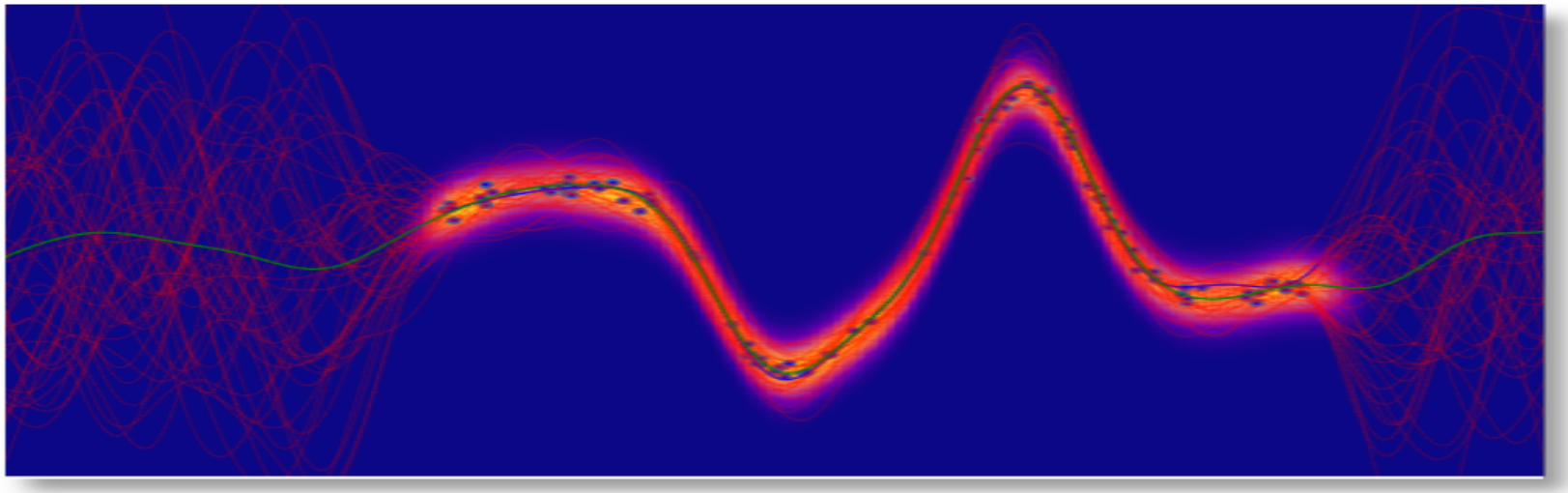
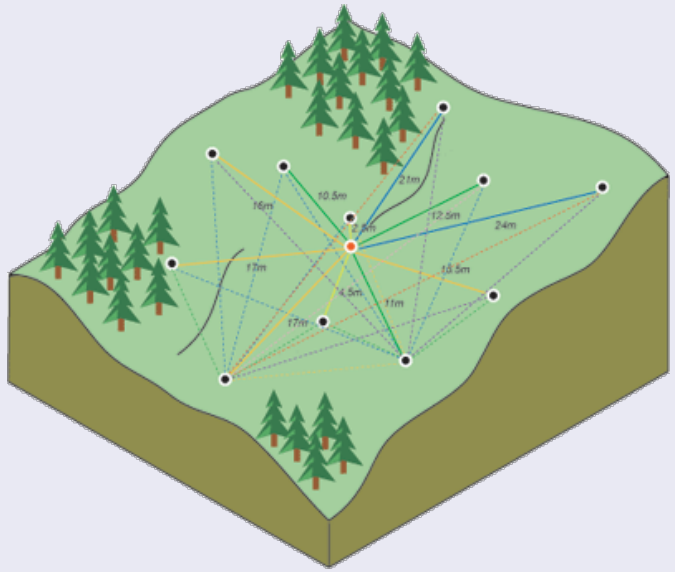
Gauß-Prozess-Regression

Bayessche Regression und Gaußprozesse

Dr. rer. nat. Johannes Riesterer



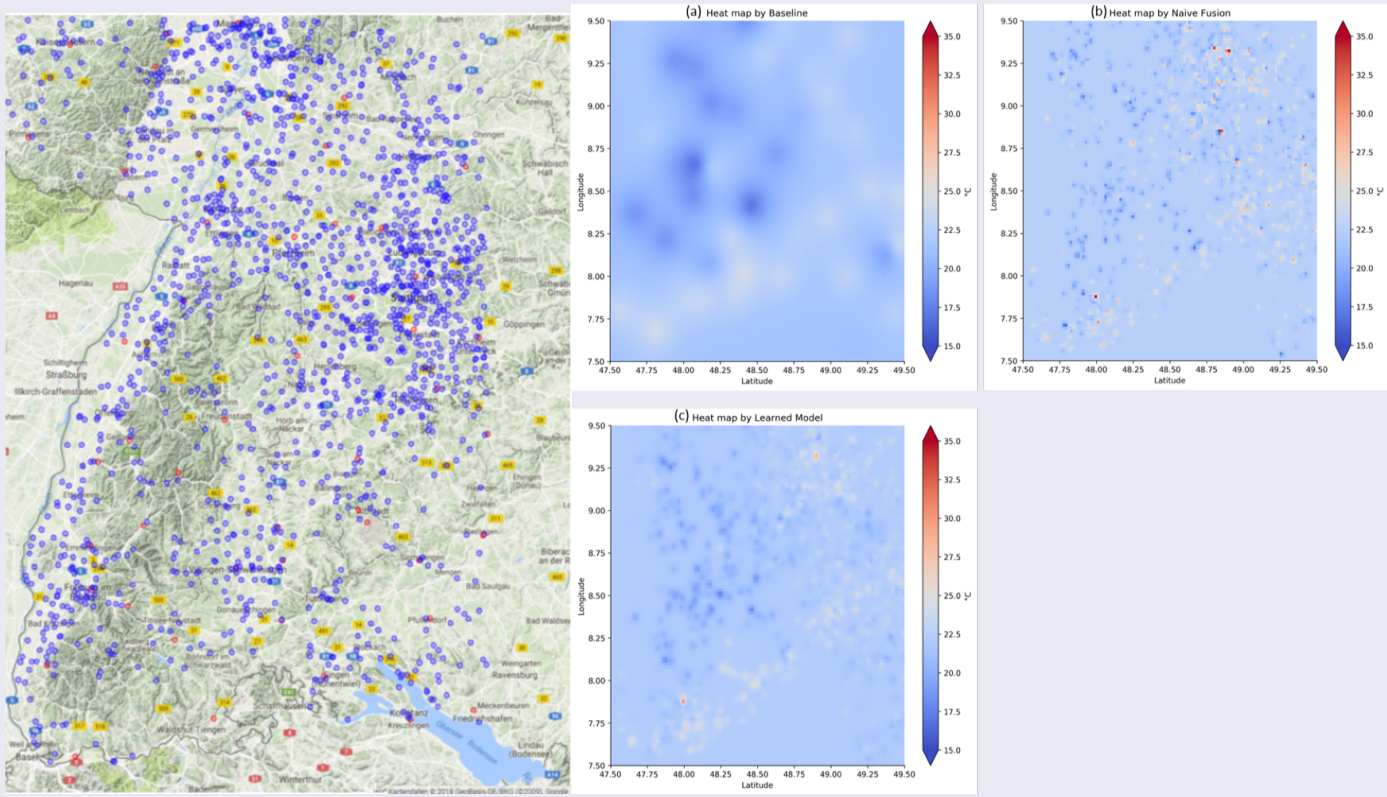
Motivation



Kriging

Der südafrikanische Bergbauingenieur Danie Krige versuchte 1951, eine optimale Interpolationsmethode für den Bergbau zu entwickeln, basierend auf der räumlichen Abhängigkeit von Messpunkten.

SmartAQNet Projekt



Lineare Regression

Daten

Gegeben Daten $S := \{(x_i, y_i)\}_i$ mit Features $x_i \in \mathbb{R}^n$ und Werten $y_i \in \mathbb{R}$.

Modell

$y_i = x_i^t \cdot \omega + \epsilon$ mit Gewichten $\omega \in \mathbb{R}^n$ und Offset $\epsilon \in \mathbb{R}$.

Training

$(\omega, \epsilon) = \min L_S(w, e)$ mit Verlustfunktion
$L_S(w, e) := \sum_i (y_i - (x_i^t \cdot w + e))^2$.

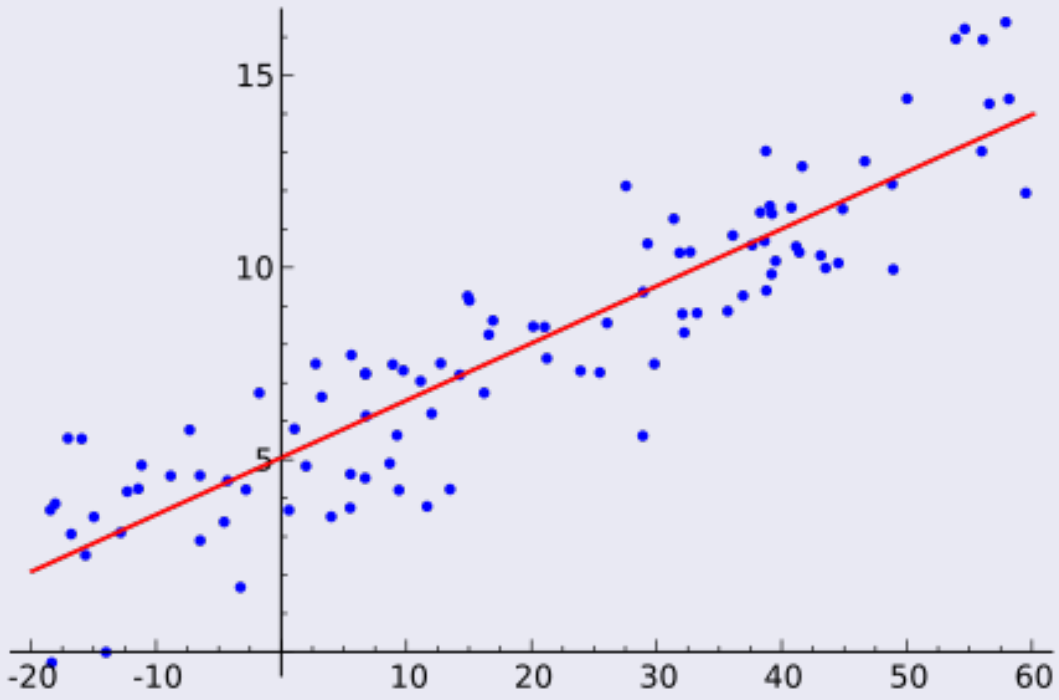
Bemerkung

Optimierungsproblem. Für $n = 1$ Gauss'sche Methode der kleinsten Fehlerquadrate.

Vorhersage

Für Feature $\tilde{x} \in \mathbb{R}^n$ definiere Vorhersage durch

$$\tilde{y} = \tilde{x}^t \cdot \omega + \epsilon$$



Lineare Bayessche Regression

Stichproben

Gegeben Stichproben $S := \{(x_i, y_i)\}_i$ der Zufallsvariablen $(x^{(i)}, y^{(i)})$ bzw. $X = (x^{(i)})_i$ und $Y = (y^{(i)})_i$.

Modell

$y^{(i)} = (x^{(i)})^t \cdot \omega + \epsilon$ mit Gewichten $\omega \sim \mathcal{N}(0, \Sigma)$, $\epsilon \sim \mathcal{N}(0, \sigma^2)$. Hierbei wird $x^{(i)} \equiv x_i$ als konstant angenommen und nicht als Zufallsvariable modelliert.

$$(y^i | x^i, \omega) \sim \mathcal{N}(\omega^t \cdot x^i, \sigma^2) \quad (1)$$

$$\Leftrightarrow \quad p(y_i | x_i, \omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp(-\frac{(y_i - \omega^t x_i)^2}{2\sigma})(\text{Dichte}) \quad (2)$$

$$y_i \underset{\Rightarrow}{\text{ u.i.v.}} \quad p(Y|X, \omega) = \prod_i \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp(-\frac{(y_i - \omega^t x_i)^2}{2\sigma}) \quad (3)$$

Posterior distribution

Satz von Bayes

$$\text{posterior} = \frac{\text{likelihood} \cdot \text{prior}}{\text{marginal likelihood}}$$

$$p(\omega|S) = \frac{p(S|\omega) \cdot p(\omega)}{p(S)}$$

mit der Marginalisierung
$p(S) = \int_{\omega'} p(S, \omega') d\omega' = \int_{\omega'} p(S|\omega') \cdot p(\omega') d\omega'$.

Posterior distribution

Einsetzten mit $p(S|\omega) = p(Y|X, \omega)$ da $x^{(i)} \equiv x_i$:

$$p(\omega|S) = \frac{(\prod_i p(y^i|x_i, \omega)) \cdot p(\omega)}{\int_{\omega'} (\prod_i p(y^i|x_i, \omega')) \cdot p(\omega') d\omega'} \tag{4}$$

Posterior distribution

Mit (3), $\omega \sim \mathcal{N}(0, \tau^2 \cdot I)$ und Rechenregeln für Normalverteilungen (längere Übungsaufgabe):

$$\omega | S \sim \mathcal{N}\left(\frac{1}{\sigma^2} A^{-1} X^t Y, A^{-1}\right)$$

mit $A = \frac{1}{\sigma^2} X^t X + \Sigma^{-1}$.

Posterior predictive distribution

Für Feature $\tilde{x}$ erhalten wir durch Marginalisierung:

$$p(\tilde{y}|\tilde{x}, S) = \int_{\omega} p(\tilde{y}, \omega|\tilde{x}, S) d\omega = \int_{\omega} \underbrace{p(\tilde{y}|\omega, \tilde{x}, S)}_{=p(\tilde{y}|\omega,\tilde{x})} \cdot p(\omega|S) d\omega$$

($\tilde{y}$ unabh. von S).

Posterior predictive distribution

Mit (2) und (4) und Rechenregeln für Normalverteilungen (wieder längere Übungsaufgabe):

$$\tilde{y}|\tilde{x}, S \sim \mathcal{N}\left(\frac{1}{\sigma^2}\tilde{x}^t A^{-1} X^t Y,\ \tilde{x}^t A^{-1} \tilde{x}\right)$$

mit $A = \frac{1}{\sigma^2} X^t X + \Sigma^{-1}$

Vorhersage

Für Feature $\tilde{x}$ wird die Vorhersage durch

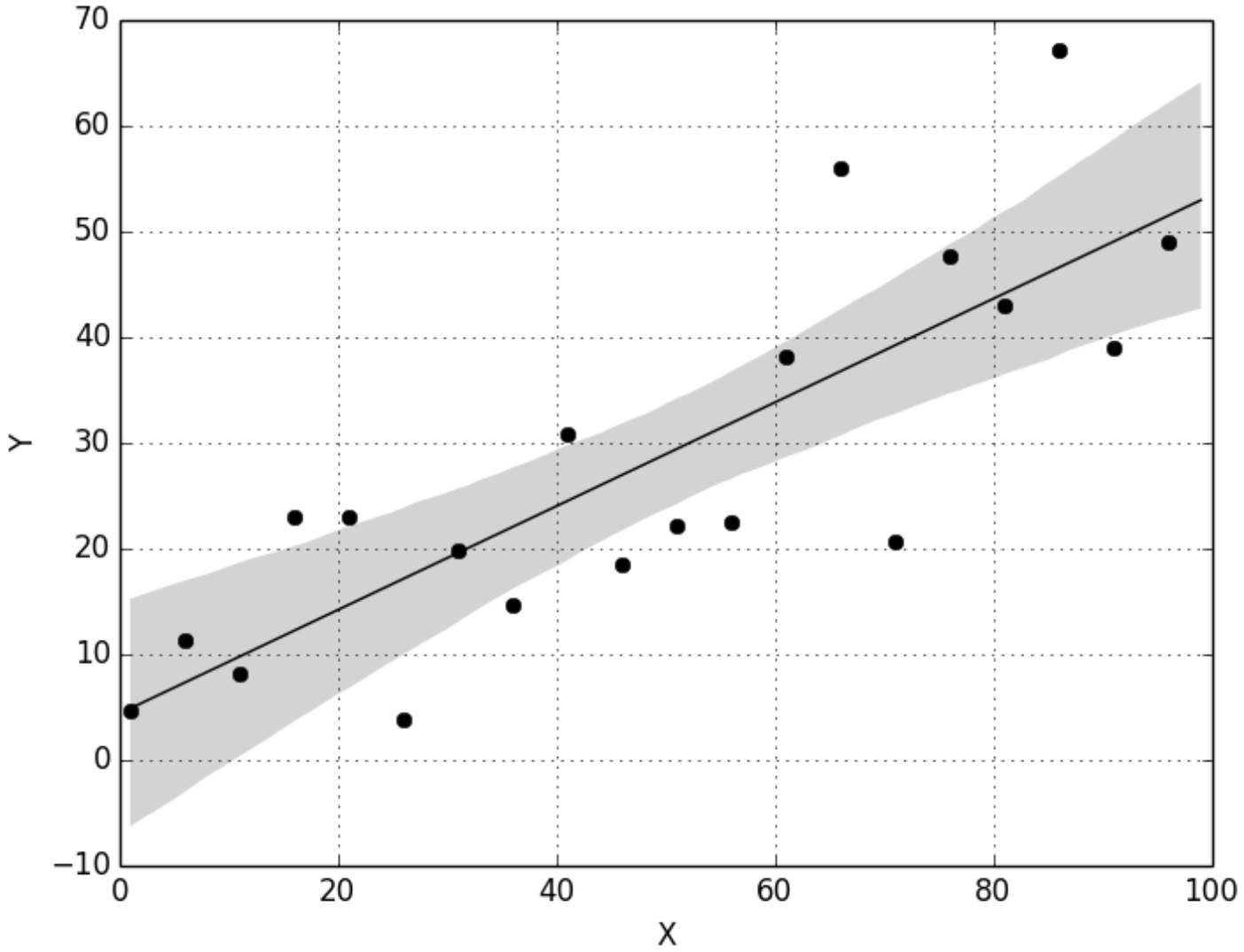
$$\tilde{y} := \mathbb{E}((\tilde{y}|\tilde{x}, S)) = \frac{1}{\sigma^2}\tilde{x}^t A^{-1} X^t Y$$

definiert. Die Varianz

$$\mathbb{V}((\tilde{y}|\tilde{x}, S)) = \tilde{x}^t A^{-1} \tilde{x}$$

dient als Mass der Güte der Vorhersage.

Lineare Bayessche Regression



Bayessche Regression

Stichproben

Stichproben $S := \{(x_i, y_i)\}_i$ der Zufallsvariablen $(x^{(i)}, y^{(i)})$.

Modell

$y^{(i)} = f(x^{(i)}) + \epsilon$.

Vorhersage

Im Allgemeinen sind die Integrale, welche in der posterior und posterior predictive distribution vorkommen, nicht geschlossen lösbar. In diesem Fall wird häufig Markov-Chain-Monte-Carlo Integration (MCMC) verwendet.

Kernel Trick

Der Spezialfall $f(x^{(i)}) = \phi(x^{(i)})^t \cdot \omega$ mit $\phi : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^N$ (Bsp: $\phi(x_1, x_2) = (x_1, x_1^2, x_2, x_2^2)$) ist geschlossen lösbar, da linear. Mit nahezu analoger Rechnung erhält man

$$\tilde{f}|\tilde{x}, S \sim \mathcal{N}\left(\frac{1}{\sigma^2}\phi(\tilde{x})^t A^{-1} X^t Y,\ \phi(\tilde{x})^t A^{-1} \phi(\tilde{x})\right)$$

mit $A = \frac{1}{\sigma^2}\phi(X)^t\phi(X) + \Sigma^{-1}$

Gauß-Prozess-Regression

Stochastischer Prozess

Ein stochastischer Prozess ist eine indizierte Menge von Zufallsvariablen $\{f_x | \ x \in \mathcal{X}\}$.

Gauß-Prozess

Wir bezeichnen einen stochastischen Prozess als Gauß-Prozess $f_x \sim \mathcal{GP}\left(m(x), k(x, x')\right)$, falls

$$\begin{pmatrix} f_{x_1} \\ \vdots \\ f_{x_n} \end{pmatrix} \sim \mathcal{N}\left(\begin{pmatrix} m(x_1) \\ \vdots \\ m(x_n) \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} k(x_1, x_1) & \dots & k(x_1, x_n) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ k(x_n, x_1) & \dots & k(x_n, x_n) \end{pmatrix} \right)$$

für jede endliche Teilmenge $X = (x_1, \cdots, x_n) \in \mathcal{X}$. Man nennt $k(x, x')$ Kovarianz-Funktion oder auch Kernel. Zulässig sind nur Funktionen, bei denen die Matrix positiv definit und symmetrisch ist für jede endliche Teilmenge X.

Beispiel

$f_x = \phi(x)^t \cdot \omega$ mit $\omega \sim \mathcal{N}(0, \Sigma)$ ist ein $\mathcal{GP}\left(m(x), k(x, x')\right)$ mit

$$\mathbb{E}(f_x) = \phi(x)^t \mathbb{E}(\omega) = \underbrace{0}_{=:m(x)}$$

$$\mathbb{E}(f_x f_{x'}) = \phi(x)^t \mathbb{E}(\omega\omega^t)\phi(x') = \underbrace{\phi(x)^t \Sigma\, \phi(x')}_{:=k(x,x')}$$

Prior distribution

Sei $f \sim \mathcal{GP}(0, k(x, x'))$ ein Gauß-Prozess. Angenommen man kennt $f = \begin{pmatrix} f_{x_1} & \dots & f_{x_n} \end{pmatrix}$ an den Punkten $X = (x_1, \dots, x_n)$ und möchte $\tilde{f} = \begin{pmatrix} f_{\tilde{x}_1} & \dots & f_{\tilde{x}_n} \end{pmatrix}$ and den Punkten $\tilde{X} = (\tilde{x}_1, \dots, \tilde{x}_n)$ vorhersagen. Aus der GP-Eigenschaft folgt

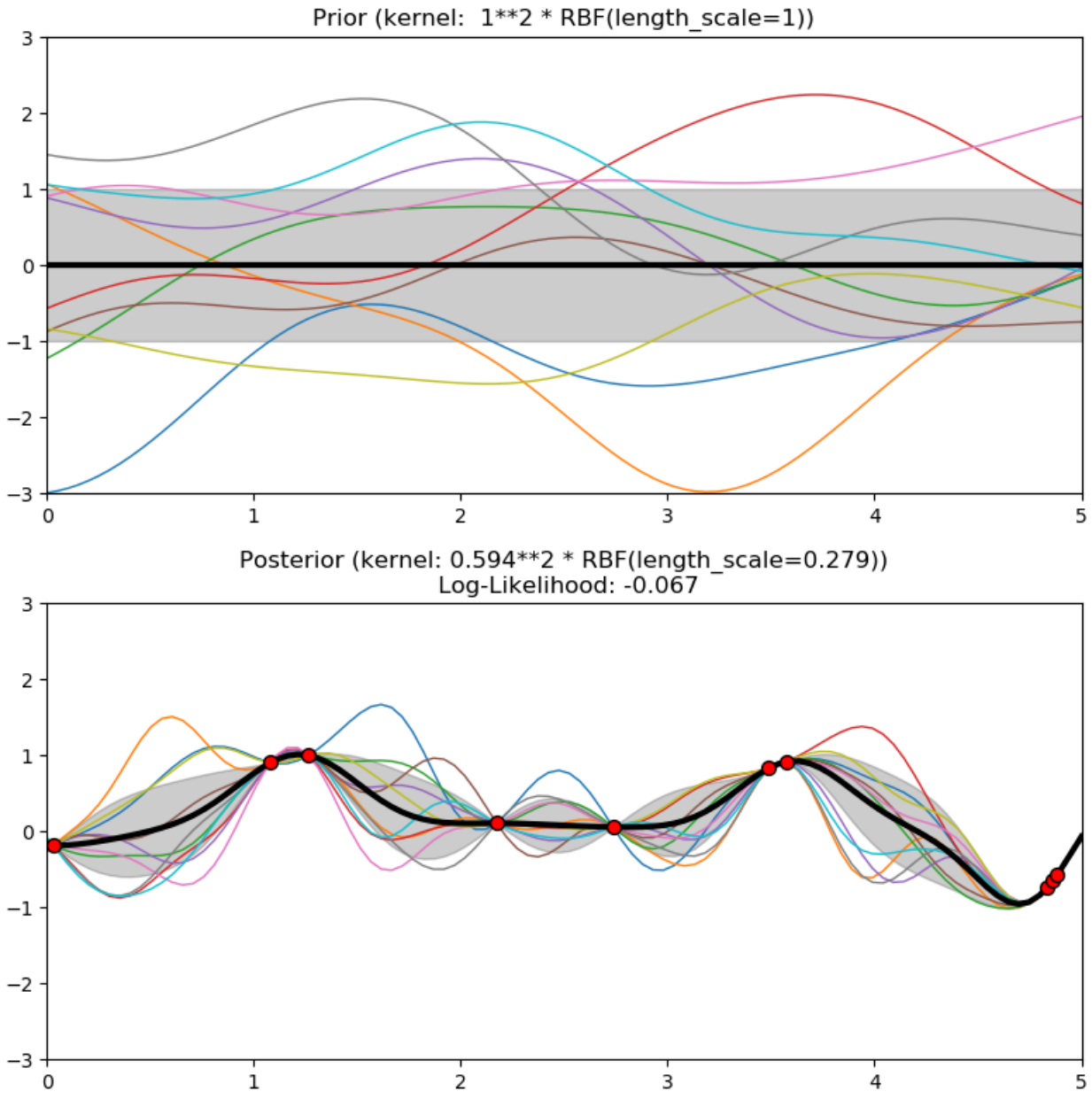
$$\begin{pmatrix} f_x \\ \tilde{f}_{\tilde{x}} \end{pmatrix} \sim \mathcal{N}\left(\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} K(X,X) & K(X,\tilde{X}) \\ K(\tilde{X},X) & K(\tilde{X},\tilde{X}) \end{pmatrix} \right)$$

Posterior predictive distribution

Mit den Rechenregeln für multivariate Normalverteilungen folgt:

$$\tilde{f}|\tilde{X}, X, f \sim \mathcal{N}\left(\mu_{\tilde{f}}, \Sigma_{\tilde{f}}\right)$$
$$\mu_{\tilde{f}} := K(\tilde{X}, X)K(X, X) \cdot f$$
$$\Sigma_{\tilde{f}} := K(\tilde{X}, \tilde{X}) - K(\tilde{X}, X)K(X, X)^{-1}K(X, \tilde{X})$$

Gauß-Prozess-Regression



Vorhersage

Für Prior $\tilde{f}$ wird die Vorhersage durch

$$R(\tilde{f}) := \mathbb{E}((\tilde{f}|\tilde{X}, X, f)) = K(\tilde{X}, X)K(X, X) \cdot f$$

definiert. Die Varianz

$$\mathbb{V}((\tilde{f}|\tilde{X}, X, f)) = K(\tilde{X}, \tilde{X}) - K(\tilde{X}, X)K(X, X)^{-1}K(X, \tilde{X})$$

dient als Mass der Güte der Vorhersage.

Kernel

Kernel	Funktion
konstant	σ_0^2
linear	$\sum_{d=1}^{D} \sigma_d^2 x_d x'_d$
polynomial	$(x \cdot x' + \sigma_0^2)^p$
squared exponential	$exp(-\frac{r^2}{2l^2})$
Matérn	$\frac{1}{2^{\nu-1}\Gamma(\nu)} \left(\frac{\sqrt{2\nu}}{l} r\right)^{\nu} K_\nu \left(\frac{\sqrt{2\nu}}{l} r\right)$
expotenziell	$exp\left(-\frac{r}{l}\right)$
γ-expotenziell	$exp\left(-\left(\frac{r}{l}\right)^{\gamma}\right)$
rational quadratisch	$\left(1 + \frac{r^2}{2\alpha l^2}\right)^{-\alpha}$