}$ もガウス分布に従う

線形回帰モデルふたたび

- 線形回帰モデル $\mathbf{y} = \mathbf{\Phi w}$ において、重みベクトル w がガウス分布

$$\mathbf{w} \sim \mathcal{N}(\mathbf{0}, \alpha \mathbf{I})$$

に従っているとする

$$\underbrace{\begin{pmatrix} \widehat{y}_1 \\ \widehat{y}_2 \\ \vdots \\ \widehat{y}_N \end{pmatrix}}_{\widehat{\mathbf{y}}} = \underbrace{\begin{pmatrix} \phi_0(\mathbf{x}_1) & \phi_1(\mathbf{x}_1) & \cdots & \phi_H(\mathbf{x}_1) \\ \phi_0(\mathbf{x}_2) & \phi_1(\mathbf{x}_2) & \cdots & \phi_H(\mathbf{x}_2) \\ \vdots & & & \vdots \\ \phi_0(\mathbf{x}_N) & \phi_1(\mathbf{x}_N) & \cdots & \phi_H(\mathbf{x}_N) \end{pmatrix}}_{\mathbf{\Phi}} \underbrace{\begin{pmatrix} w_0 \\ w_1 \\ \vdots \\ w_H \end{pmatrix}}_{\mathbf{w}}$$

重みwの積分消去

- このとき、Φは定数行列なので、wを定数行列で変換した $\mathbf{y}=\mathbf{\Phi w}$ もガウス分布に従い、
  - 平均　　$\boldsymbol{\mu}=\mathbb{E}[\mathbf{y}]=\mathbb{E}[\mathbf{\Phi w}]=\mathbf{\Phi}\mathbb{E}[\mathbf{w}]=\mathbf{0}$
  - 共分散　$\mathbf{\Sigma}=\mathbb{E}[\mathbf{y}\mathbf{y}^T]-\mathbb{E}[\mathbf{y}]\mathbb{E}[\mathbf{y}]^T$

    $=\mathbb{E}[(\mathbf{\Phi w})(\mathbf{\Phi w})^T]=\mathbf{\Phi}\mathbb{E}[\mathbf{w}\mathbf{w}^T]\mathbf{\Phi}^T$

    $=\alpha\mathbf{\Phi}\mathbf{\Phi}^T$

- すなわち、yは全体として、

$$\mathbf{y}\sim\mathcal{N}(\mathbf{0},\alpha\mathbf{\Phi}\mathbf{\Phi}^T)$$

のガウス分布に従う.

重みwの積分消去 (2)

$$\underbrace{\begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_N \end{pmatrix}}_{\mathbf{y}} \sim \mathcal{N}\left(\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}, \alpha \underbrace{\begin{pmatrix} \phi_0(\mathbf{x}_1) \cdots \phi_H(\mathbf{x}_1) \\ \phi_0(\mathbf{x}_2) \cdots \phi_H(\mathbf{x}_2) \\ \vdots \\ \phi_0(\mathbf{x}_N) \cdots \phi_H(\mathbf{x}_N) \end{pmatrix}}_{\mathbf{\Phi}} \underbrace{\begin{pmatrix} \phi_0(\mathbf{x}_1) \cdots \phi_0(\mathbf{x}_N) \\ \phi_1(\mathbf{x}_1) \cdots \phi_1(\mathbf{x}_N) \\ \vdots \\ \phi_H(\mathbf{x}_1) \cdots \phi_H(\mathbf{x}_N) \end{pmatrix}}_{\mathbf{\Phi}^T} \right)$$

- 線形回帰モデル

$$\mathbf{y} = \mathbf{\Phi}\mathbf{w}$$

が、ガウス分布に従う重みwを積分消去して

$$\mathbf{y} \sim \mathcal{N}\left(\mathbf{0}, \alpha \mathbf{\Phi}\mathbf{\Phi}^T\right)$$

になった

ガウス過程

$$p(\mathbf{y}|\mathbf{X}) = \mathcal{N}(\mathbf{0}, \alpha\mathbf{\Phi}\mathbf{\Phi}^T)$$

は、どんな入力 $\mathbf{X}=\{\mathbf{x}_n\}_{n=1}^N$ についても成り立つ
→ ガウス過程

- どんな入力 $(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \cdots, \mathbf{x}_N)$ についても、対応する出力 $\mathbf{y}=(y_1, y_2, \cdots, y_N)$ がガウス分布に従うとき、$\mathbf{y}$ はガウス過程に従う、という
  - ガウス過程＝無限次元のガウス分布
  - 線形回帰モデルで、重みwを積分消去したもの
- $\mathbf{K} = \alpha\mathbf{\Phi}\mathbf{\Phi}^T$ の要素を与えるカーネル関数

$$K_{ij} = k(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = \alpha\boldsymbol{\phi}(\mathbf{x}_i)^T\boldsymbol{\phi}(\mathbf{x}_j)$$

だけでガウス分布が定まる (カーネル法, SVMと同じ)

ガウス過程 (2)

$$\mathbf{K} = \lambda^2 \mathbf{\Phi}\mathbf{\Phi}^T = \lambda^2 \underbrace{\begin{pmatrix} \vdots \\ \boxed{\phi(\mathbf{x}_n)^T} \\ \vdots \end{pmatrix}}_{\mathbf{\Phi}} \underbrace{\begin{pmatrix} \cdots & \boxed{\phi(\mathbf{x}_{n'})} & \cdots \end{pmatrix}}_{\mathbf{\Phi}^T}$$

- x_nと$x_{n'}$が近ければ、共分散行列Kの要素$K_{nn'}$も大きい
  ↓
  y_n, $y_{n'}$が近い値をとる
- ガウス過程は、xが似ていればyも似ている ことを数学的に表すための確率過程.

カーネルと特徴ベクトル

- ガウス過程では、$K_{ij} = \alpha \boldsymbol{\phi}(\mathbf{x}_i)^T \boldsymbol{\phi}(\mathbf{x}_j)$ だけが必要

  ↓

  $\boldsymbol{\phi}(\mathbf{x}_i), \boldsymbol{\phi}(\mathbf{x}_j)$ を直接求める必要はない

  – 例： $k(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = (x_1 x_1' + x_2 x_2' + 1)^2$ のとき
  $\phi(\mathbf{x}) = (x_1^2, x_2^2, \sqrt{2}x_1 x_2, \sqrt{2}x_1, \sqrt{2}x_2, 1)$ となるが、
  この $\phi(\mathbf{x})$ を計算する必要はない

- $\phi(\mathbf{x})$ を求めると、無限次元になることもある
(＝無限次元の線形回帰モデルに相当)
- これをカーネルトリックという

さまざまなカーネル

- 線形カーネル: $k(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \mathbf{x}^T \mathbf{x}'$
  - $\phi(\mathbf{x}) = \mathbf{x}$ を意味する→ガウス過程は、重回帰を包む
- ガウスカーネル:

$$k(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \exp\left(-\frac{|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|^2}{\theta}\right)$$

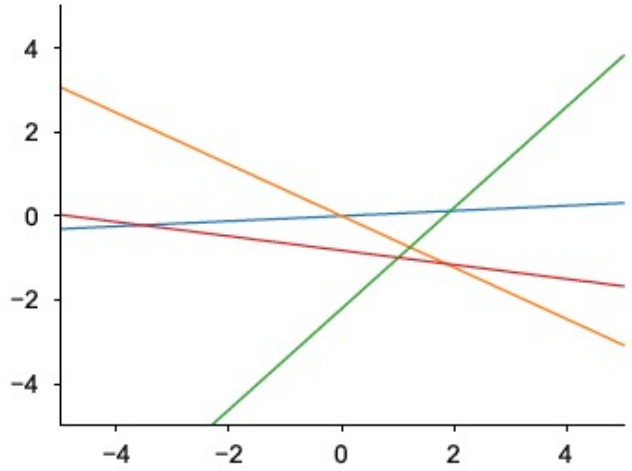
- 指数カーネル:

$$k(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \exp\left(-\frac{|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}{\theta}\right)$$

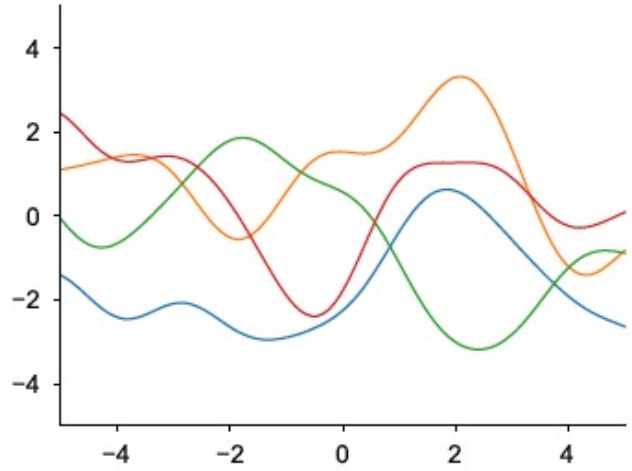
- 周期カーネル:

$$k(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \exp\left(\cos\theta_1 \left(\frac{|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}{\theta_2}\right)\right)$$

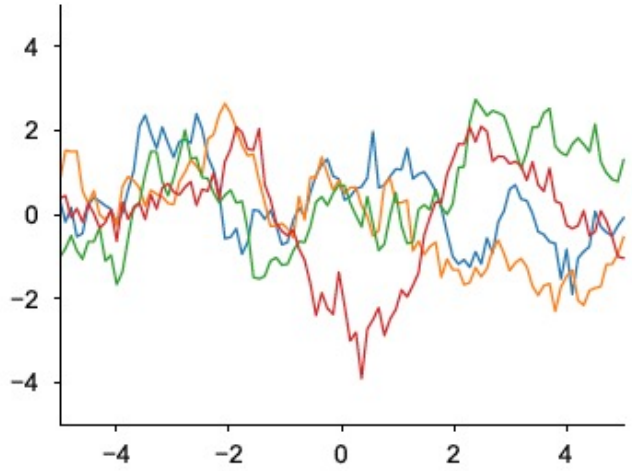
さまざまなカーネル (2)



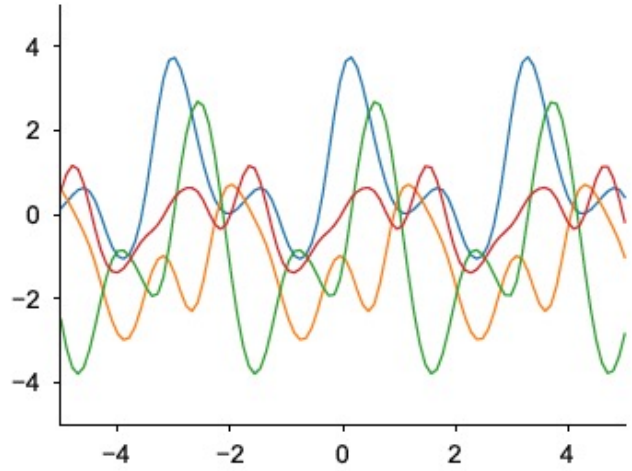
(a) 線形カーネル: $\mathbf{x}^T\mathbf{x}'$



(b) ガウスカーネル: $\exp(-|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|^2/\theta)$



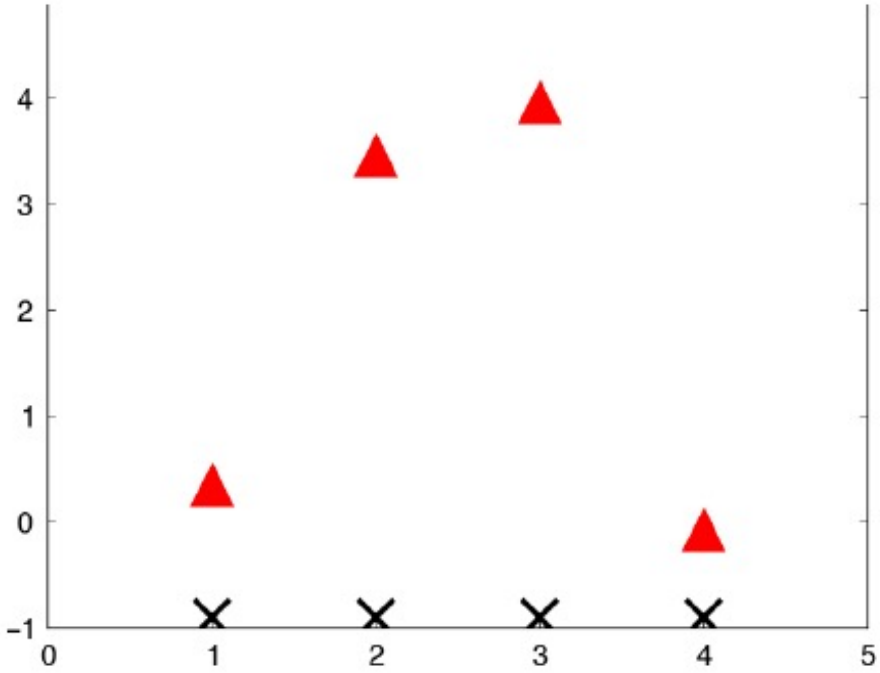
(c) 指数カーネル: $\exp(-|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|/\theta)$
(Ornstein-Uhlenbeck 過程)



(d) 周期カーネル: $\exp(\theta_1 \cos(|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|/\theta_2))$

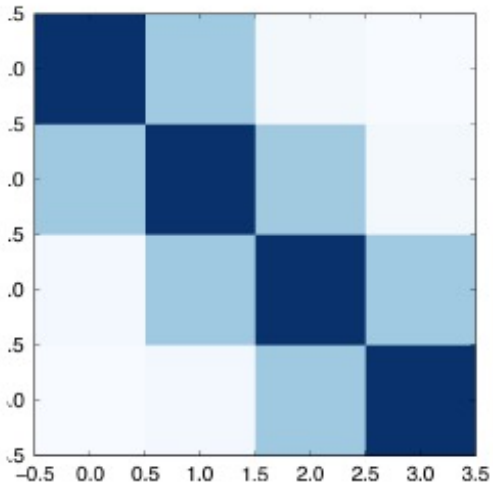
直感的理解

- 相関のある多変量ガウス分布



ガウス分布からのサンプル

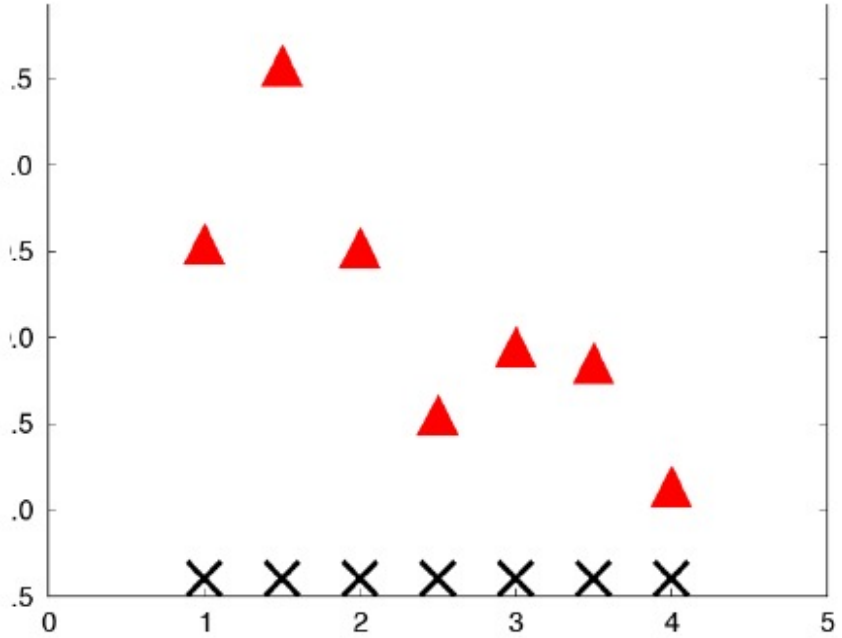
$K =$



分散・共分散行列

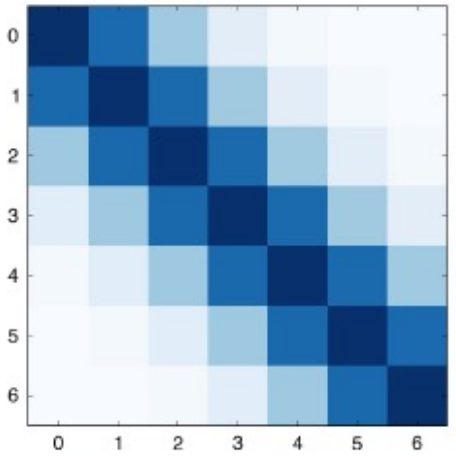
直感的理解

- 相関のある多変量ガウス分布



ガウス分布からのサンプル

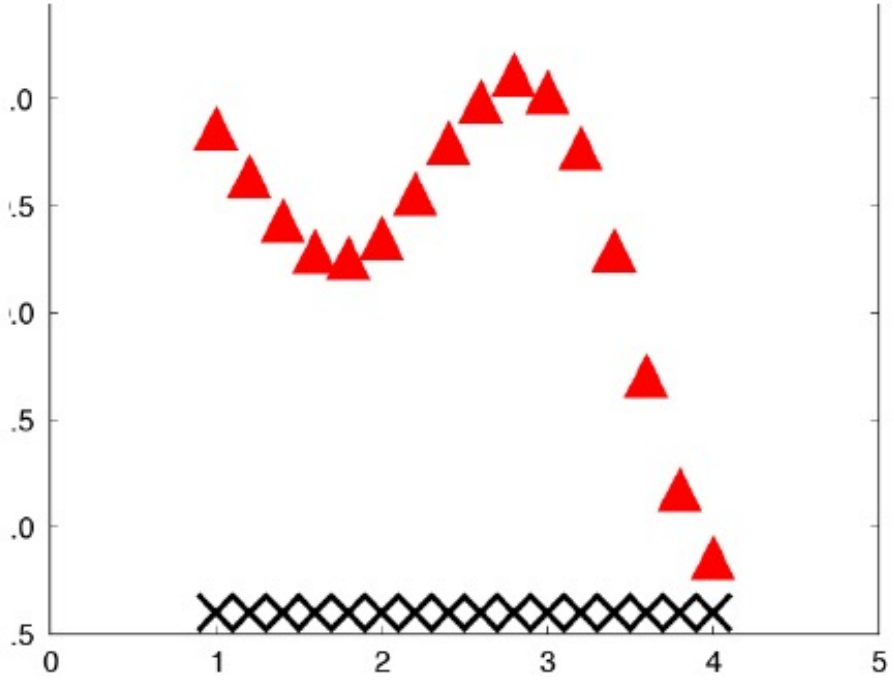
$K =$



分散・共分散行列

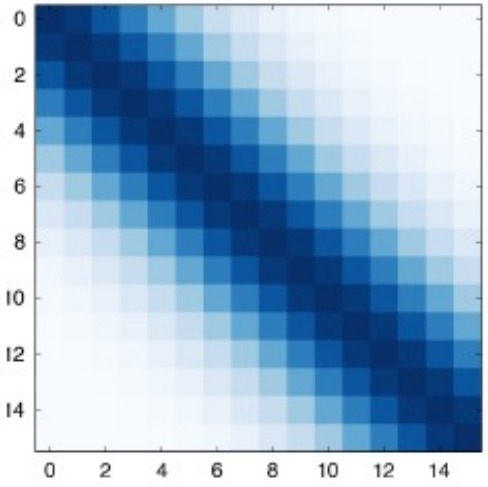
直感的理解

- 相関のある多変量ガウス分布



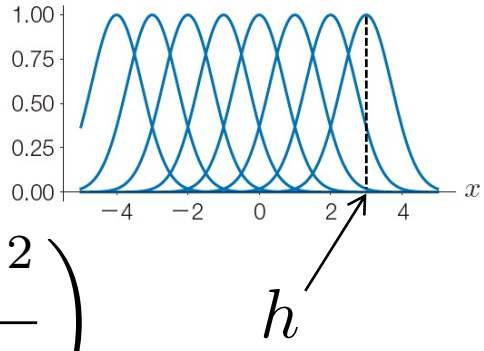
ガウス分布からのサンプル

$K =$



分散・共分散行列

「基底関数」の消去



- 点hでの基底関数

$$\phi_h(x) = \tau \exp\left(-\frac{(x - h/H)^2}{r^2}\right)$$

を考えてみる

- $H \to \infty$にしてグリッドを無限に細かくすると、

$$k(x, x') = \lim_{H\to\infty} \sum_{h=-H^2}^{H^2} \phi_h(x)\phi_h(x')$$

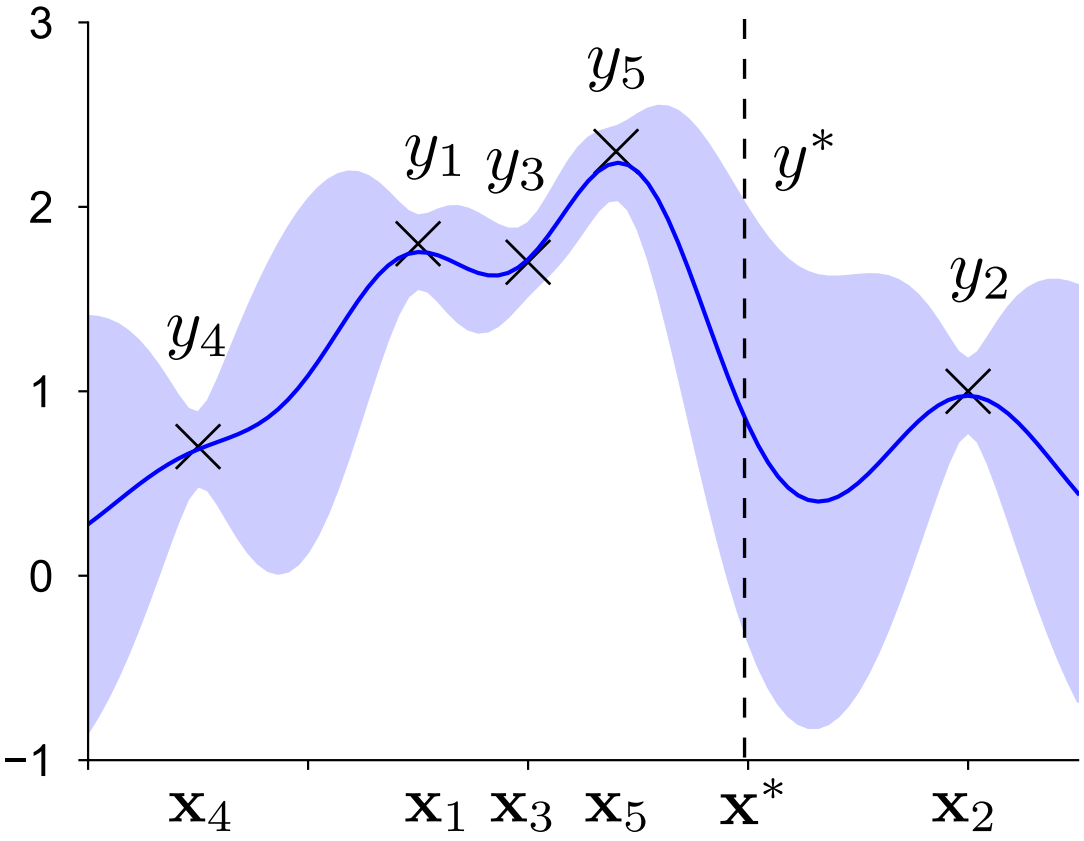
$$\to \int_{-\infty}^{\infty} \tau^2 \exp\left(-\frac{(x-h)^2}{r^2}\right) \exp\left(-\frac{(x'-h)^2}{r^2}\right) dh$$

$$= \tau^2 \sqrt{\pi r^2/2}\ \exp\left(-\frac{1}{2r^2}(x-x')^2\right)$$

$$\equiv \boxed{\theta_1 \exp\left(-\frac{1}{\theta_2}(x-x')^2\right)}$$ ガウスカーネル！

ガウス過程回帰モデル

- 新しい入力点x*での出力y*の分布はどうなるか？



ガウス過程回帰モデル (2)

- 学習データのyにy*を加えた y'=(y, y*) が、
  学習データのXにx*を加えたX'から計算される行列
  を共分散行列としたガウス分布に従うので

$$\begin{pmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_N \\ y^* \end{pmatrix} \sim \mathcal{N}\left(\begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{array}{c} \mathbf{x}_1 \\ \vdots \\ \mathbf{x}_N \\ \mathbf{x}^* \end{array} \overset{\mathbf{x}_1 \quad \cdots \quad \mathbf{x}_N \quad \mathbf{x}^*}{\begin{pmatrix} \mathbf{K} & \mathbf{k}_* \\ \mathbf{k}_*^T & k_{**} \end{pmatrix}} \right)$$

ここで $\mathbf{k}_* = (k(x^*, x_1), k(x^*, x_2), \cdots, k(x^*, x_N))$

$k_{**} = k(x^*, x^*)$

ガウス過程回帰モデル (3)

- 数式で簡潔に書くと

$$\begin{pmatrix} \mathbf{y} \\ y^* \end{pmatrix} \sim \mathcal{N}\left(\mathbf{0}, \begin{pmatrix} \mathbf{K} & \mathbf{k}_* \\ \mathbf{k}_*^T & k_{**} \end{pmatrix}\right)$$

- なので、多変量ガウス分布の条件つき分布の公式から

$$p(y^*|\mathbf{x}^*, \mathbf{X}, \mathbf{y}) = \mathcal{N}\left(\mathbf{k}_*^T\mathbf{K}^{-1}\mathbf{y},\ k_{**} - \mathbf{k}_*^T\mathbf{K}^{-1}\mathbf{k}_*\right)$$

  - よって、その期待値は

$$\mathbb{E}[y^*|\mathbf{x}^*, \mathbf{X}, \mathbf{y}] = \mathbf{k}_*^T\mathbf{K}^{-1}\mathbf{y}$$

条件付きガウス分布の公式

- 多変量ガウス分布の条件付き分布は、

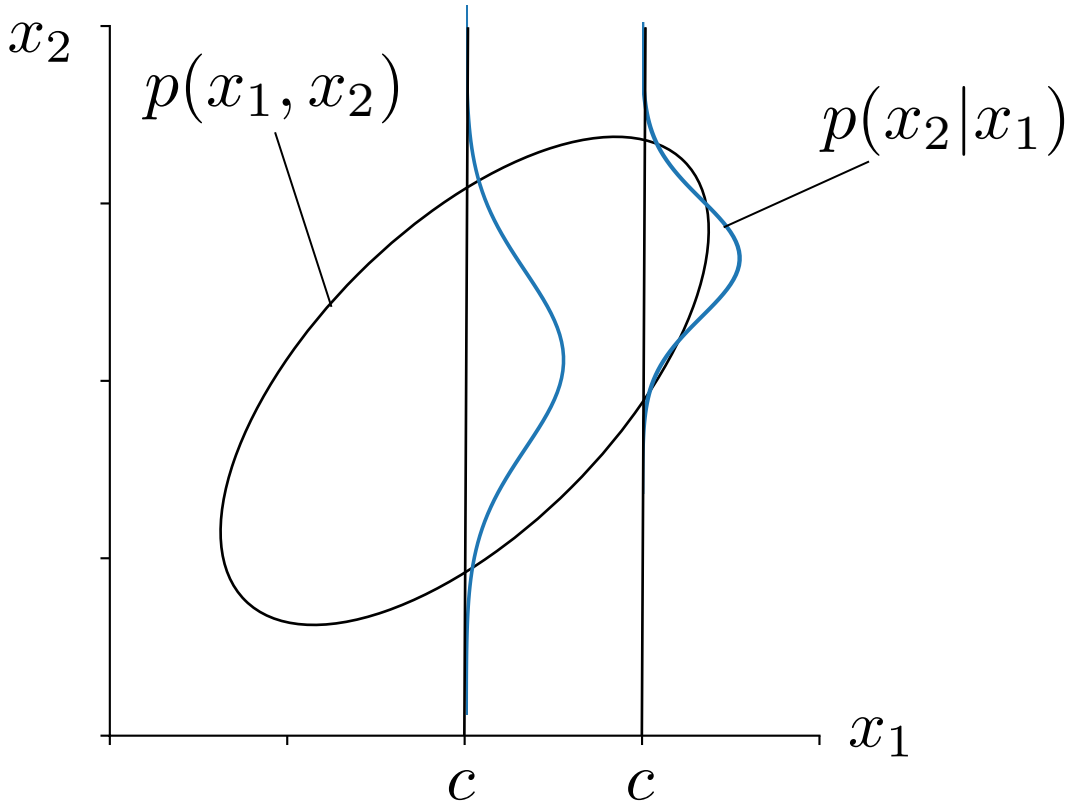
$$\begin{pmatrix} \mathbf{x}_1 \\ \mathbf{x}_2 \end{pmatrix} \sim \mathcal{N}\left(\begin{pmatrix} \boldsymbol{\mu}_1 \\ \boldsymbol{\mu}_2 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \boldsymbol{\Sigma}_{11} & \boldsymbol{\Sigma}_{12} \\ \boldsymbol{\Sigma}_{21} & \boldsymbol{\Sigma}_{22} \end{pmatrix} \right)$$

  のとき

$$p(\mathbf{x}_2|\mathbf{x}_1) = \mathcal{N}\left(\boldsymbol{\mu}_2 + \boldsymbol{\Sigma}_{21}\boldsymbol{\Sigma}_{11}^{-1}(\mathbf{x}_1 - \boldsymbol{\mu}_1), \boldsymbol{\Sigma}_{22} - \boldsymbol{\Sigma}_{21}\boldsymbol{\Sigma}_{11}^{-1}\boldsymbol{\Sigma}_{12}\right)$$

- 証明は教科書を参照してください

条件付きガウス分布のイメージ



- 多変量ガウス分布 $p(x_1, x_2)$ を x_1 で条件づけると、「切り口」$p(x_2|x_1)$ はまたガウス分布になる

ガウス過程回帰モデル (4)

- 注：ガウス過程回帰の期待値

$$\mathbb{E}[y^*|\mathbf{x}^*, \mathbf{X}, \mathbf{y}] = \mathbf{k}_*^T \mathbf{K}^{-1} \mathbf{y}$$

はカーネルリッジ回帰と実は同じだが、カーネル法と異なりベイズ推定なので、

- 分散も使って分布を推定することができ、

$$p(y^*|\mathbf{x}^*, \mathbf{X}, \mathbf{y}) = \mathcal{N}\left(\mathbf{k}_*^T \mathbf{K}^{-1} \mathbf{y},\, k_{**} - \mathbf{k}_*^T \mathbf{K}^{-1} \mathbf{k}_*\right)$$

- カーネル法と違って完全な確率モデルなので、カーネル自体を学習することも可能
  (通常のカーネル法ではクロスバリデーションに頼る必要があり、最適化は難しい)

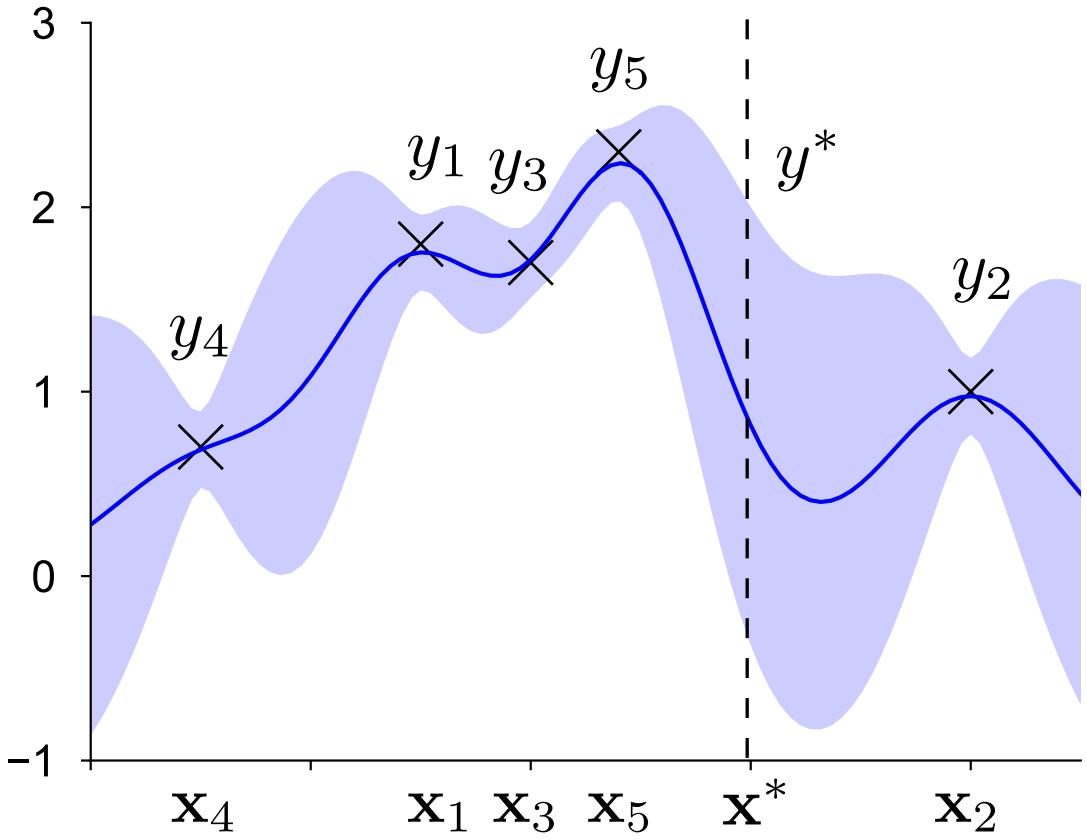
ガウス過程回帰のアルゴリズム

1: [mu,var] = gpr (xtest, xtrain, ytrain, kernel)
2: N = length (ytrain)
3: **for** $n = 1 \cdots N$ **do**
4: **for** $n' = 1 \cdots N$ **do**
5: $K[n, n'] = \text{kernel}(\text{xtrain}[n], \text{xtrain}[n'])$
6: **end for**
7: **end for**
8: yy = $K^{-1} *$ ytrain
9: **for** $m = 1 \cdots M$ **do**
10: **for** $n = 1 \cdots N$ **do**
11: $k[n] = \text{kernel}(\text{xtrain}[n], \text{xtest}[m])$
12: **end for**
13: $s = \text{kernel}(\text{xtest}[m], \text{xtest}[m])$
14: mu$[m] = k *$ yy
15: var$[m] = s - k * K^{-1} * k^T$
16: **end for**

入力:
xtrain $= [\mathbf{x}_1, \ldots, \mathbf{x}_N]$
– 入力 $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^D$ を N 個並べたベクトル.
ytrain $= [y_1, \ldots, y_N]^T$
– 出力 $y \in \mathbb{R}$ を N 個並べたベクトル.
xtest $= [\mathbf{x}'_1, \ldots, \mathbf{x}'_M]$
– 回帰したい入力 $\mathbf{x}'$ を M 個並べたベクトル.
出力:
mu : xtest に対応する y の期待値
var : xtest に対応する y の分散

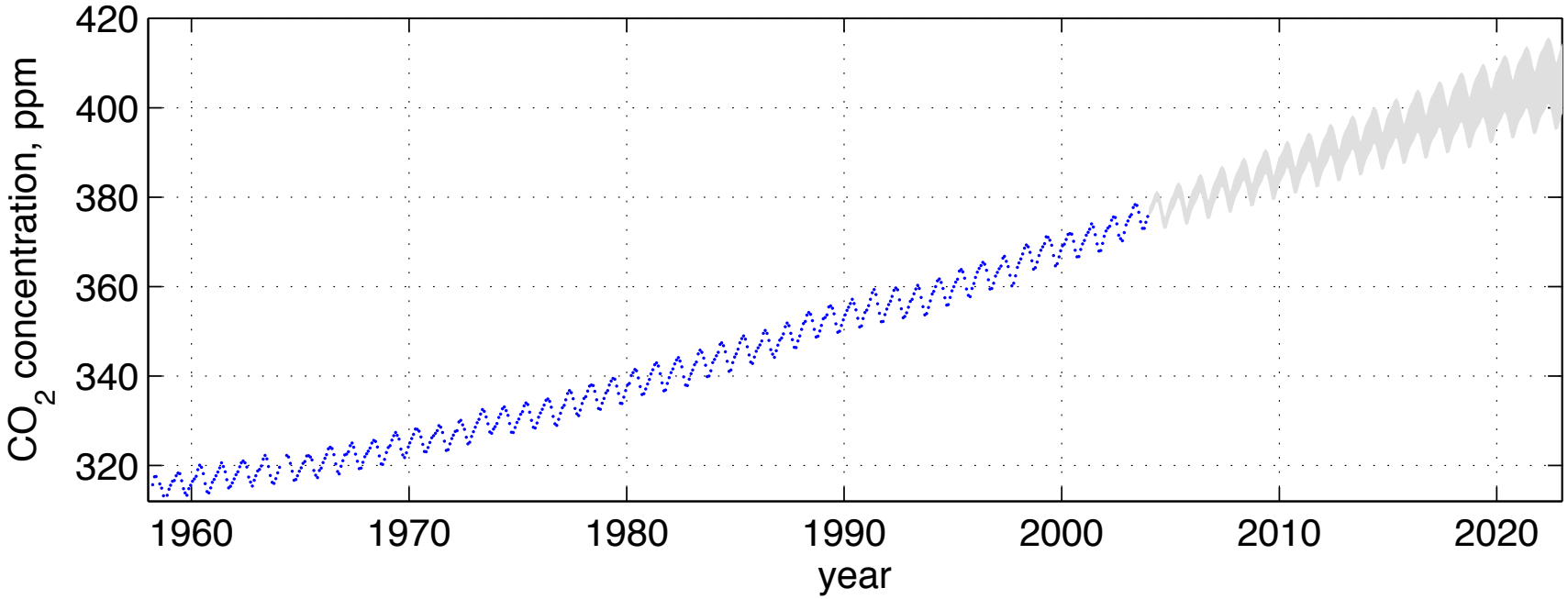
- (xtrain,ytrain)が与えられたとき、xtestの各点について平均muと分散varを出力

ガウス過程回帰の例



- 新しい入力x*での予測値y*の分布は、ガウス分布
- 青線は期待値、水色の領域は±2σのエリア

マウナロアCO_2濃度データ



- GPML p.119より引用
- 周期カーネルを使うことで、非常に正確に周期データにフィットして予測することができる!

Gaussian processes on galaxy

Finding Galaxies in the Shadows of Quasars with Gaussian Processes

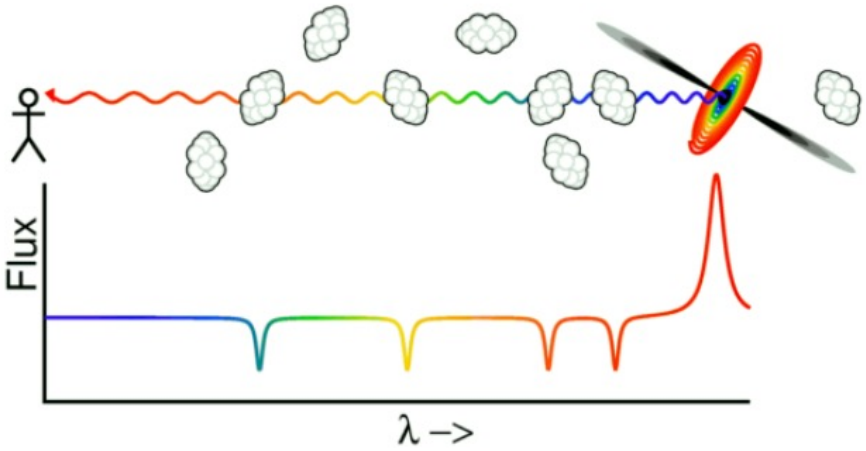
Roman Garnett GARNETT@WUSTL.EDU
Washington University in St. Louis, St. Louis, MO 63130, United States

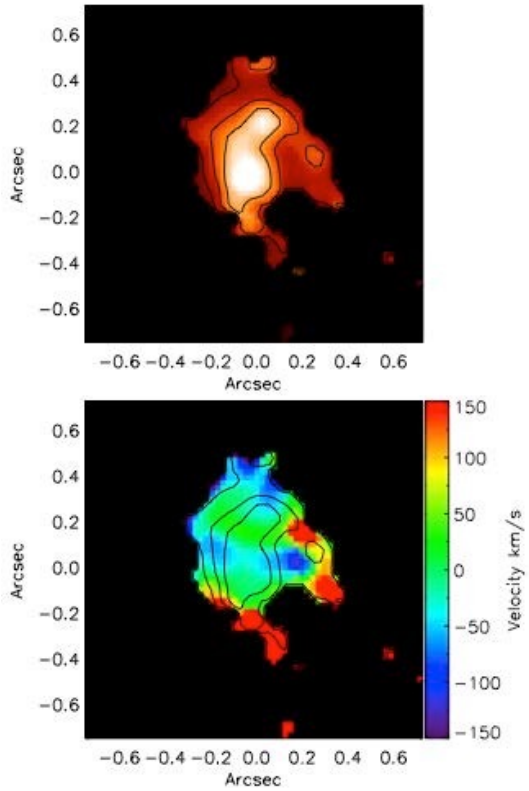
Shirley Ho SHIRLEYH@ANDREW.CMU.EDU
Jeff Schneider JEFF.SCHNEIDER@CS.CMU.EDU
Carnegie Mellon University, Pittsburgh, PA 15213, United States

(ICML 2015)

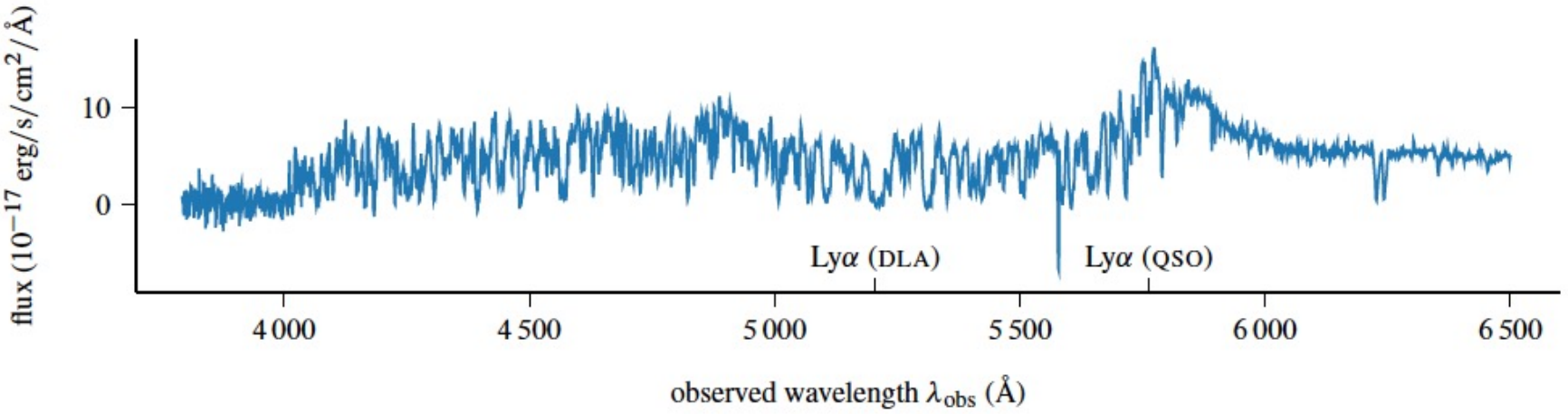
Gaussian processes on galaxy (2)

- Astronomers want to find DLA (Damped Lyman-α systems):
  - Large gaseous objects with neutral hydrogen gas
  - Emits little light and cannot be observed directly.



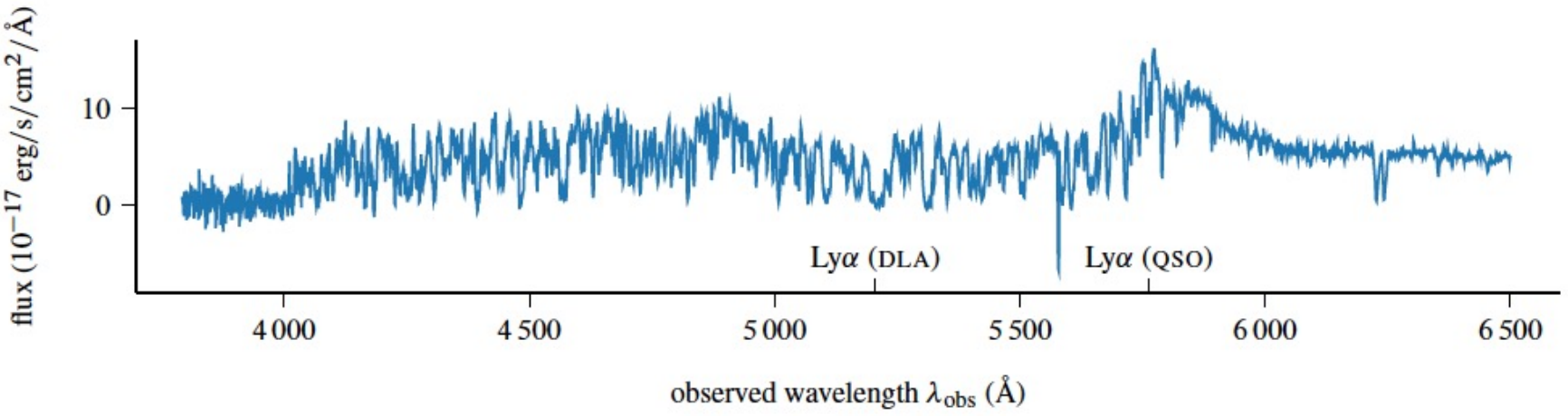


Finding DLAs



- DLAs can be found by quaser emission spectrum
- Usually: by astronomers looking at it

Finding DLAs

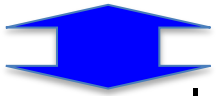


- Problem: Quaser spectrums are huge in number!
  - Sloan digital survey: 300 000
  - Millions of quasers observed
- How to automate discoveries?

Finding DLAs

- Solution: compare probabilities of

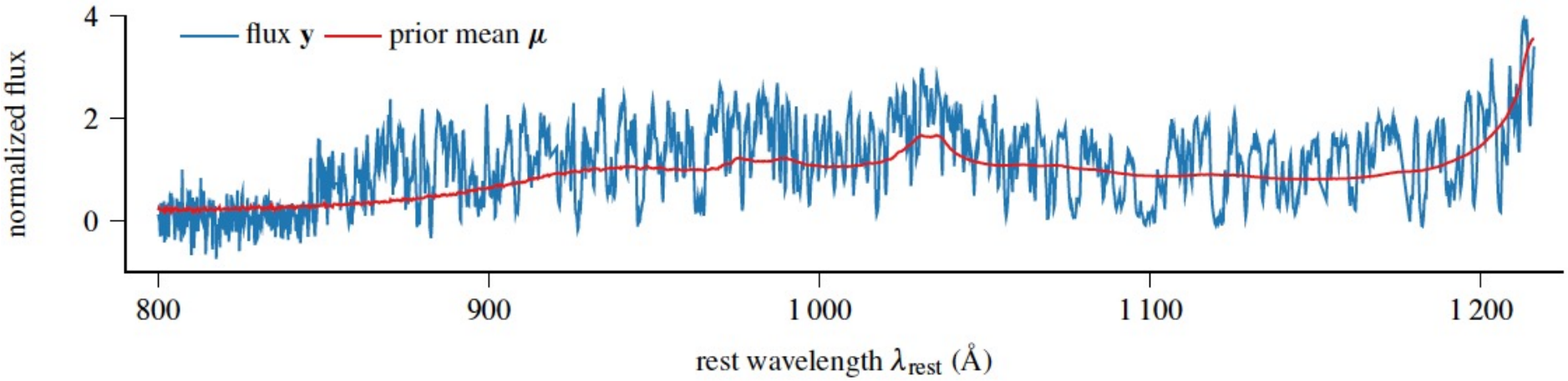
$$p(\text{spectrum} \mid \text{DLA exists})$$



$$p(\text{spectrum} \mid \text{DLA does not exist})$$

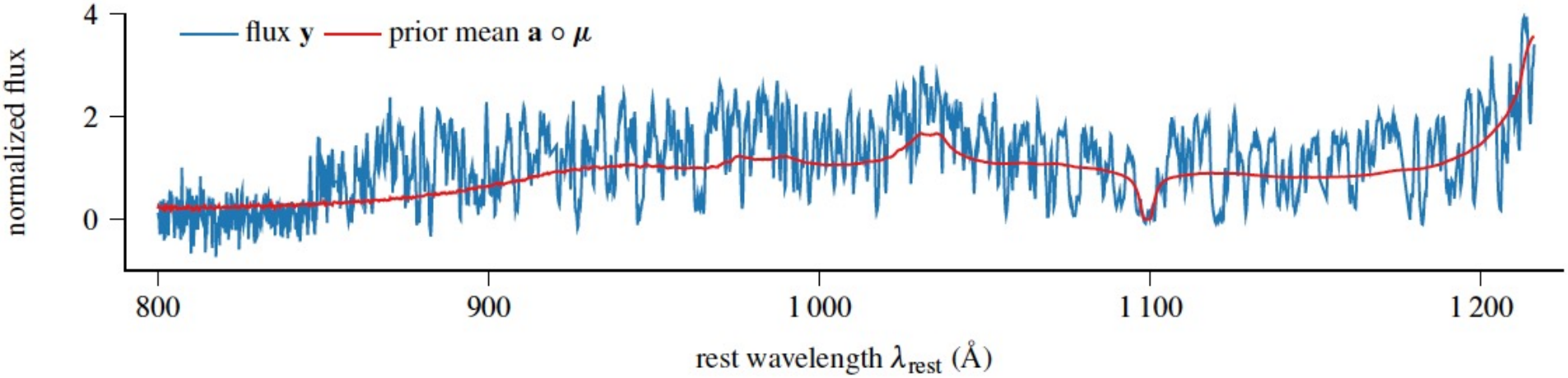
- How to define these non-trivial probabilities?

Case of no DLAs



- Gaussian process + noise
- log p(spectrum|¬DLA) = -2589.

Case of DLAs



- Gaussian process + unknown absorption
- log p(spectrum|DLA) = -2453 > -2589
  = p(spectrum|¬DLA)
- DLA exists!

Technically..

- If DLA does not exist

$$p(\mathbf{y}|\Theta, \neg\mathrm{DLA}) = \mathrm{N}(\mathbf{y}|\boldsymbol{\mu}, K+\Omega+N)$$

- If DLA exist

$$y(\lambda) = f(\lambda)e^{-\tau(z,N)} + \epsilon$$

$$\downarrow$$

$$p(\mathbf{y}|\Theta, \mathrm{DLA}, z, N) = \mathrm{N}(\mathbf{y}|\boldsymbol{a} \circ \boldsymbol{\mu}, A(K+\Omega)A+N)$$

Absorption frequency dependent!

Technically..

- If DLA does not exist

$$p(\mathbf{y}|\Theta, \neg\mathrm{DLA}) = \mathrm{N}(\mathbf{y}|\boldsymbol{\mu}, K+\Omega+N)$$

- If DLA exist

Unknown frequencies

$$p(\mathbf{y}|\Theta, \mathrm{DLA}) = \int p(\mathbf{y}, z, N|\Theta, \mathrm{DLA})dzdN$$

$$= \int p(\mathbf{y}|\Theta, \mathrm{DLA}, z, N)p(z, N)dzdN$$

$$= (\text{numerical integration}).$$

  - Requires understanding of Gaussian process machinery and statistics!

ガウス過程とカーネルの学習

ハイパーパラメータの最適化

$$k(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = \theta_1 \exp\left(-\frac{|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j|^2}{\theta_2}\right) + \theta_3 \delta(i,j)$$

- カーネルのハイパーパラメータを $\boldsymbol{\theta} = (\theta_1, \theta_2, \theta_3)$ とおくと、yの確率はガウス分布なので、θに依存して

$$\begin{aligned} p(\mathbf{y}|\mathbf{X}, \boldsymbol{\theta}) &= \mathcal{N}(\mathbf{y}|\mathbf{0}, \mathbf{K}_{\boldsymbol{\theta}}) \\ &= \frac{1}{(2\pi)^{N/2}} \frac{1}{|\mathbf{K}_{\boldsymbol{\theta}}|^{1/2}} \exp\left(-\frac{1}{2}\mathbf{y}^T \mathbf{K}_{\boldsymbol{\theta}}^{-1} \mathbf{y}\right) \end{aligned}$$

- すなわち、

$$\log p(\mathbf{y}|\mathbf{X}, \boldsymbol{\theta}) = \log |\mathbf{K}_{\boldsymbol{\theta}}| - \mathbf{y}^T \mathbf{K}_{\boldsymbol{\theta}}^{-1} \mathbf{y} + \text{const.}$$

  - これを最大にするθを求めればよい.

ハイパーパラメータの最適化 (2)

$$L = \log p(\mathbf{y}|\mathbf{X}, \boldsymbol{\theta}) = \log |\mathbf{K}_{\boldsymbol{\theta}}| - \mathbf{y}^T \mathbf{K}_{\boldsymbol{\theta}}^{-1} \mathbf{y} + \text{const.}$$

- ある $\theta \in \boldsymbol{\theta}$ について、微分の連鎖則から

$$\frac{\partial L}{\partial \theta} = \frac{\partial L}{\partial \mathbf{K}_{\boldsymbol{\theta}}} \frac{\partial \mathbf{K}_{\boldsymbol{\theta}}}{\partial \theta} = \sum_{i=1}^{N} \sum_{j=1}^{N} \frac{\partial L}{\partial K_{ij}} \frac{\partial K_{ij}}{\partial \theta}$$

- ここで

$$\frac{\partial}{\partial \theta} \log |\mathbf{K}_{\boldsymbol{\theta}}| = \text{tr} \left(\mathbf{K}_{\boldsymbol{\theta}}^{-1} \frac{\partial \mathbf{K}_{\boldsymbol{\theta}}}{\partial \theta} \right)$$

$$\frac{\partial}{\partial \theta} \mathbf{K}_{\boldsymbol{\theta}}^{-1} = -\mathbf{K}_{\boldsymbol{\theta}}^{-1} \frac{\partial \mathbf{K}_{\boldsymbol{\theta}}}{\partial \theta} \mathbf{K}_{\boldsymbol{\theta}}^{-1}$$

なので、後は $\frac{\partial K_{ij}}{\partial \theta}$ を使っているカーネルごとに計算すればよい.

ハイパーパラメータの最適化 (3)

- $\dfrac{\partial \mathbf{K}_{\boldsymbol{\theta}}}{\partial \theta}$ は?
  → 各K_{ij}をθで微分して並べた行列.
- 例:
  $$K_{ij} = k(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = \theta_1 \exp\left(-\frac{|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j|^2}{\theta_2}\right) + \theta_3 \delta(i,j)$$
  のとき、
  θ_1>0 なので $\theta_1 = e^{\tau} \rightleftarrows \tau = \log \theta_1$ とおけば、

  $$\frac{\partial k(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j)}{\partial \tau} = e^{\tau} \exp\left(-\frac{|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j|^2}{e^{\tau}}\right) = k(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) - e^{\tau}\delta(i,j)$$

  – θ_2, θ_3 についても同様

ハイパーパラメータの最適化 (4)

- 最適化アルゴリズム (Python, BFGSの場合)

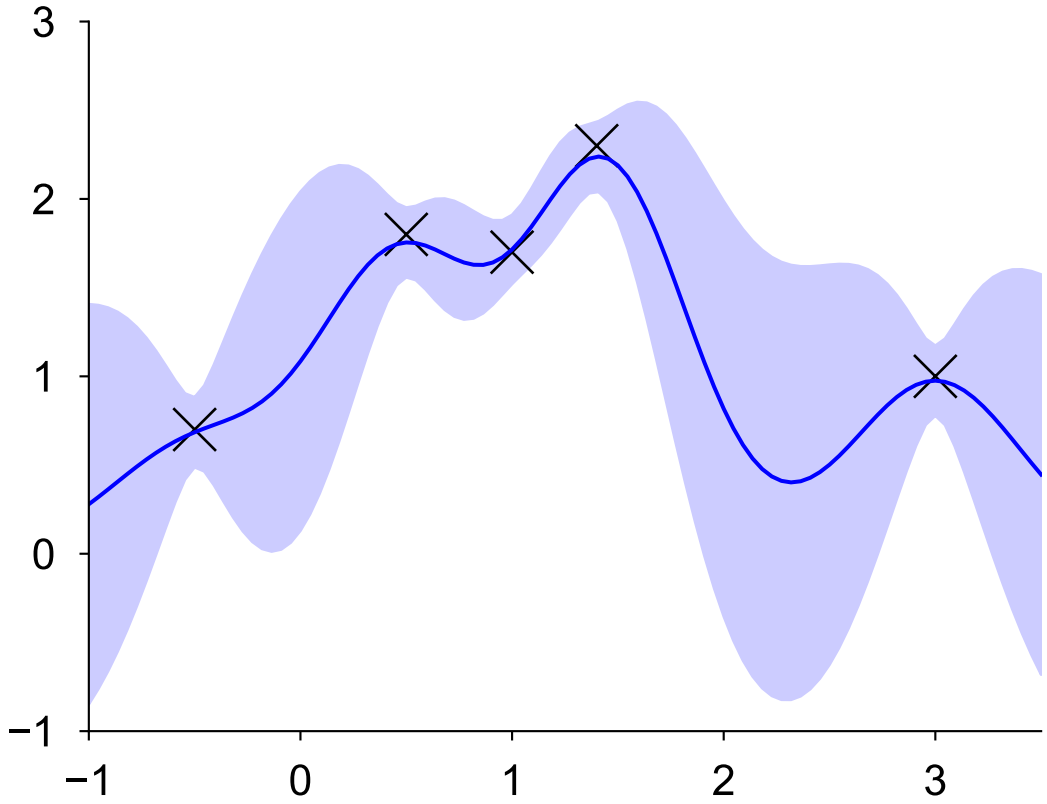
```
from scipy.optimize import minimize

def optimize (xtrain, ytrain, kernel, kgrad, init):
    res = minimize (loglik, init,
                    args = (xtrain,ytrain,kernel,kgrad),
                    jac = gradient, method = 'BFGS',
                    callback = printparam,
                    options = {'gtol' : 1e-4, 'disp' : True})
    print res.message
    return res.x
```

  - loglik で目的関数(負の対数尤度)を、gradientで偏微分を並べたベクトルを計算

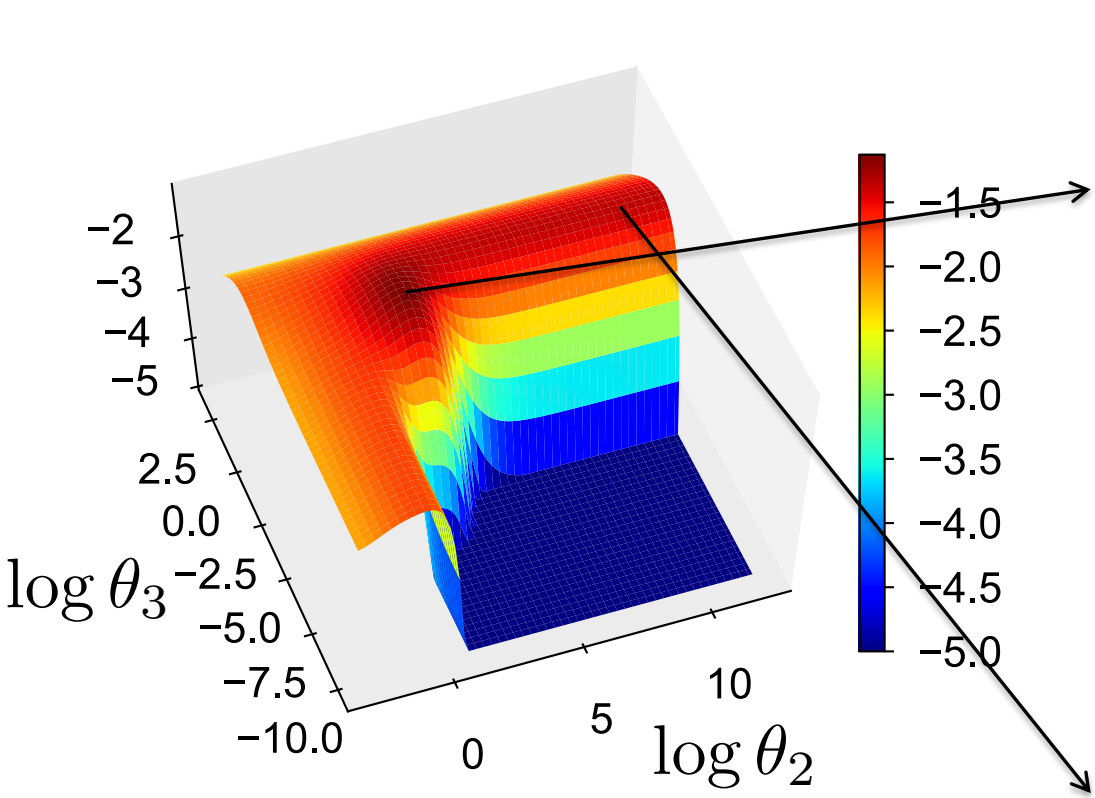
最適化ルーチンは最小化問題を解いているため

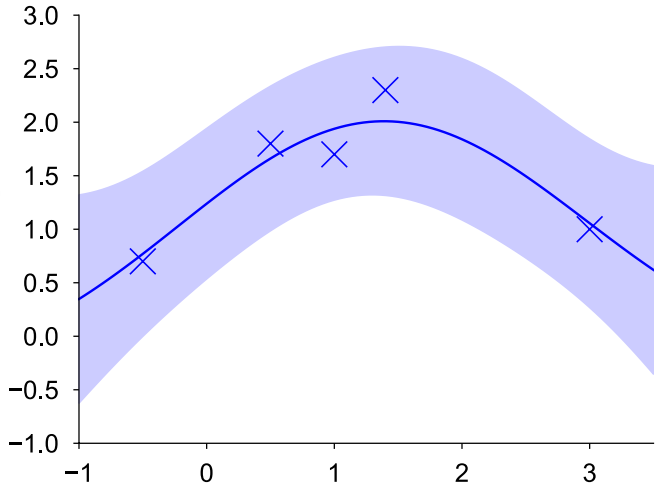
ハイパーパラメータの最適化 (5)

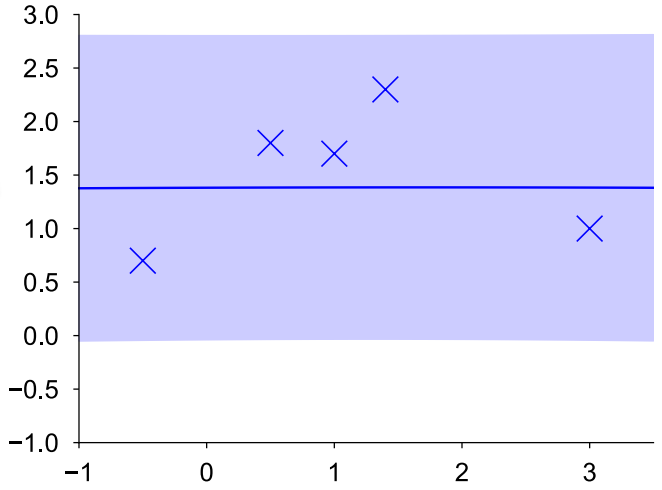


- カーネル $k(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = \theta_1 \exp\left(-\frac{|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j|^2}{\theta_2}\right) + \theta_3 \delta(i,j)$ で、$\theta_1 = 1$ としてみる
- 上の画像は、観測点が少ないので若干オーバーフィット

ハイパーパラメータの最適化 (6)







- $\log\theta_2, \log\theta_3$の関数
- 複数の峰があり、最適化は初期値に依存する

カーネルの組み合わせ

- カーネル $k_1(x,x')$ と $k_2(x,x')$ の和や積も、正しいカーネル関数になる
  - $\theta_1 k_1(\mathbf{x}, \mathbf{x}') + \theta_2 k_2(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$
  - $k_1(\mathbf{x}, \mathbf{x}')^p \cdot k_2(\mathbf{x}, \mathbf{x}')^q \quad (p, q \in \mathbb{N})$

  などは、また有効なカーネル関数→GPML4章を参照
- カーネルとして、たとえば

$$k(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \theta_1 \mathbf{x}^T \mathbf{x}' + \theta_2 \exp\left(\theta_3 \cos\left(\frac{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|}{\theta_4}\right)\right) \quad (\theta_1, \theta_2, \theta_3, \theta_4 \geq 0)$$

を使って $\theta_1, \theta_2, \theta_3, \theta_4$ を最適化すれば、線形性と周期性を自動的に調節した回帰モデルが得られる!

ガウス分布以外の観測モデル (離散値を含む)

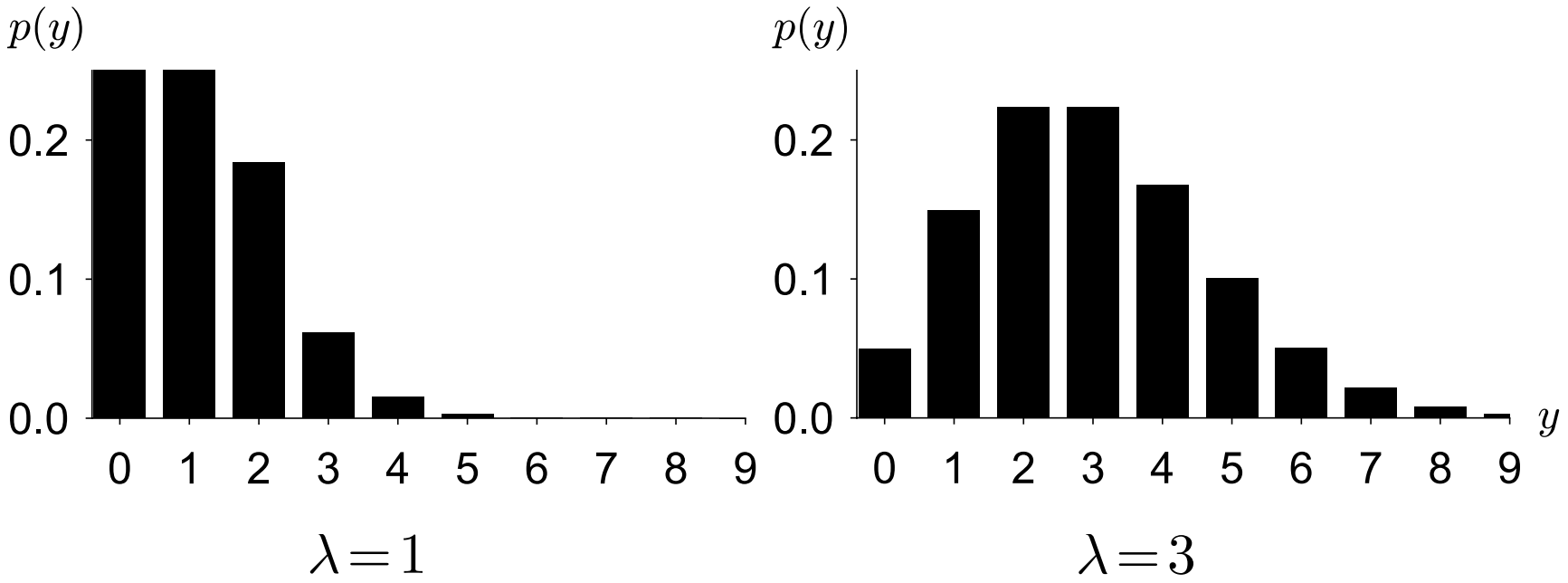
さまざまな観測モデル

- 論文では $p(\mathbf{y}|\mathbf{f})$ がガウス分布だと仮定されることが多いが、現実の観測値yはガウス分布とは限らない
  - 離散観測値：y=2,1,4,3,1,0,1,...
  - 外れ値の存在 (ガウス分布では外れ値を扱えない)
  - 点過程データ：イベントがfに基づいてランダムに生起

ポアソン観測モデル

- ポアソン分布: 自然数上の確率分布

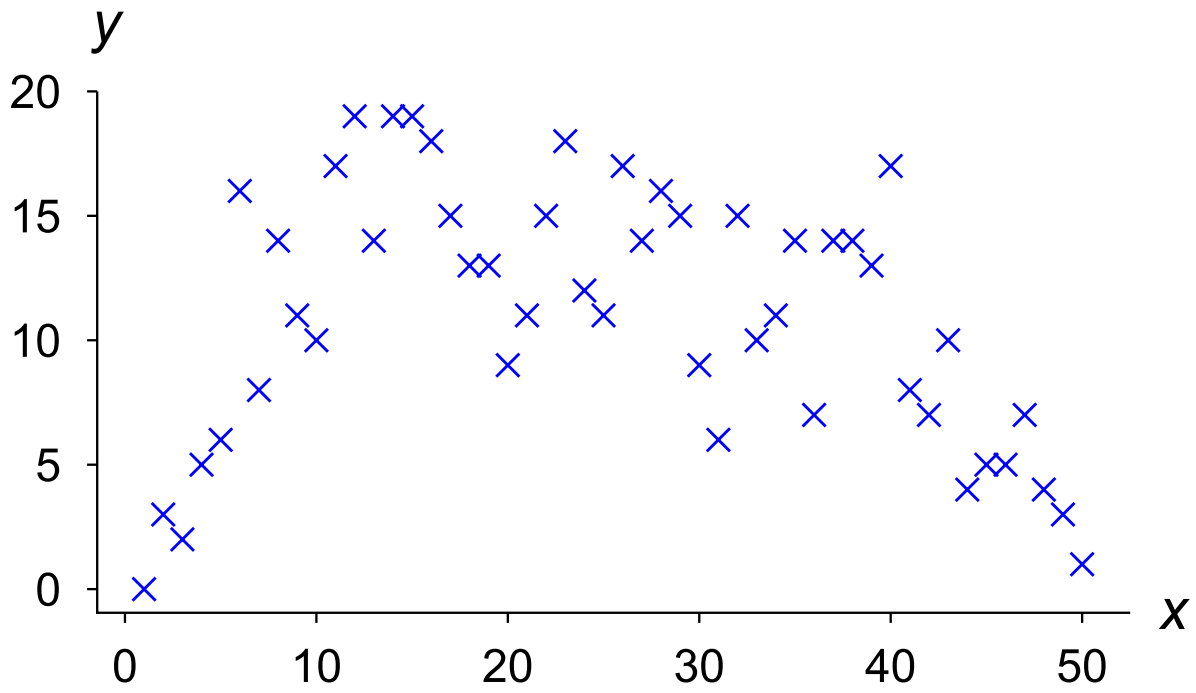
$$p(y|\lambda) = \frac{\lambda^y e^{-\lambda}}{y!} \quad (y = 0, 1, 2, \cdots)$$



ポアソン観測モデル (2)

$$p(y|\lambda) = \frac{\lambda^y e^{-\lambda}}{y!} \quad (y = 0, 1, 2, \cdots)$$

- $\lambda > 0$ なので、$\lambda = e^{f(\mathbf{x})}$ とおく
(場所 $\mathbf{x}$ におけるポアソン分布の期待値)



場所xにおける植物の個体数の架空データ
(久保拓弥「データ解析のための統計モデリング入門」より)

ポアソン観測モデル (3)

- ここでも、事後分布はガウス分布ではない

$$p(\mathbf{f}|\mathbf{y}) \propto p(\mathbf{y}|\mathbf{f})p(\mathbf{f})$$

$$= \prod_{n=1}^{N} \frac{\exp(f(x_n)y_n - e^{f(x_n)})}{y_n!} \cdot \exp\left(-\frac{1}{2}\mathbf{f}^T\mathbf{K}^{-1}\mathbf{f}\right)$$

- たとえば`GPy`で計算

ポアソン観測モデル (4)

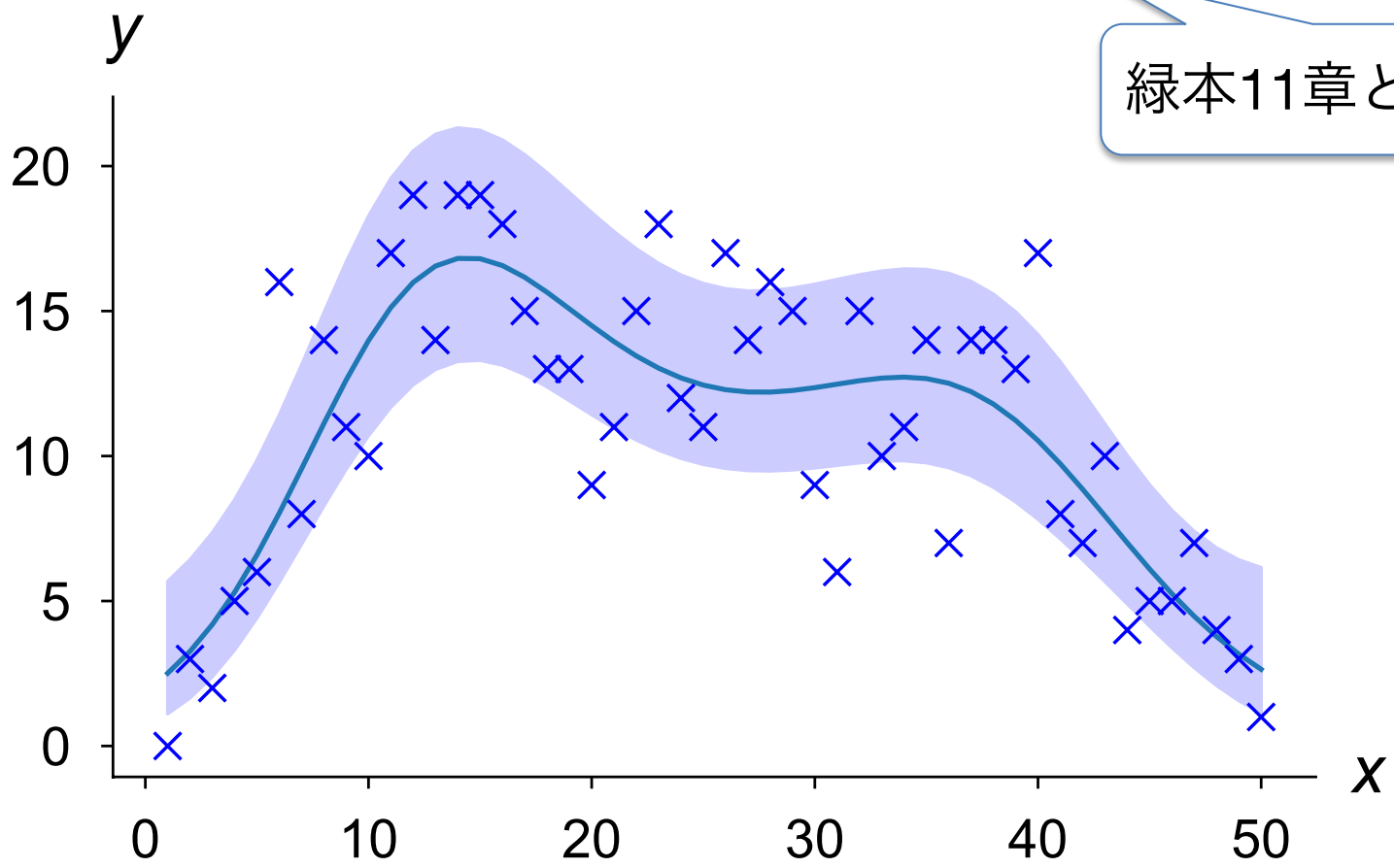
- たとえばGPyで計算

```
import GPy

def gpr_poisson (data):
    N = len(data)
    xx = np.linspace (1,N,N)
    model = GPy.core.GP (X=xx[:,None], Y=data[:,None],¥
                         kernel=GPy.kern.RBF(1),¥
                         inference_method=GPy.inference.latent_
                         function_inference.Laplace(),¥
                         likelihood=GPy.likelihoods.Poisson())
    model.optimize ()
    mu,var = model._raw_predict (xx[:,None])
    plt.plot (xx, np.exp(mu))
    plt.fill_between (xx, exp(mu[:,0] + 3*sqrt(var[:,0])),¥
                      exp(mu[:,0] - 3*sqrt(var[:,0])),¥
                      color='#ccccff')
    plt.plot (xx, data, 'xb', markersize=8)
```

ポアソン観測モデル (5)

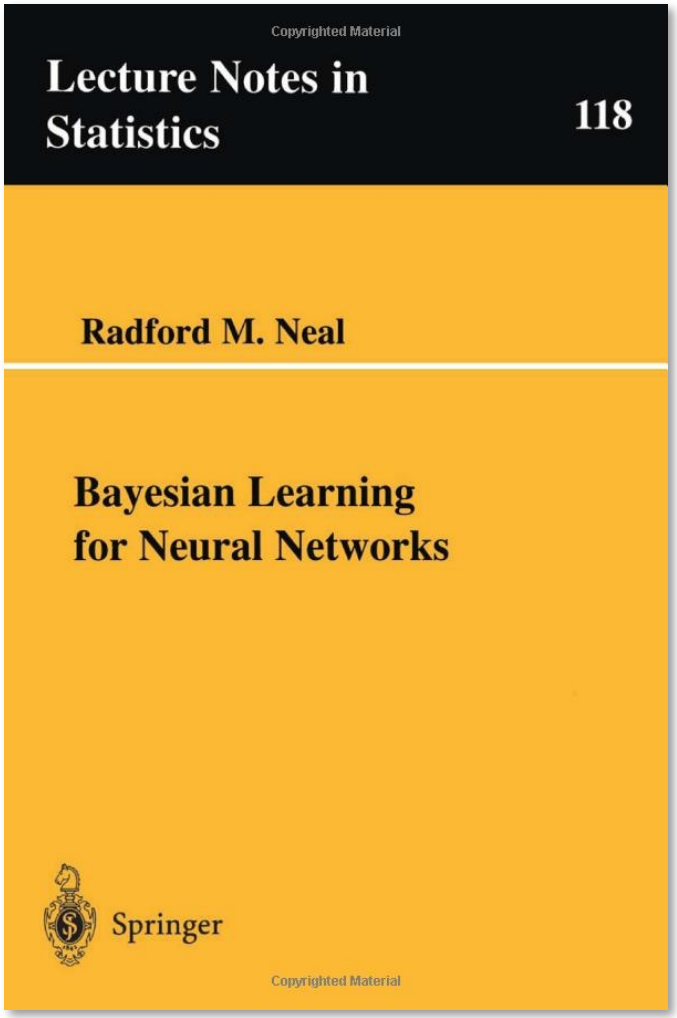
- 推定した結果 (ラプラス近似; 分散が小さめ)
  - 空間的に滑らかな推定結果が得られる



緑本11章と比較！

ガウス過程とニューラルネット

ニューラルネットとガウス過程

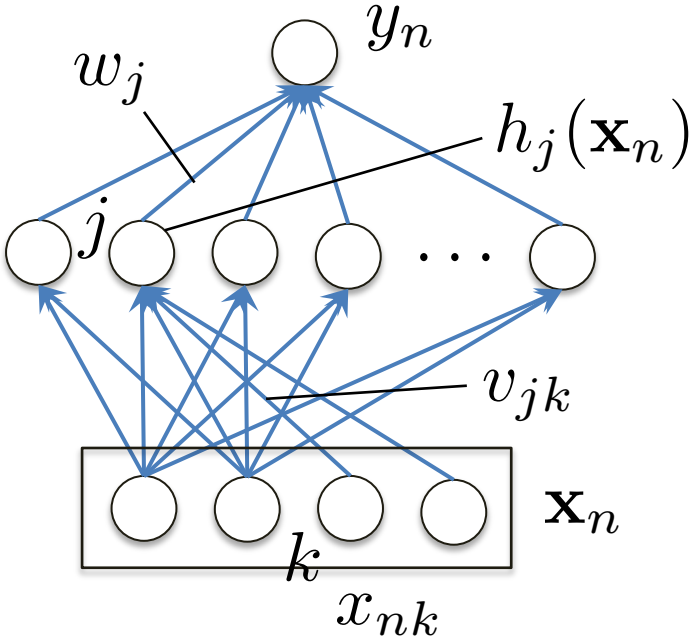


- Neal (1996)は、ニューラルネットワークは素子数→∞の極限でガウス過程と等価であることを示した
- ニューラルネットの多数のパラメータを学習する必要がない!
- 以下、その説明を簡単に紹介

ニューラルネットとガウス過程 (2)

- 入力 $\mathbf{x}_n$ に対して y_n を出力する、右図のような1層のニューラルネットを考える
- 式で書くと、

$$\begin{cases} y_n = \sum_{j=1}^{H} w_j h_j(\mathbf{x}_n) \\ h_j(\mathbf{x}_n) = \sigma(\sum_{k=0}^{D} v_{jk} x_{nk}) \end{cases}$$



  - ただし重み w, v はi.i.d.に

$$w_j \sim \mathcal{N}(0, \sigma_w^2),\ v_{jk} \sim \mathcal{N}(0, \sigma_v^2/H)$$

に従うとする

ニューラルネットとガウス過程 (3)

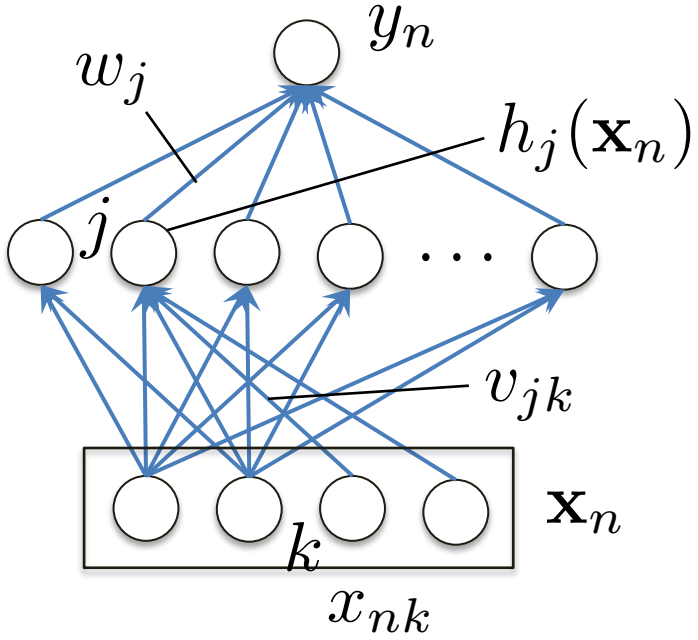
- このとき、y_n の期待値は?
- まず、

$$E[h_j(\mathbf{x}_n)] = E[\sigma(\textstyle\sum_{k=0}^{D} v_{jk} x_{nk})]$$

  は j に関わらず同じ分布
- よって、中心極限定理より

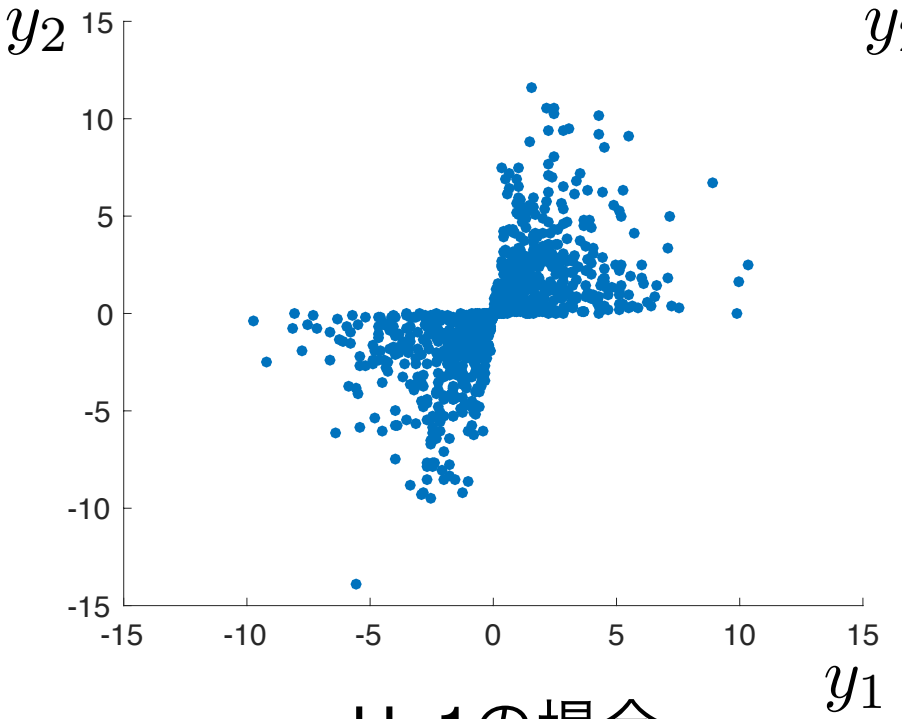
$$y_n = \textstyle\sum_{j=1}^{H} w_j h_j(\mathbf{x}_n)$$

  は、$H \to \infty$ で平均0のガウス分布に収束
- 共分散 $V[y_n y_m] = E[y_n y_m]$ の計算も同様
  → $\mathbf{y} = (y_1, y_2, \ldots, y_N)$ は多変量ガウス分布に収束
  - 詳しい計算は、Neal (1996)を参照のこと

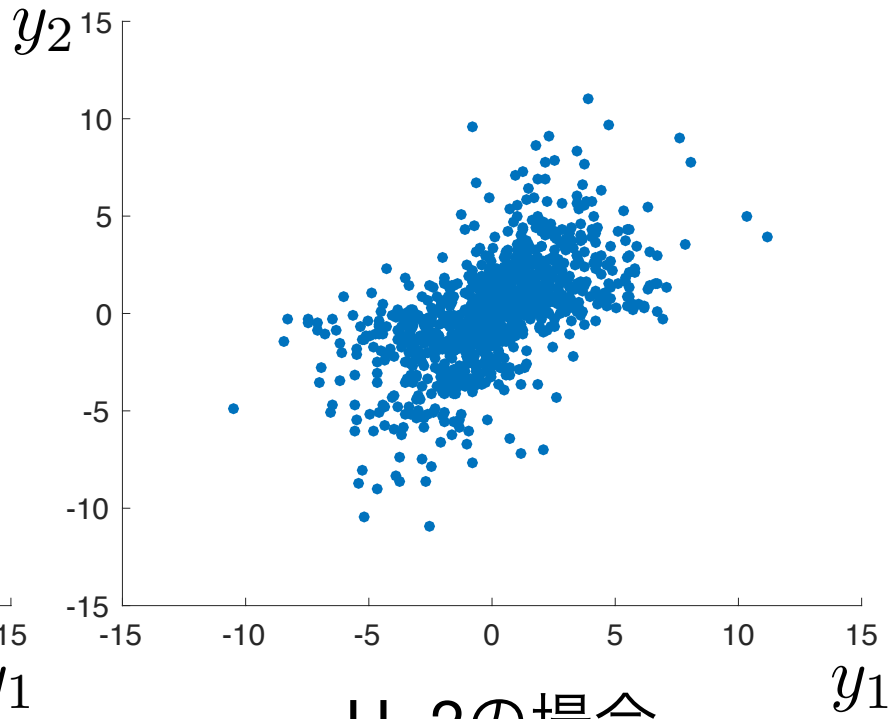


ニューラルネットとガウス過程 (4)

- 事前分布からランダムに生成したニューラルネットについて、入力 $(x_1, x_2) = (-0.2, 0.4)$ に対する出力 (y_1, y_2) をプロット

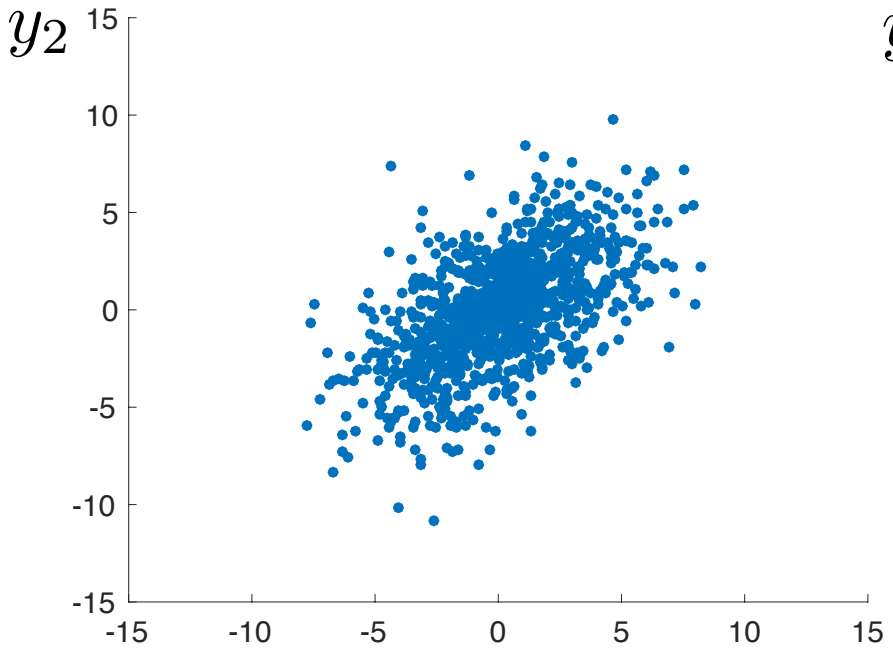


H=1の場合

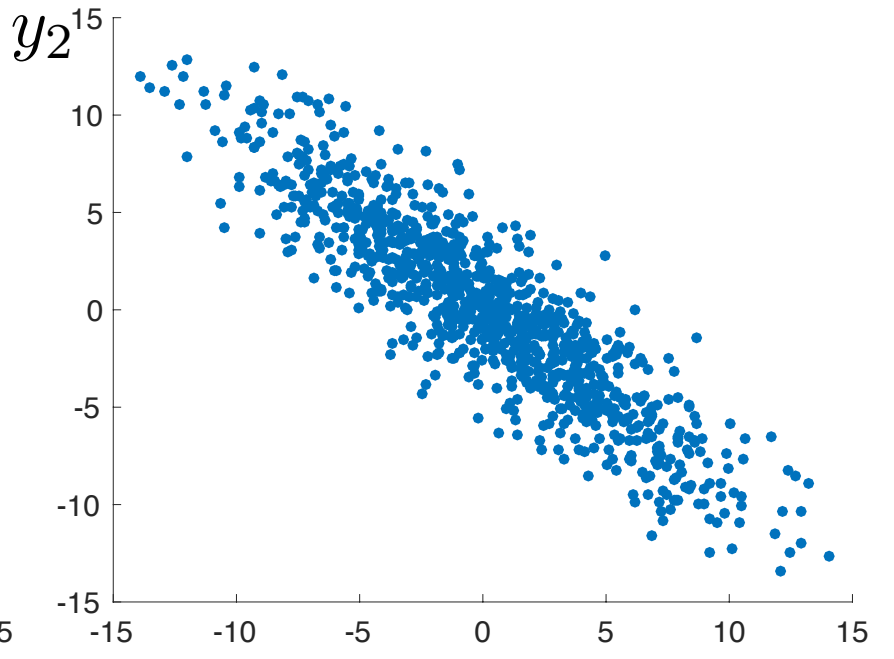


H=2の場合

ニューラルネットとガウス過程 (5)



H=10の場合



H=100の場合

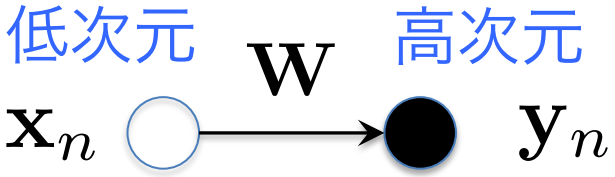
- (y_1,y_2)の同時分布は多変量ガウス分布に漸近する！
  - ノード数H=10ですでにほぼガウス分布と等価
  - 中心極限定理の効果

ガウス過程による教師なし学習

ガウス過程と教師なし学習

- ガウス過程回帰モデルでは、入力xと出力yのペア $(\mathbf{x}, y)$が与えられていた
- 観測値 $\mathbf{y}$ しかない場合はどうする?
- 非常によくある設定 (教師なし学習)
  - y＝あるユーザーのクリック履歴
  - y＝ロボットの姿勢ベクトル (各関節角のベクトル)
  - y＝ある星の吸収線スペクトル
  - ここでは、yが連続値の場合を考える

確率的主成分分析



- Probabilistic PCA (Tipping & Bishop 1999)

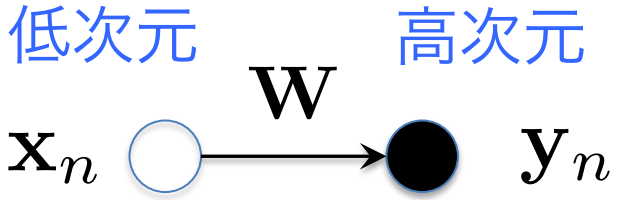
$$\begin{cases} \mathbf{y}_n = \mathbf{W}\mathbf{x}_n + \boldsymbol{\epsilon} \\ \boldsymbol{\epsilon} \ \sim \mathrm{N}(\mathbf{0}, \sigma^2\mathbf{I}) \end{cases}$$

- よって、$L = \sum_{n=1}^{N} \log p(\mathbf{y}_n) = \sum_{n=1}^{N} \log \mathcal{N}(\mathbf{y}_n | \mathbf{W}\mathbf{x}_n, \sigma^2\mathbf{I})$

$$= -\frac{N}{2}\left(\log 2\pi + \log|C| + \mathrm{tr}(C^{-1}S)\right)$$

$$(C = \mathbf{W}\mathbf{W}^T + \sigma^2\mathbf{I},\ S = \mathbf{Y}\mathbf{Y}^T/N)$$

確率的主成分分析 (2)



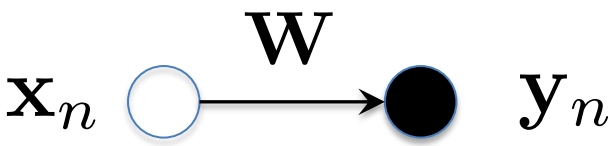
- $\partial L/\partial \mathbf{W} = 0$ より、データの尤度Lを最大にするWの最尤推定値は

$$\mathbf{W} = \mathbf{U}_q(\mathbf{\Lambda}_q - \sigma^2\mathbf{I})^{1/2}$$

  - $\mathbf{\Lambda}_q, \mathbf{U}_q$： $\mathbf{YY}^T$ の最大q個の固有値・固有ベクトルを並べた行列
  - $\sigma^2 = 0$ で通常の主成分分析と一致

確率的PCAからGPLVMへ

- 確率的PCA：x→yへの射影行列Wを最適化



- Wは巨大、xの次元に依存する
  → Wの方に事前分布を与えて積分消去

$$p(\mathbf{W}) = \prod_{d=1}^{D} \mathrm{N}(\mathbf{w}_d|\mathbf{0}, \alpha^{-1}\mathbf{I})$$

$$p(\mathbf{Y}|\mathbf{X}) = \int p(\mathbf{Y}|\mathbf{X}, \mathbf{W})p(\mathbf{W})d\mathbf{W}$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^{DN/2}|\mathbf{K}|^{D/2}} \exp\left(-\frac{1}{2}\mathrm{tr}(\mathbf{K}^{-1}\mathbf{Y}\mathbf{Y}^T)\right)$$

GPLVM

- よって、

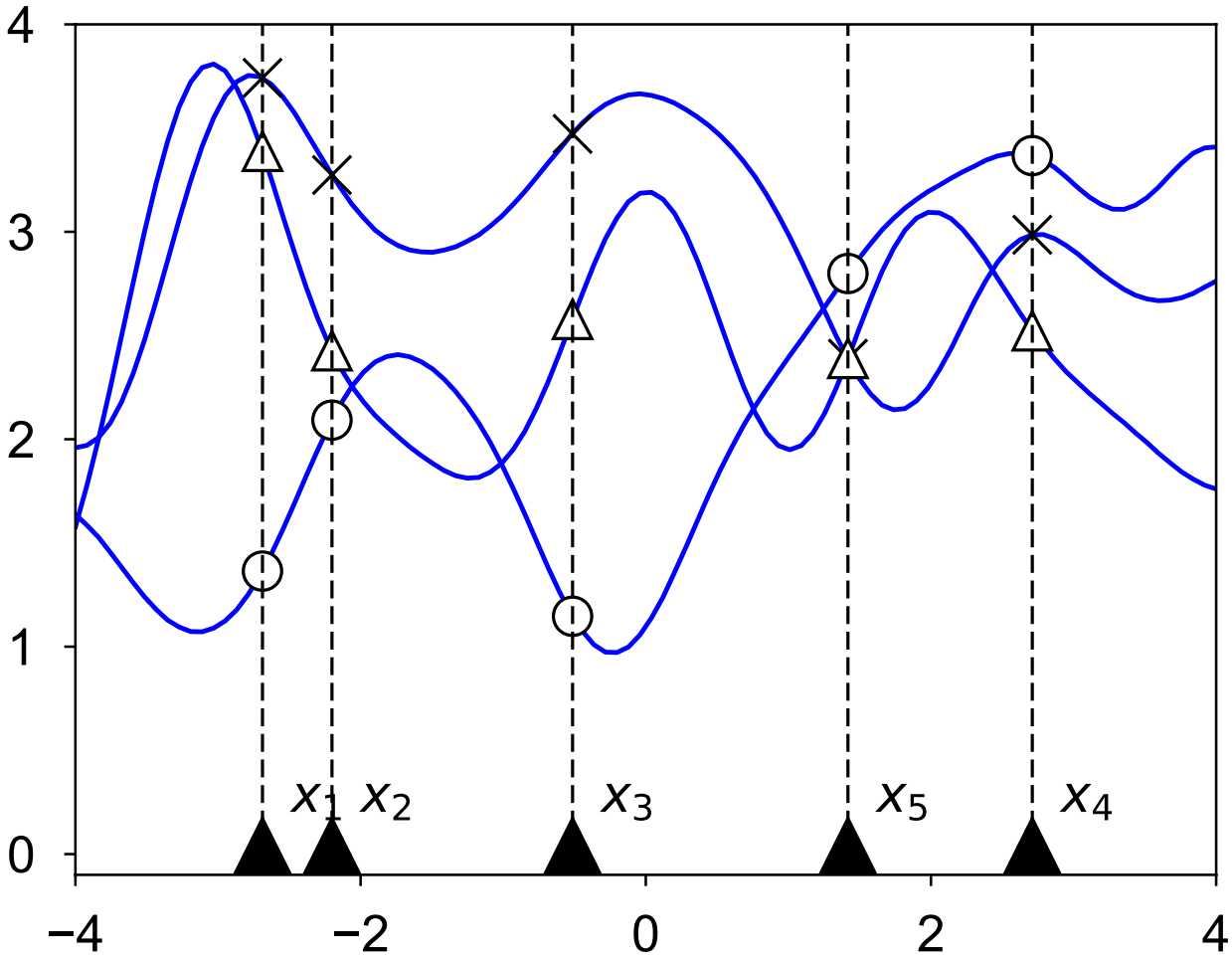
$$\log p(\mathbf{Y}|\mathbf{X}) = -\frac{DN}{2}\log(2\pi) - \frac{D}{2}\log|\mathbf{K}_\mathbf{X}| - \frac{1}{2}\mathrm{tr}(\mathbf{K}_\mathbf{X}^{-1}\mathbf{Y}\mathbf{Y}^T)$$

$$\mathbf{K}_\mathbf{X} = \alpha\mathbf{X}\mathbf{X}^T + \beta^{-1}\mathbf{I}$$

$$\mathbf{X} = (\mathbf{x}_1, \cdots, \mathbf{x}_N)$$

- これを最大化する潜在的なXを見つければよい
- Gaussian Process Latent Variable Model (GPLVM)という (Lawrence+, NIPS 2003)

GPLVMのイメージ



- xが1次元の場合: 各観測値 (×,△,○)の背後にxが存在

GPLVMの最適化

$$\log p(\mathbf{Y}|\mathbf{X}) = -\frac{DN}{2}\log(2\pi) - \frac{D}{2}\log|\mathbf{K}_\mathbf{X}| - \frac{1}{2}\mathrm{tr}(\mathbf{K}_\mathbf{X}^{-1}\mathbf{Y}\mathbf{Y}^T)$$

$$\mathbf{K}_\mathbf{X} = \alpha\mathbf{X}\mathbf{X}^T + \beta^{-1}\mathbf{I}$$

$$\mathbf{X} = (\mathbf{x}_1, \cdots, \mathbf{x}_N)$$

- 自然にカーネル化されている→任意のカーネルを導入

$$k(\mathbf{x}_n, \mathbf{x}_m) = \alpha\exp\left(-\gamma|\mathbf{x}_n - \mathbf{x}_m|^2\right) + \delta(n,m)\beta^{-1}$$

(RBF)

- $\dfrac{\partial L}{\partial \mathbf{K}_\mathbf{X}} = \mathbf{K}_\mathbf{X}^{-1}\mathbf{Y}\mathbf{Y}^T\mathbf{K}_\mathbf{X}^{-1} - D\,\mathbf{K}_\mathbf{X}^{-1}$
  - $\dfrac{\partial L}{\partial x_{nj}} = \dfrac{\partial L}{\partial \mathbf{K}_\mathbf{x}}\dfrac{\partial \mathbf{K}_\mathbf{X}}{\partial x_{nj}}$ を適用して微分

GPLVMの最適化 (2)

- Python実装：『ガウス過程と機械学習』サポートページ
  - http://chasen.org/~daiti-m/gpbook/
- Neil Lawrence によるMATLAB原実装
  - http://inverseprobability.com/gplvm/

GPLVM：計算例

- Oil flowデータ (PRML掲載と同じもの)

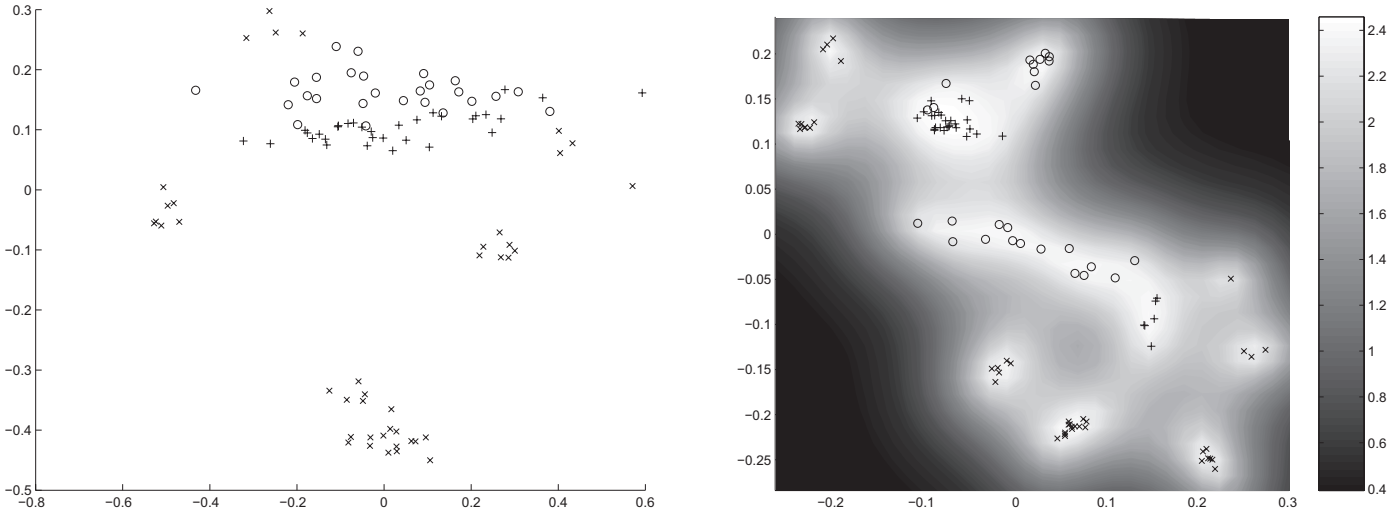


Figure 1: Visualisation of the Oil data with (a) PCA (a linear GPLVM) and (b) A GPLVM which uses an RBF kernel. Crosses, circles and plus signs represent stratifi ed, annular and homogeneous fbws respectively. The greyscales in plot (b) indicate the precision with which the manifold was expressed in data-space for that latent point. The optimised parameters of the kernel were $\gamma = 150$, $\alpha = 0.403$ and $\beta = 316$.

- 左: 確率的PCA、右: GPLVM
- GPLVMは分散を使ってconfidenceの分布も得られる

(Hertzmann 2004, SIGGRAPH)

Style-based Inverse Kinematics

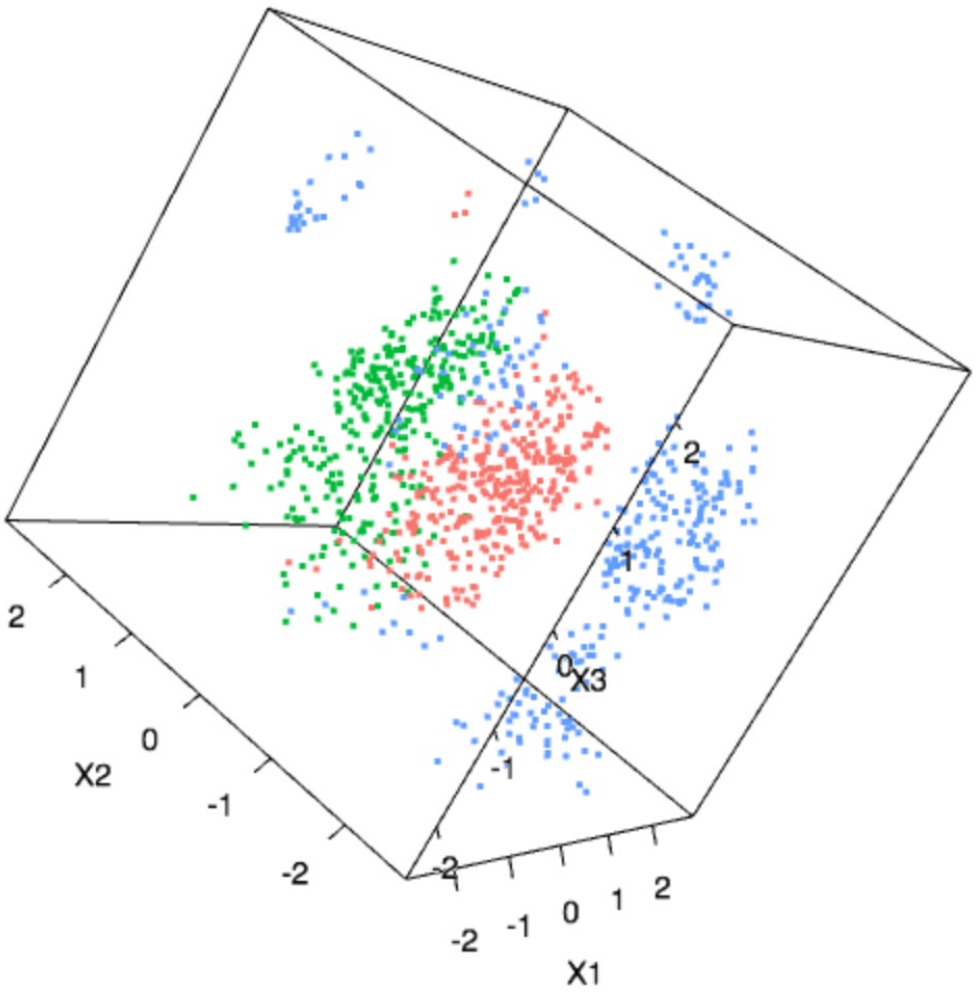
- 低次元(たとえば2次元)の潜在空間から、
  人間の関節角ベクトルへの写像をGPLVMで学習
  - 観測ベクトルを並べた行列*Y*から、潜在座標*X*を
    下の式で最適化

$$L_{GP} = \frac{D}{2}\ln|\mathbf{K}| + \frac{1}{2}\sum_k w_k^2 \mathbf{Y}_k^T \mathbf{K}^{-1}\mathbf{Y}_k + \frac{1}{2}\sum_i ||\mathbf{x}_i||^2 + \ln\frac{\alpha\beta\gamma}{\prod_k w_k^N}$$

- プロジェクトWebページ：
  https://grail.cs.washington.edu/projects/styleik/

GPLVM: 3次元の場合

- 松浦さん “Statmodeling memorandum” http://statmodeling.hatenablog.com/entry/gaussian-process-latent-variable-model-2 による
- Stan言語による推定



ガウス過程の様々な分野への応用

ガウス過程とロボティクス

Reinforcement Learning Boat Autopilot: A Sample-efficient and Model Predictive Control based Approach

Yunduan Cui[1], Shigeki Osaki[2], and Takamitsu Matsubara[1]

(IROS 2019)

システム/制御/情報, Vol. 60, No. 12, pp. 515–520, 2016

「不確実性に挑むロボティクス」特集号

解　説

ガウス過程に基づくロボットの運動制御・学習
—解析的モーメントマッチングによる近似推論

松原　崇充*

(「システム/制御/情報」2016)

ガウス過程とロボティクス (1)

- ガウス過程状態空間モデル

$$\mathbf{x}_{t+1} = f(\mathbf{x}_t, \mathbf{u}_t) + \mathbf{w}, \quad \mathbf{w} \sim \mathcal{N}(\mathbf{0}, \mathbf{\Sigma}_w)$$

  - $\mathbf{x}_t$: 状態ベクトル
  - $\mathbf{u}_t$: 制御入力
  - $\mathbf{w}$: システムノイズ

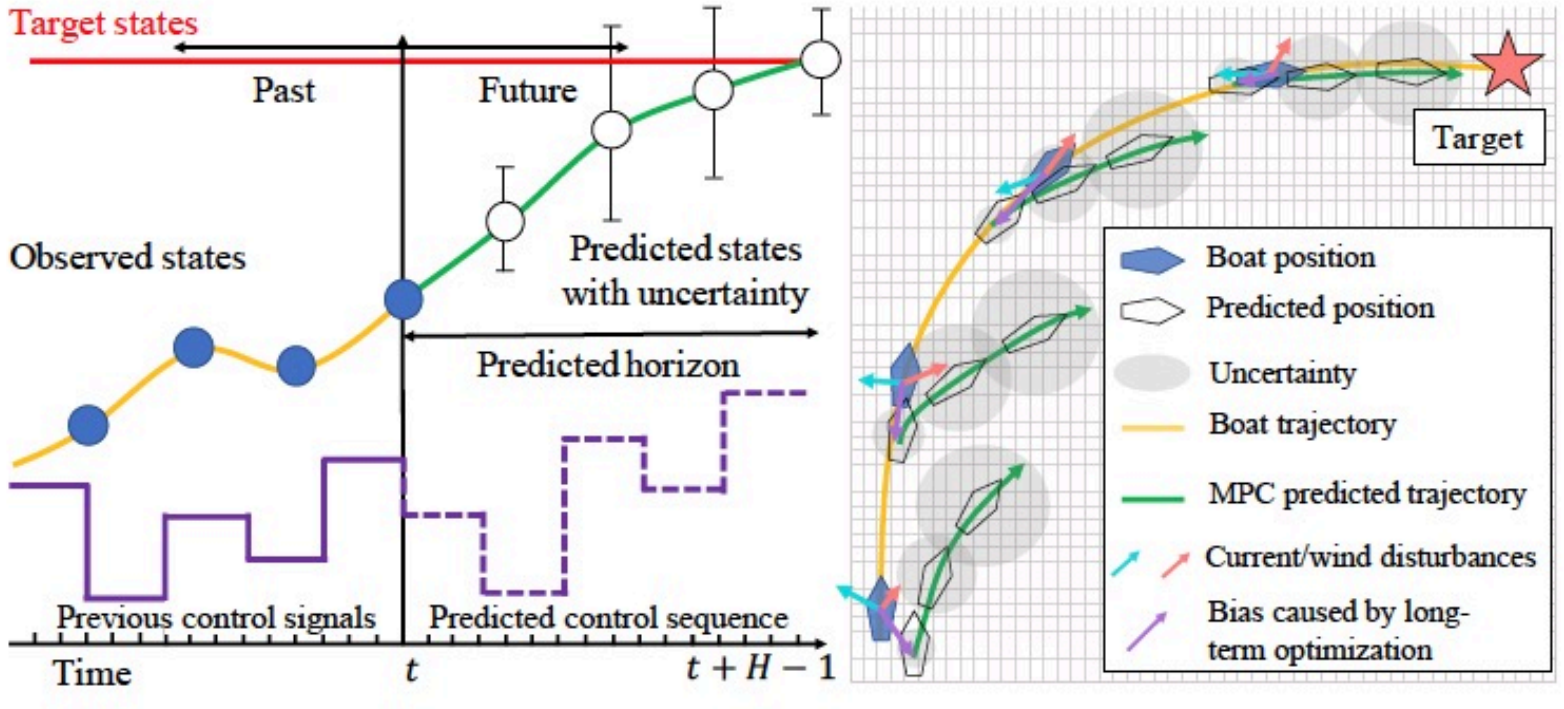
- 状態が、各次元ごとにガウス過程に従って時間発展すると考えている

  → $(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \cdots, \mathbf{x}_T)$ のp次元目だけを取ったベクトル

$$(x_{1p}, x_{2p}, \cdots, x_{Tp})$$

  がガウス過程に従う

ガウス過程とロボティクス (2)



- ロボティクスにおいては、将来の状態の分散が重要
  (最適な経路を一つだけ出しても意味がない！)
- 強化学習とガウス過程を組み合わせた船舶の制御

ガウス過程行列分解

Non-linear Matrix Factorization with Gaussian Processes

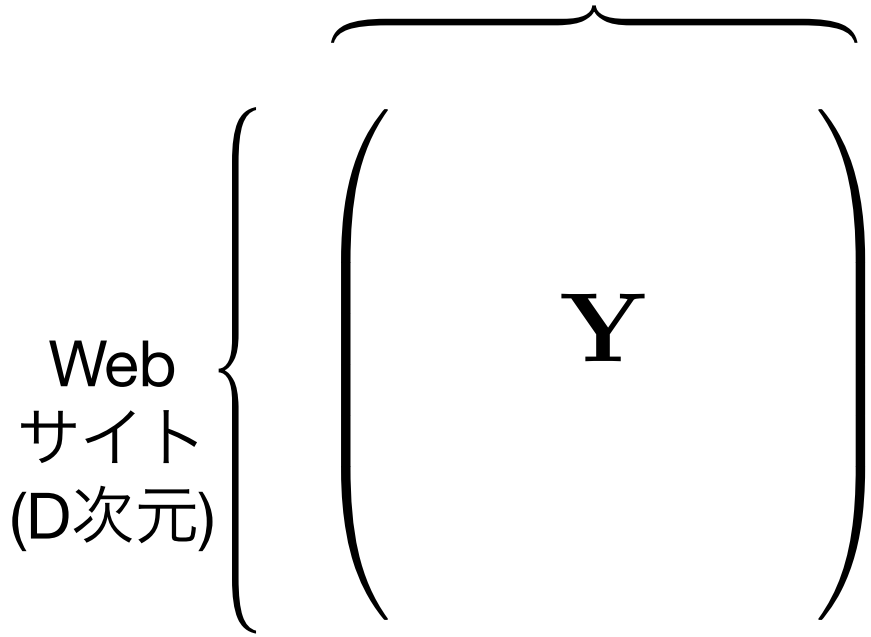
Neil D. Lawrence NEILL@CS.MAN.AC.UK
School of Computer Science, University of Manchester, Kilburn Building, Oxford Road, M13 9PL, U.K.

Raquel Urtasun RURTASUN@ICSI.BERKELEY.EDU
ICSI and EECS, UC Berkeley, CA 94704

(ICML 2009)

ガウス過程行列分解

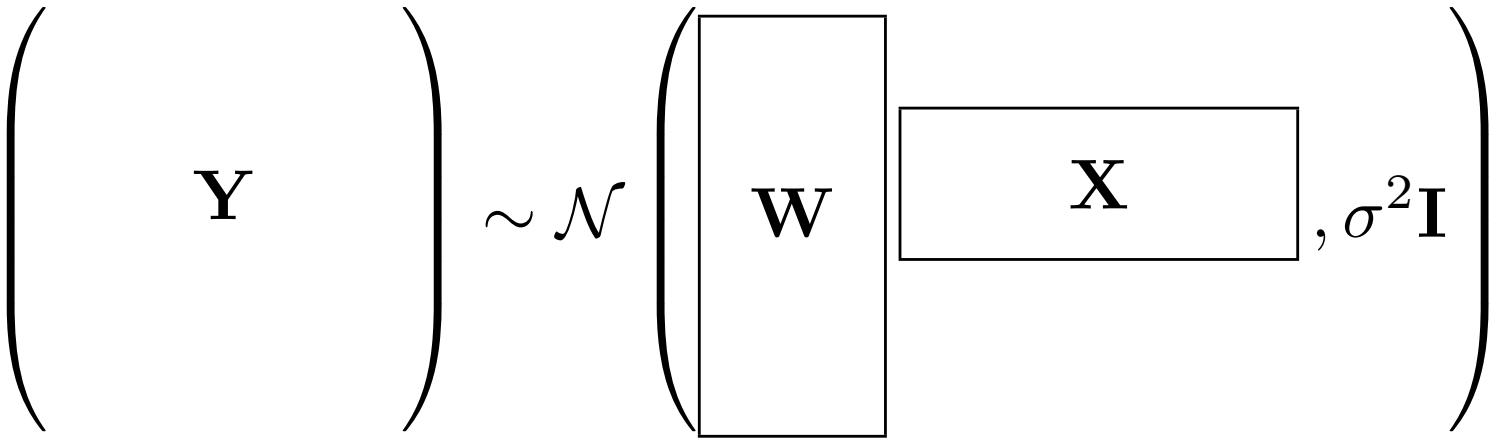
- 協調フィルタリングなどで、観測されたデータ(例えばユーザがサイトを見た回数)は行列Yとして表現できる
- 例：



y_{dn}：ユーザーnが
サイトdを見た
回数 (例えば)

ガウス過程行列分解 (2)

- Yは多くの場合高次元かつ非常にスパースなので、低次元の基底Wと負荷量Xの積として表現



- ここでWにガウス事前分布を与えて積分消去すると、上式はガウス過程として表現できる

$$\mathbf{Y} \sim \mathcal{N}(\mathbf{K}_{\mathbf{X}}, \sigma^2\mathbf{I}) \qquad \mathbf{K}_{\mathbf{X}} \text{ はXの列間のカーネル行列}$$

  - 理論については、ガウス過程鹿本7章を参照のこと

ガウス過程行列分解 (3)

$$\mathbf{Y} \sim \mathcal{N}(\mathbf{K}_{\mathbf{X}}, \sigma^2 \mathbf{I})$$

- 別の書き方をすると、以下の表現とも等価

$$p(\mathbf{Y}|\mathbf{X}) = \prod_{d=1}^{D} \prod_{n=1}^{N} \mathcal{N}(y_{dn}|f_d(\mathbf{x}_n), \sigma^2 \mathbf{I})$$

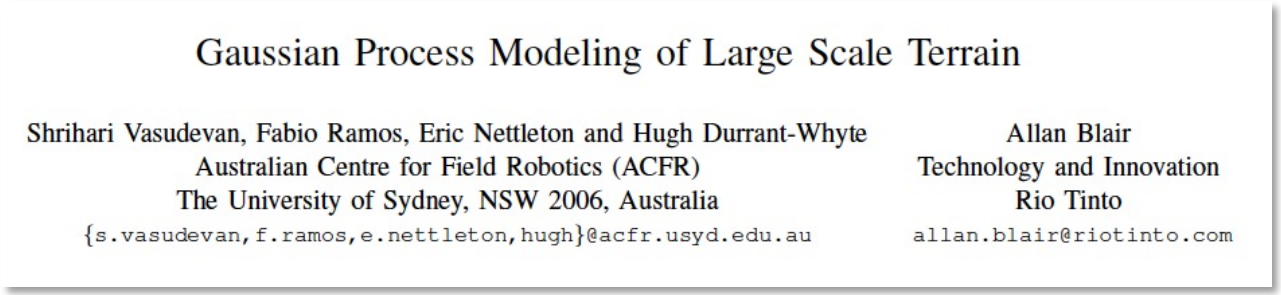
$$f \sim \mathrm{GP}(\mathbf{X})$$

  - 各ユーザーを表す潜在変数x_n間のカーネル行列を使ったガウス過程fから、観測値yが生成
  - x_nは未知なので、$p(Y|X)$を最大化するように最適化
  - ガウス過程行列分解は、非常に精度が高いことが知られている

GPLVMの一種

空間統計学

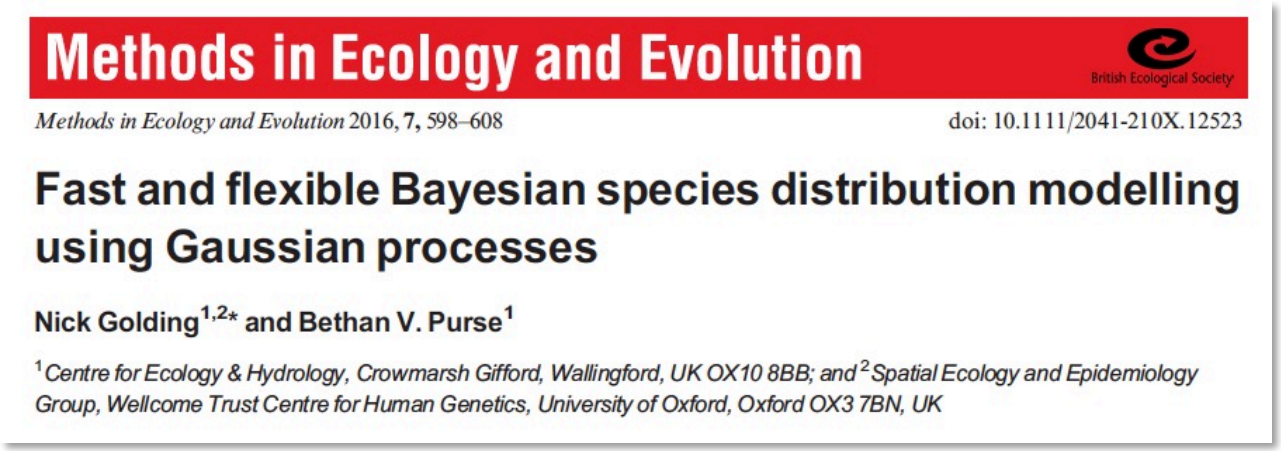
- 空間統計学においては、ガウス過程はクリギングとして知られる基本的な手法
- 狭義の空間統計以外にも、応用が広がっている



Gaussian Process Modeling of Large Scale Terrain

Shrihari Vasudevan, Fabio Ramos, Eric Nettleton and Hugh Durrant-Whyte
Australian Centre for Field Robotics (ACFR)
The University of Sydney, NSW 2006, Australia
{s.vasudevan,f.ramos,e.nettleton,hugh}@acfr.usyd.edu.au

Allan Blair
Technology and Innovation
Rio Tinto
allan.blair@riotinto.com



Methods in Ecology and Evolution

British Ecological Society

Methods in Ecology and Evolution 2016, **7**, 598–608

doi: 10.1111/2041-210X.12523

Fast and flexible Bayesian species distribution modelling using Gaussian processes

Nick Golding[1,2]* and Bethan V. Purse[1]

[1]*Centre for Ecology & Hydrology, Crowmarsh Gifford, Wallingford, UK OX10 8BB; and* [2]*Spatial Ecology and Epidemiology Group, Wellcome Trust Centre for Human Genetics, University of Oxford, Oxford OX3 7BN, UK*

空間統計学 (2)

- ダイヤモンド鉱山での疎らな地形観測データからの復元

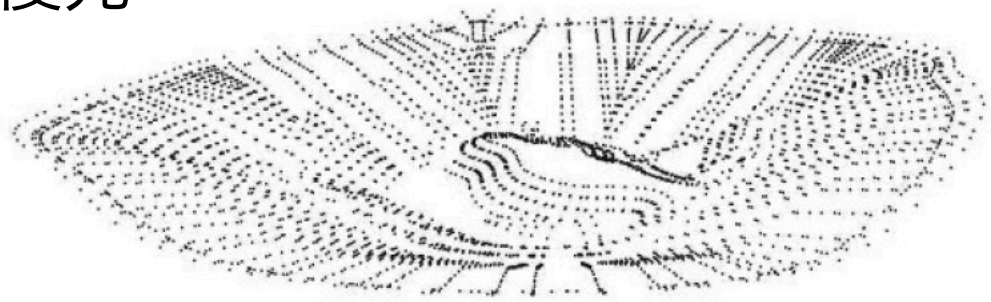
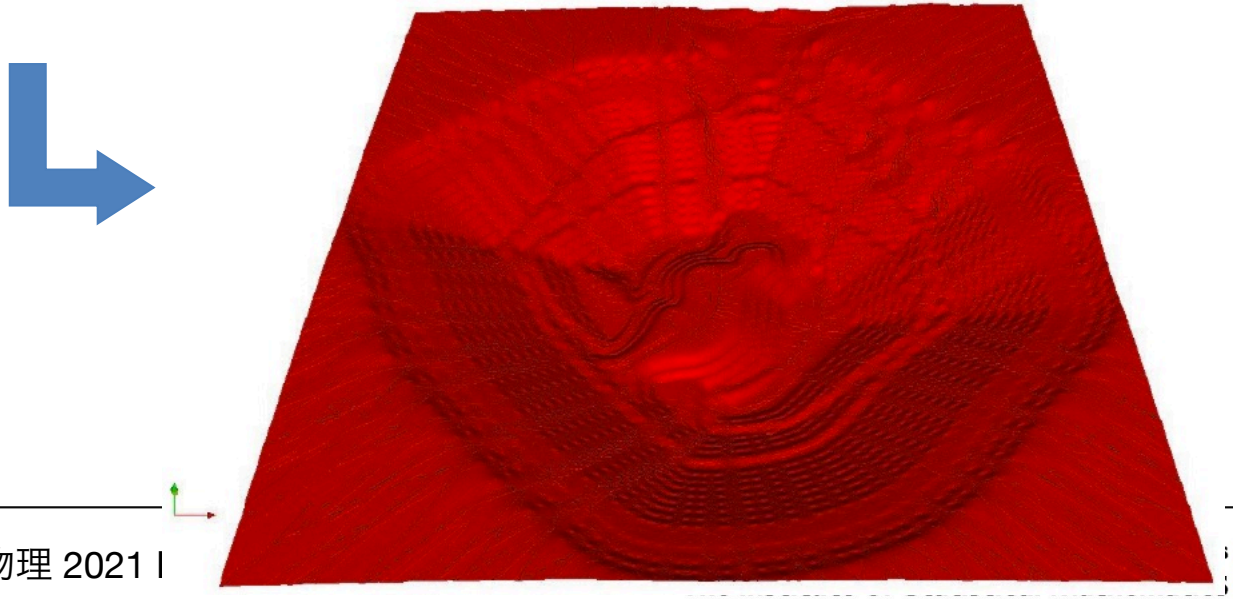


Fig. 4. GPS based survey data set from the Kimberlite (diamond) mine. The data set comprised of over 4600 points spanning about 2.2 x 2.3 sqkm. The data set is very sparse with the average spread being about 31m in x and y directions.

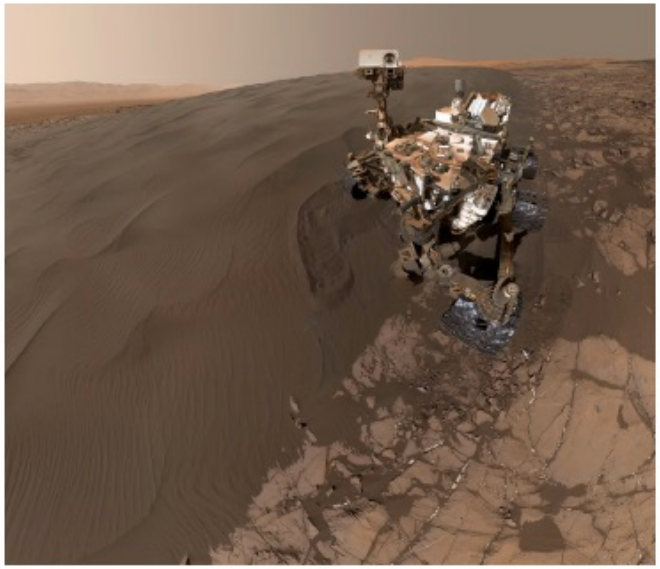


空間統計学 (3)

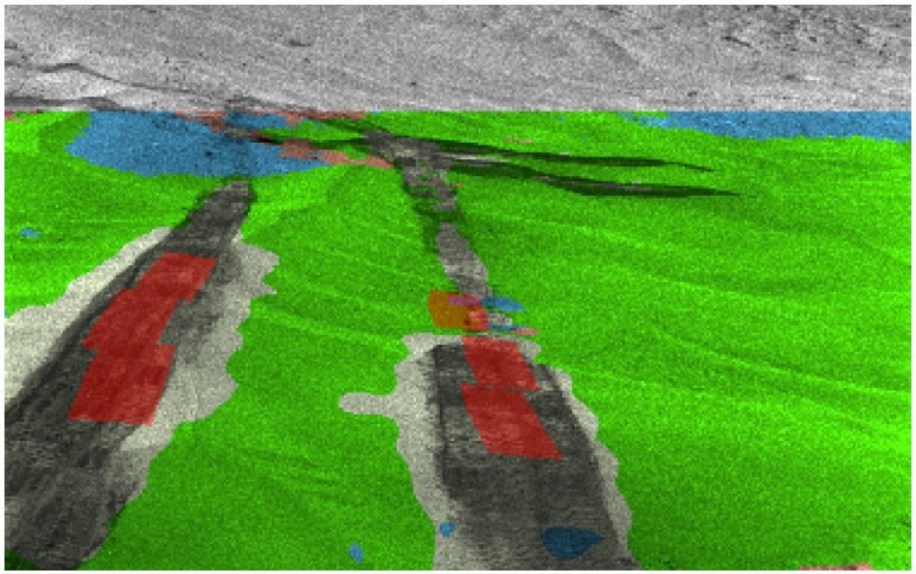
Locally-Adaptive Slip Prediction for Planetary Rovers Using Gaussian Processes

Chris Cunningham[1], Masahiro Ono[2], Issa Nesnas[2], Jeng Yen[2],and William L. Whittaker[1]

- 火星ランドローバーでの、地形ラベルの空間的推定



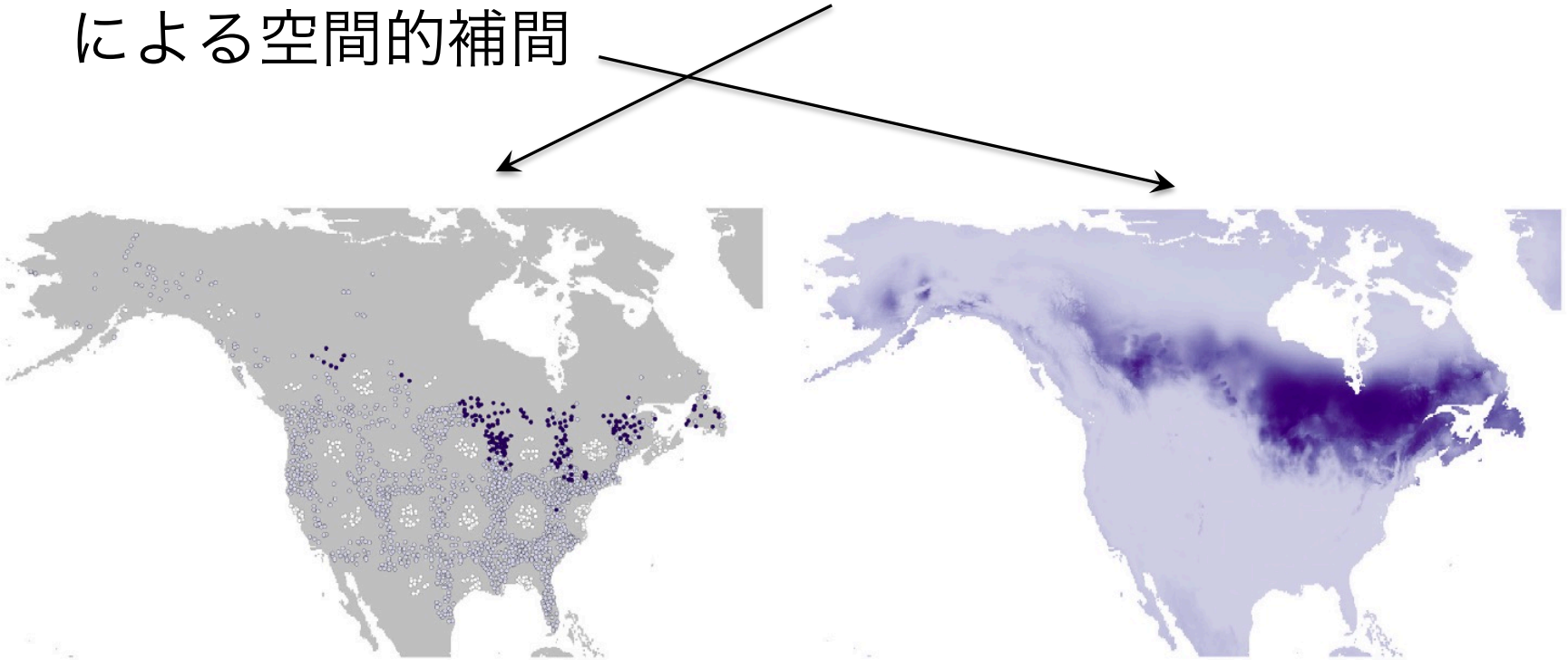
“Curiosity”と火星の地形



ガウス過程回帰で予測された地形ラベル (空間を考慮)

空間統計学 (4)

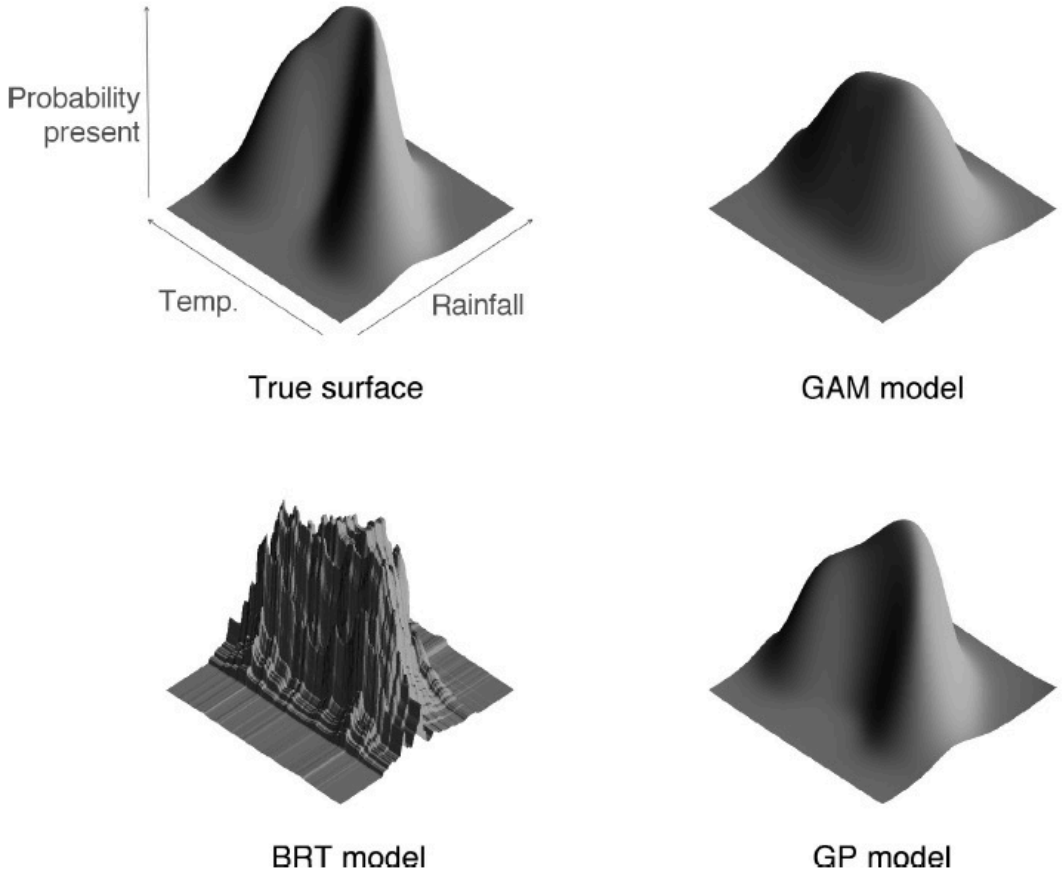
- 生態学での生物種の観測データと、ガウス過程回帰による空間的補間



  - Geothlypis philadelpha (ウグイスの一種)の分布

空間統計学 (5)

- BRT (Boosted Regression Tree)、GAM (Generalized Additive Model)との密度推定結果の比較
- 論文からの図

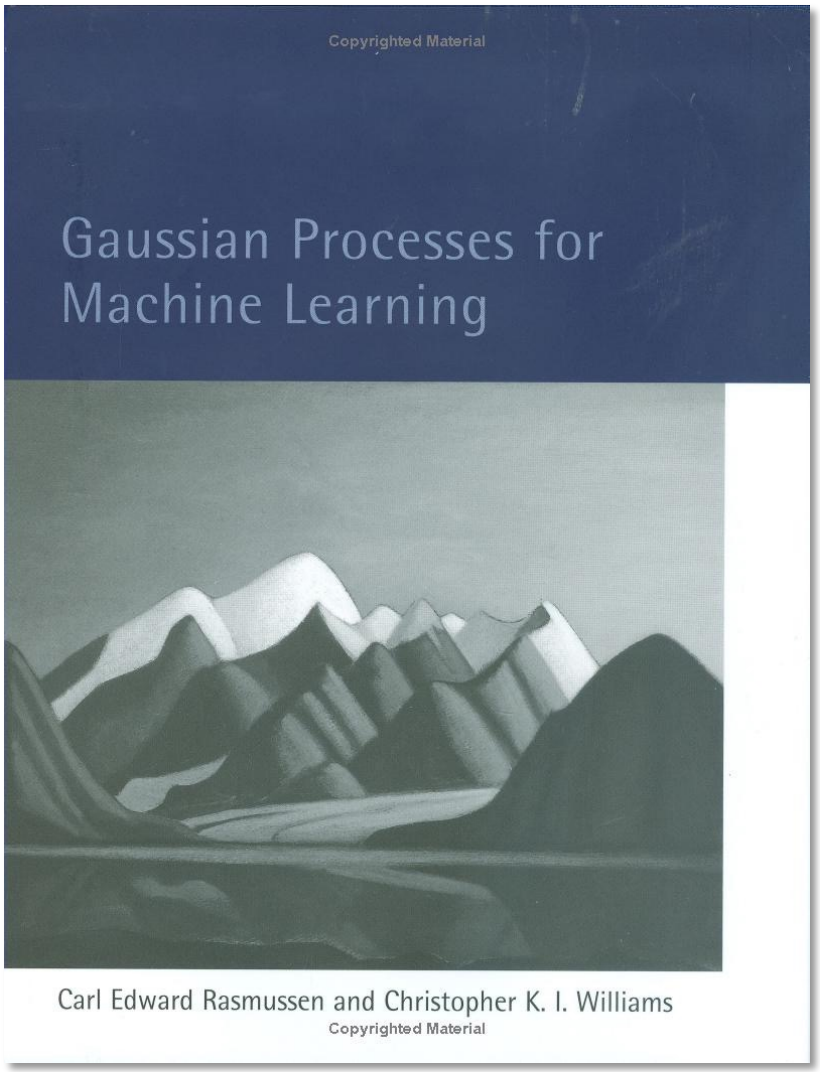


まとめ

- ガウス過程：連続的に変化する関数を生成する確率過程
  - ガウス過程回帰＝カーネル法に基づくベイズ的な非線形回帰モデル
  - 空間データやロボティクスなど、自然言語処理でもこれから連続値を扱う必要
  - 教師なし学習も含め、さまざまな応用
- 深層学習はノード数→∞でガウス過程に一致
- 計算量はナイーブには $O(N^3)$ だが、様々な計算量削減法があり、実質 $O(N^2)$
- 詳しくは、『ガウス過程と機械学習』を参照のこと

終わり


ガウス過程と
機械学習
Gaussian Process and
Machine Learning
持橋大地
大羽成征
Machine Learning Professional Series
MLP
機械学習
プロフェッショナル
シリーズ
講談社


Copyrighted Material
Gaussian Processes for
Machine Learning
Carl Edward Rasmussen and Christopher K. I. Williams
Copyrighted Material