

高斯过程回归方法及其应用

Gaussian processes regression and its application

XX

XXX

- 高斯过程
 - 单变量高斯分布
 - 多维高斯分布 (性质)
 - 高斯过程 (均值函数与协方差函数)
- 高斯过程回归模型
 - 统计模型优劣
 - 模型建立
 - 模型求解
- 高斯过程回归模型应用
 - 仿真
 - 大气 CO_2 浓度预测
- 参考

Definition 1 (高斯分布)

一个连续型随机变量 X 其概率密度函数 (probability density function, pdf) 若为

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left(-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}\right) \quad x \in \mathbb{R}. \quad (0.1)$$

其中 $\mu \in \mathbb{R}$, $\sigma^2 \geq 0$, 则称 X 服从均值为 μ 方差为 σ^2 的高斯分布 (Gaussian distribution) 或正态分布 (normal distribution). 记作

$$X \sim \mathcal{N}(\mu, \sigma^2)$$

随机变量的概念很容易推广到多维随机变量 (multivariate random variables) 或称为随机向量 (random vectors).

$$Y = (Y_1, \dots, Y_d)^T$$

Y 每一个分量都是定义在**同一个概率空间**下的随机变量. 随机向量 Y 的一个样本 y 应有 $y \in \mathbb{R}^d$.

$$E(Y) = (E(Y_1), \dots, E(Y_d))^T. \quad (0.2)$$

$$\text{var}(Y) = E(YY^T) - E(Y)E(Y^T) = E[(Y - E(Y))(Y - E(Y))^T]. \quad (0.3)$$

$$\text{cov}(Y, Z) = E(YZ^T) - E(Y)E(Z^T). \quad (0.4)$$

Definition 2 (多维高斯分布)

若有随机向量 $Y = (Y_1, \dots, Y_d)^T$, 其分量的任意线性组合而成的**随机变量**都服从于高斯分布, 即

$$\forall \alpha \in \mathbb{R}^d, \alpha_1 Y_1 + \dots + \alpha_d Y_d = \alpha^T Y \sim \mathcal{N}. \quad (0.5)$$

此时称随机向量 Y 服从于 d 维高斯分布, Y 也被称为高斯随机向量.

d 维高斯分布的概率密度函数由下式给出.

$$f_Y(y) = \frac{1}{|2\pi\Sigma|^{1/2}} \exp\left(-\frac{1}{2}(y - \mu)^T \Sigma^{-1}(y - \mu)\right) \quad y \in \mathbb{R}^d. \quad (0.6)$$

可简记为,

$$Y \sim f(y) = \mathcal{N}(\mu, \Sigma) \quad (0.7)$$

$$f_Y(y) = \frac{1}{|2\pi\Sigma|^{1/2}} \exp\left(-\frac{1}{2}(y - \mu)^T \Sigma^{-1}(y - \mu)\right) \quad y \in \mathbb{R}^d.$$

$$Y \sim f(y) = \mathcal{N}(\mu, \Sigma)$$

其中 μ 是 d 维的均值向量 (mean vector), 其每个分量 $\mu_i = E(Y_i)$, 而 Σ 是一个 $d \times d$ 的矩阵, 其 i 行 j 列的分量 $\Sigma_{i,j} = \text{cov}(Y_i, Y_j)$, 矩阵 Σ 被称为协方差矩阵 (covariance matrix).

多维高斯分布的特性由均值向量 μ 与协方差矩阵 Σ 唯一确定. 可以证明但此处不证, 协方差矩阵总是对称半正定 (symmetric and positive semi-definite) 的, 即,

$$\Sigma_{i,j} = \Sigma_{j,i}. \quad (0.8)$$

$$\forall \alpha \in \mathbb{R}^d, \alpha^T \Sigma \alpha \geq 0. \quad (0.9)$$

性质 0.1

对于高斯向量来说, 各分量之间不相关等价于各分量之间独立.

$$\Sigma = \begin{pmatrix} \sigma_1^2 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \sigma_2^2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \sigma_d^2 \end{pmatrix} \quad (0.10)$$

$$\begin{aligned} f(y) &= \frac{1}{|2\pi\Sigma|^{1/2}} \exp\left(-\frac{1}{2}(y-\mu)^T\Sigma^{-1}(y-\mu)\right) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_1^2} \times \cdots \times \sqrt{2\pi\sigma_d^2}} \exp\left(-\sum_{i=1}^d \frac{(y_i - \mu_i)^2}{2\sigma_i^2}\right) \\ &= \prod_{i=1}^d f(y_i). \end{aligned} \quad (0.11)$$

$$Y \sim f(y) = \mathcal{N}(\mu, \Sigma)$$

为了研究高斯分布的条件分布, 我们把高斯随机向量划分为两部分,
 $Y = \begin{pmatrix} Y_1 \\ Y_2 \end{pmatrix}$, Y_1 与 Y_2 都可能为高斯随机向量或只是单变量 (univariate).
同时也对应将均值向量与协方差矩阵分块,

$$\mu = \begin{pmatrix} \mu_1 \\ \mu_2 \end{pmatrix} \tag{0.12}$$

$$\Sigma = \begin{pmatrix} \Sigma_{1,1} & \Sigma_{1,2} \\ \Sigma_{2,1} & \Sigma_{2,2} \end{pmatrix} \tag{0.13}$$

性质 0.2

已知 Y_2 的条件下 Y_1 的条件分布也是高斯分布. 若 Y_1 为随机向量, 则该条件分布是多维高斯分布, 且该多维高斯分布的均值向量与协方差函数由下式给出,

$$Y_1|Y_2 \sim \mathcal{N}(\mu_c, \Sigma_c).$$

$$\mu_c = \mu_1 + \Sigma_{1,2}\Sigma_{2,2}^{-1}(Y_2 - \mu_2). \quad (0.14)$$

$$\Sigma_c = \Sigma_{1,1} - \Sigma_{1,2}\Sigma_{2,2}^{-1}\Sigma_{2,1}. \quad (0.15)$$

$$\text{其中 } Y = \begin{pmatrix} Y_1 \\ Y_2 \end{pmatrix}, \mu = \begin{pmatrix} \mu_1 \\ \mu_2 \end{pmatrix}, \Sigma = \begin{pmatrix} \Sigma_{1,1} & \Sigma_{1,2} \\ \Sigma_{2,1} & \Sigma_{2,2} \end{pmatrix}.$$

分块矩阵求逆定理 (inversion of a partitioned matrix). 设矩阵 A 为分块矩阵, 其逆阵为 A^{-1} ,

$$A = \begin{pmatrix} P & Q \\ R & S \end{pmatrix}, \quad A^{-1} = \begin{pmatrix} \tilde{P} & \tilde{Q} \\ \tilde{R} & \tilde{S} \end{pmatrix}. \quad (0.16)$$

其中 P 与 \tilde{P} 为 $n_1 \times n_1$ 的方阵, S 与 \tilde{S} 为 $n_2 \times n_2$ 的方阵. 在已知 P, Q, R, S 的条件下, 可由下式计算得到 $\tilde{P}, \tilde{Q}, \tilde{R}, \tilde{S}$.

$$\begin{cases} \tilde{P} = N. \\ \tilde{Q} = -NQ S^{-1}. \\ \tilde{R} = -S^{-1}RN. \\ \tilde{S} = S^{-1} + S^{-1}RNQS^{-1}. \end{cases} \quad (0.17)$$

其中 $N = (P - QS^{-1}R)^{-1}$.

证明: 不失一般性, 我们假定 Y 是经过中心化的, 即 $\mu = 0$. 对于高斯分布我们通常只需关注指数部分, 从多维高斯分布的 pdf 出发, 我们得到,

$$\begin{aligned} f_Y(y) &\propto \exp\left(-\frac{1}{2}y^T\Sigma^{-1}y\right) \\ &\propto \exp\left(-(y_1^T \ y_2^T) \begin{pmatrix} \Sigma_{1,1} & \Sigma_{1,2} \\ \Sigma_{2,1} & \Sigma_{2,2} \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \end{pmatrix}\right). \end{aligned} \quad (0.18)$$

下面求分块矩阵的逆, 令,

$$\begin{pmatrix} \Sigma_{1,1} & \Sigma_{1,2} \\ \Sigma_{2,1} & \Sigma_{2,2} \end{pmatrix}^{-1} = \begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix}. \quad (0.19)$$

由分块矩阵求逆定理及协方差矩阵性质 $\Sigma_{1,2} = \Sigma_{2,1}^T$ 可求得,

$$\begin{cases} A = N. \\ B = -N\Sigma_{1,2}\Sigma_{2,2}^{-1}. \\ C = -\Sigma_{2,2}^{-1}\Sigma_{2,1}N. \\ D = \Sigma_{2,2}^{-1} + \Sigma_{2,2}^{-1}\Sigma_{2,1}N\Sigma_{1,2}\Sigma_{2,2}^{-1}. \end{cases} \quad (0.20)$$

上式中 $N = (\Sigma_{1,1} - \Sigma_{1,2}\Sigma_{2,2}^{-1}\Sigma_{2,1})^{-1}$.

$$\begin{aligned} f_Y(y) &\propto \exp\left(-\begin{pmatrix} y_1^T & y_2^T \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \end{pmatrix}\right) \\ &\propto \exp(-y_1^T A y_1 - y_2^T C y_1 - y_1^T B y_2 - y_2^T D y_2) \\ &\propto \dots \\ &\propto \exp\left(-\begin{pmatrix} y_1 - \Sigma_{1,2}\Sigma_{2,2}^{-1}y_2 \end{pmatrix}^T (\Sigma_{1,1} - \Sigma_{2,2}^{-1}\Sigma_{2,1})^{-1} \begin{pmatrix} y_1 - \Sigma_{1,2}\Sigma_{2,2}^{-1}y_2 \end{pmatrix}\right). \end{aligned} \quad (0.21)$$

$$f_Y(y) \propto \exp \left(- \underbrace{(y_1 - \Sigma_{1,2} \Sigma_{2,2}^{-1} y_2)}_{\mu_c}^T \underbrace{(\Sigma_{1,1} - \Sigma_{2,2}^{-1} \Sigma_{2,1})}_{\Sigma_c}^{-1} \underbrace{(y_1 - \Sigma_{1,2} \Sigma_{2,2}^{-1} y_2)}_{\mu_c} \right).$$

在 y_2 已知的条件下, $\mu_c = \Sigma_{1,2} \Sigma_{2,2}^{-1} y_2$ 与 $\Sigma_c = \Sigma_{1,1} - \Sigma_{2,2}^{-1} \Sigma_{2,1}$ 是确定的, 故 $Y_1|Y_2$ 服从均值为 μ_c , 协方差矩阵为 Σ_c 的高斯分布, 即

$$Y_1|Y_2 \sim \mathcal{N}(\mu_c, \Sigma_c).$$

如果不考虑进行中心化, 则只需将 y_1 与 y_2 分别用 $y_1 - \mu_1$ 与 $y_2 - \mu_2$ 替代, 即得到结果,

$$\mu_c = \mu_1 + \Sigma_{1,2} \Sigma_{2,2}^{-1} (Y_2 - \mu_2).$$

$$\Sigma_c = \Sigma_{1,1} - \Sigma_{1,2} \Sigma_{2,2}^{-1} \Sigma_{2,1}.$$

□

多维随机向量的概念可以推广到随机过程 (stochastic processes).

Definition 3 (高斯过程)

若一个定义在域 $D \in \mathbb{R}^d$ 上的随机过程 Z , 对于 $\forall n \in \mathbb{N}, \forall x_i \in D, (Z(x_1), \dots, Z(x_n))$ 是一个高斯随机向量, 则 Z 是高斯过程 (Gaussian Process, GP).

与高斯分布类似, 高斯过程的性质可以由定义在 D 上的均值函数 (mean function) 与定义在 $D \times D$ 上的协方差函数 (covariance function) 完全确定. 通常用 $m(x)$ 与 $k(x, x')$ 来表示均值函数与协方差函数.

$$m(x) = \mathbb{E}(Z(x)) \quad (0.22)$$

$$k(x, x') = \text{cov}(Z(x), Z(x')) \quad (0.23)$$

于是高斯过程 Z 可简记为

$$Z \sim \mathcal{GP}(m(x), k(x, x'))$$

在实际应用中总是先将数据预处理成是 0 均值的, 即使得 $m(x) = 0$. 这样不仅在理论推导时带来便利, 在实际运算中也提高了效率.

对于高斯过程的一个样本 $(Z(x_1), \dots, Z(x_n))$ 是服从多维高斯分布的, 这个高斯分布的协方差矩阵 K 由协方差函数计算得到

$$K = \begin{pmatrix} k(x_1, x_1) & k(x_1, x_2) & \cdots & k(x_1, x_n) \\ k(x_2, x_1) & k(x_2, x_2) & \cdots & k(x_2, x_n) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ k(x_n, x_1) & k(x_n, x_2) & \cdots & k(x_n, x_n) \end{pmatrix} \quad (0.24)$$

协方差函数中存在着最终确定高斯过程的参数, 这些参数也被称为超参数 (hyper-parameters).

协方差函数也被称为核函数 (kernel function). 核函数形式繁多也有多种分类方法, 常见协方差函数如下,

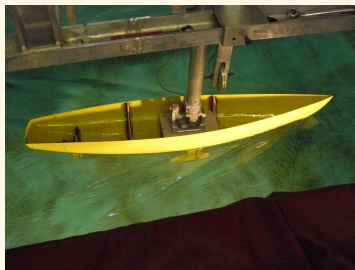
表 1 常见协方差函数

核函数	表达式	参数
<i>Constant</i>	σ_f^2	σ_f^2
<i>Linear</i>	$\sum_{i=1}^d \sigma_i^2 x_i x'_i$	$\{\sigma_1^2, \dots, \sigma_d^2\}$
<i>Polynomial</i>	$(xx' + \sigma_f^2)^p$	σ_f^2
<i>Squared Exponential</i>	$\sigma_f^2 \exp\left(-\frac{\ x-x'\ ^2}{2l^2}\right)$	σ_f^2, l
<i>Matérn</i>	$\frac{2^{1-\nu}}{\Gamma(\nu)} \left(\frac{\sqrt{2\nu}r}{l}\right)^\nu K_\nu\left(\frac{\sqrt{2\nu}r}{l}\right)$	ν, l
<i>Exponential</i>	$\sigma_f^2 \exp\left(-\frac{\ x-x'\ }{l}\right)$	σ_f^2, l
<i>Rational Quadratic</i>	$\sigma_f^2 \left(1 + \frac{\ x-x'\ ^2}{2\alpha l^2}\right)^{-\alpha}$	σ_f^2, α, l

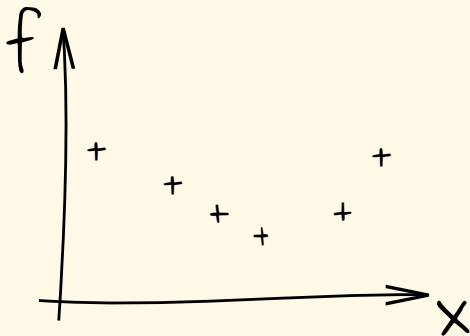
高斯过程回归模型 - 统计模型优劣

为什么使用统计模型 (statistical modelling)?

- 样本量小
 - 样本不易采集 (如现实世界的实验).
 - 样本获取的成本太高 (如破坏性测试, 耗时的数值仿真).
 - ...

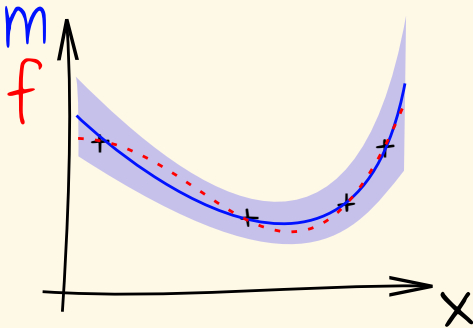


- 无法事先确定模型的形式.



高斯过程回归模型 - 统计模型优劣

- 统计模型使用数据得到预测分布进行预测, 同时可给出模型误差置信区间, 量化模型预测的不确定性.



模型假设

$$y = f(\mathbf{x}) + \varepsilon.$$

假设域 $D \in \mathbb{R}^d$, $\mathbf{x} \in D$, $y \in \mathbb{R}$, $\varepsilon \sim \mathcal{N}(0, \sigma_n^2)$, 并设 f 是定义在 D 上的高斯过程.

$$f \sim \mathcal{GP}(0, k(\mathbf{x}, \mathbf{x}')).$$

经过采样, 得到训练数据集 $\{(\mathbf{x}_i, y_i) | i = 1, \dots, n\}$, 记 $\{(\mathbf{X}, \mathbf{y})\}$. 同样可获得测试数据集 $\{(\mathbf{X}_*, \mathbf{y}_*)\}$.

高斯过程回归模型 - 建立模型

由高斯过程理论, 可知联合分布服从高斯分布.

$$\begin{bmatrix} \mathbf{y} \\ \mathbf{f}_* \end{bmatrix} \sim \mathcal{N} \left(\mathbf{0}, \begin{bmatrix} K(\mathbf{X}, \mathbf{X}) + \sigma_n^2 I & K(\mathbf{X}, \mathbf{X}_*) \\ K(\mathbf{X}_*, \mathbf{X}) & K(\mathbf{X}_*, \mathbf{X}_*) \end{bmatrix} \right).$$

此处 $K(\mathbf{X}, \mathbf{X}')$ 为简记, 当 $\mathbf{X} = (\mathbf{x}_1 \dots \mathbf{x}_m)$ 与 $\mathbf{X}' = (\mathbf{x}'_1 \dots \mathbf{x}'_d)$ 时意义为下式,

$$K(\mathbf{X}, \mathbf{X}') = \begin{bmatrix} k(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}'_1) & \dots & k(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}'_d) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ k(\mathbf{x}_m, \mathbf{x}'_1) & \dots & k(\mathbf{x}_m, \mathbf{x}'_d) \end{bmatrix}_{m \times d}.$$

$$y = f(\mathbf{x}) + \varepsilon.$$

考虑噪声方差.

$$\text{cov}(y_p, y_q) = k(\mathbf{x}_p, \mathbf{x}_q) + \sigma_n^2 \delta_{pq}. \quad (0.25)$$

其中 δ_{pq} 为克罗内克函数 (Kronecker delta function), 其形式为

$$\delta_{pq} = \begin{cases} 1 & p = q, \\ 0 & p \neq q. \end{cases} \quad (0.26)$$

从协方差矩阵的角度看,

$$\text{cov}(\mathbf{y}) = K(\mathbf{X}, \mathbf{X}) + \sigma_n^2 \mathbf{I}. \quad (0.27)$$

由高斯分布条件分布的性质, 高斯过程回归的预测分布为

$$\mathbf{f}_* | \mathbf{X}_*, \mathbf{X}, \mathbf{y} \sim \mathcal{N}(\bar{\mathbf{f}}_*, \text{cov}(\mathbf{f}_*))$$

$$\begin{aligned}\bar{\mathbf{f}}_* &= K(\mathbf{X}_*, \mathbf{X})[K(\mathbf{X}, \mathbf{X}) + \sigma_n^2 \mathbf{I}]^{-1} \mathbf{y} \\ \text{cov}(\mathbf{f}_*) &= K(\mathbf{X}_*, \mathbf{X}_*) - K(\mathbf{X}_*, \mathbf{X})[K(\mathbf{X}, \mathbf{X}) + \sigma_n^2 \mathbf{I}]^{-1} K(\mathbf{X}, \mathbf{X}_*)\end{aligned}$$

高斯过程回归模型 - 模型求解

可用最大似然估计方法对模型内的参数进行估计.

最大似然估计法本质上是使用对数损失函数 (logarithmic loss function) 的经验风险最小化 (empirical risk minimization, ERM) 方法. 核心的思想就是在已有输入与结果的条件下, 调整模型参数使这样的输入输出关系发生的概率最大.

在高斯过程模型下, 设模型参数向量为 $\boldsymbol{\theta}$, 模型参数主要来自于协方差函数 $k(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$ 与噪声方差 σ_n^2 .

假设各次采样值 $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^d$ 独立同分布于 同一个高斯分布. 记 $\Sigma_{xx} = K(\mathbf{X}, \mathbf{X})$, $\Sigma_{yy} = \text{cov}(\mathbf{y})$.

$$\begin{aligned} p(\mathbf{y}; \boldsymbol{\theta}) &= \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^d |\Sigma_{yy}|}} \exp \left(-\frac{1}{2} \mathbf{y}^T \Sigma_{yy}^{-1} \mathbf{y} \right) \\ &= \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^d |\Sigma_{yy}|}} \exp \left(-\frac{1}{2} \mathbf{y}^T (\Sigma_{xx} + \sigma_n^2 I)^{-1} \mathbf{y} \right). \end{aligned} \tag{0.28}$$

高斯过程回归模型 - 模型求解

n 次采样可写出似然函数

$$L(\mathbf{Y}; \boldsymbol{\theta}) = \prod_{i=1}^n p(\mathbf{y}_i; \boldsymbol{\theta}) = \left(\frac{1}{\sqrt{(2\pi)^d |\Sigma_{yy}|}} \right)^n \exp \left(-\frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \mathbf{y}_i^T \Sigma_{yy}^{-1} \mathbf{y}_i \right). \quad (0.29)$$

$$\log(L(\mathbf{Y}; \boldsymbol{\theta})) = -\frac{dn}{2} \log(2\pi) - \frac{n}{2} \log(|\Sigma_{yy}|) - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \mathbf{y}_i^T \Sigma_{yy}^{-1} \mathbf{y}_i. \quad (0.30)$$

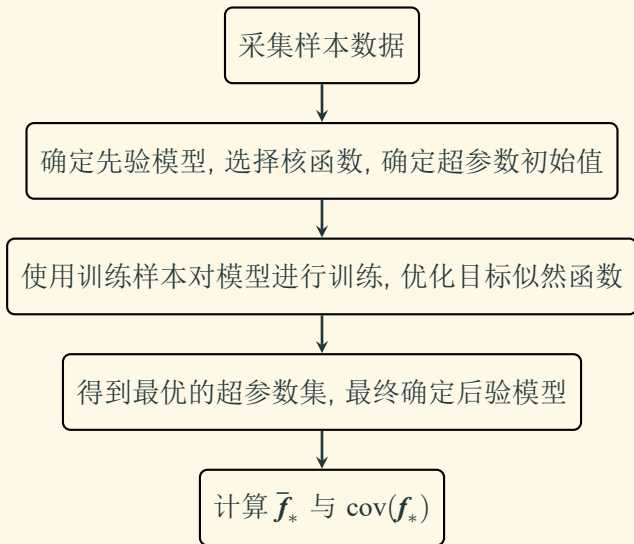
为求解 $\max_{\boldsymbol{\theta}} L(\mathbf{Y}; \boldsymbol{\theta})$.

$$\min_{\boldsymbol{\theta}} -2\log(L(\mathbf{Y}; \boldsymbol{\theta})) = \min_{\boldsymbol{\theta}} dn\log(2\pi) + n\log(|\Sigma_{yy}|) + \sum_{i=1}^n (\mathbf{y}_i^T \Sigma_{yy}^{-1} \mathbf{y}_i).$$

$$\boldsymbol{\theta} = \operatorname{argmin} dn\log(2\pi) + n\log(|\Sigma_{yy}|) + \sum_{i=1}^n (\mathbf{y}_i^T \Sigma_{yy}^{-1} \mathbf{y}_i). \quad (0.31)$$

高斯过程回归模型 - 模型求解

应用 GPR 建模的一般过程



高斯过程回归模型应用 - 仿真

高斯过程回归输入为一维的例子 (150/200)

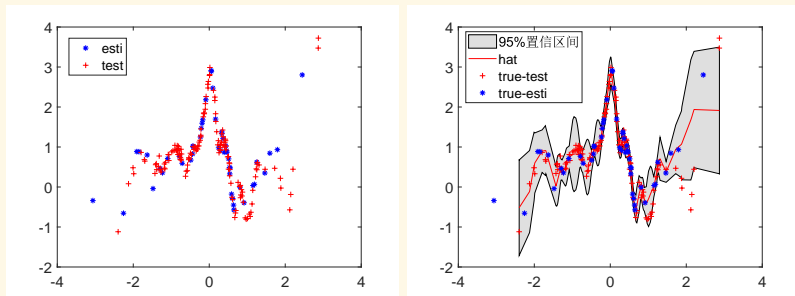


图 1 仿真

工具: Matlab + GPML ToolBox

```
meanfunc = {@meanSum, {@meanLinear,  
@meanConst}};
```

```
covfunc = {@covMaterniso, 3};
```

高斯过程回归模型应用 - 大气 CO_2 浓度预测

大气 CO_2 浓度预测取是《GPML》中的一个例子, 作者选取了 1958 年到 2003 年以月为间隔的 545 个数据 (大气平均 CO_2 浓度) 用于估计模型参数, 设计的模型协方差函数如下,

$$k_1(x, x') = \theta_1^2 \exp \left(-\frac{(x - x')^2}{2\theta_2^2} \right)$$

$$k_2(x, x') = \theta_3^2 \exp \left(-\frac{(x - x')^2}{2\theta_4^2} - \frac{2\sin^2(\pi(x - x'))}{\theta_5^2} \right)$$

$$k_3(x, x') = \theta_6^2 \left(1 + \frac{(x - x')^2}{2\theta_8\theta_7^2} \right)^{-\theta_8}$$

$$k_4(x_p, x_q) = \theta_9^2 \exp \left(-\frac{(x_p - x_q)^2}{2\theta_{10}^2} \right) + \theta_{11}\delta_{pq}$$

$$k(x, x') = k_1(x, x') + k_2(x, x') + k_3(x, x') + k_4(x, x')$$

高斯过程回归模型应用 - 大气 CO_2 浓度预测

预测结果,

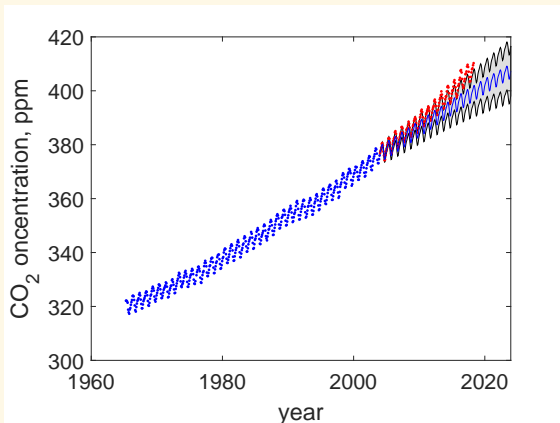


图 2 CO_2 浓度预测

参考文献

- [1] C. E. Rasmussen, C. K. I. Williams. Gaussian processes in machine learning[M]. Cambridge: the MIT Press, 2006.
- [2] Carl Edward Rasmussen, Hannes Nickisch. The gpml toolbox version 4.1[EB/OL]. 2017.
- [3] 张江帆. 基于高斯过程回归的锂电池数据处理[D]. 北京交通大学, 2017.
- [4] N. Durrande. Lecture notes on gaussian process regression [EB/OL]. 2017. <https://github.com/NicolasDurrande/Gaussian-Process-Regression-handout>.

...

Questions?

Thank you!