

【実習】 ガウス過程

岡山大学 異分野基礎科学研究所

大槻純也

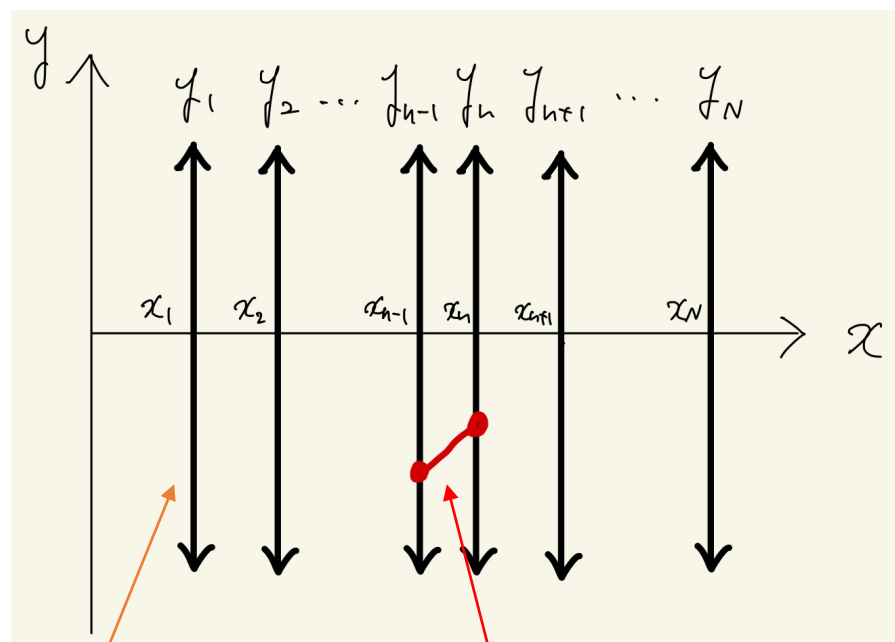


前回の復習 1

測定前

$\{y_1, \dots, y_N\}$ は決まっていない
ただし $\{x_1, \dots, x_N\}$ は与えられている

関数 $y(x)$ の事前確率
 $p(\mathbf{y}) = \mathcal{N}(\mathbf{y}|\mathbf{0}, K)$



分散

$$K_{nn} = k(x_n, x_n)$$

関数 $y(x)$ は揺らいでいる

相関している

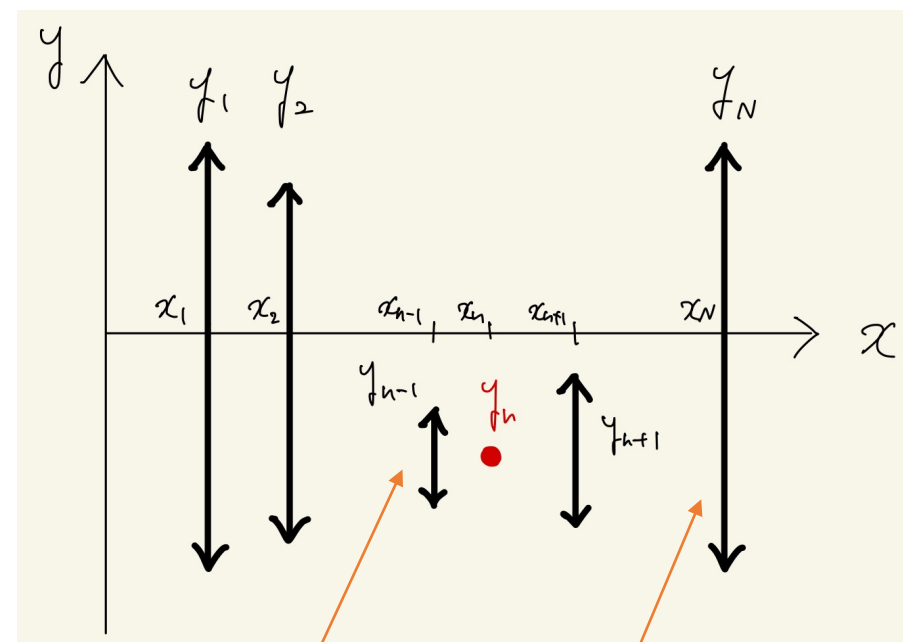
$$K_{nm} = k(x_n, x_m)$$

独立に揺らいでいるわけではない

測定後

y_n の値が決まった

関数 $y(x)$ の条件付き確率
 $p(\mathbf{y}|y_n)$



測定点の近くは
分散が小さくなる

測定点から遠い点は
分散が大きのまま

前回の復習 2

ガウス過程における予測分布 (Predictive distribution)

$$p(t_{N+1}|\mathbf{t}_N) = \mathcal{N}(t_{N+1}|m(\mathbf{x}_{N+1}), \sigma^2(\mathbf{x}_{N+1}))$$

$$m(\mathbf{x}_{N+1}) = \mathbf{k}^T C_N^{-1} \mathbf{t}_N$$

$$\sigma^2(\mathbf{x}_{N+1}) = c - \mathbf{k}^T C_N^{-1} \mathbf{k}$$

D 次元空間 $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_D)$

中の N 個の測定点 $\mathbf{X}_N = \{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N\}$

における測定値 $\mathbf{t}_N = (t_1, \dots, t_N)^T$

が得られているとする

Covariance matrix

$$C(\mathbf{x}_n, \mathbf{x}_m) = \underbrace{k(\mathbf{x}_n, \mathbf{x}_m)}_{\text{kernel function}} + \underbrace{\beta^{-1} \delta_{nm}}_{\text{noise}}$$

$$C_{N+1} = \left(\begin{array}{c|c} C_N & \mathbf{k} \\ \hline \mathbf{k}^T & c \end{array} \right) \quad \text{--- } \mathbf{x}_n \text{ と } \mathbf{x}_{N+1} \text{ の相関}$$

Gaussian kernel (ガウスカーネル)

$$k(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \theta_1 \exp \left(-\frac{\|\mathbf{x} - \mathbf{x}'\|^2}{2\theta_2} \right)$$

hyperparameter

実習課題

1. サンプルコードのモデルを自分の好みに合わせて変更する
 - サンプルコードはsin関数
 - データ点 $x_0, x_1, \dots$ は乱数で生成
2. データ点数を1からひとつずつ増やして予測分布の変化を追っていく。
(参考：PRML Fig.3.8)
3. パラメータの取り方により結果がどのように変化するか調べ、最適な値の決め方について考える
 - パラメータ $\theta_1, \theta_2, \beta$