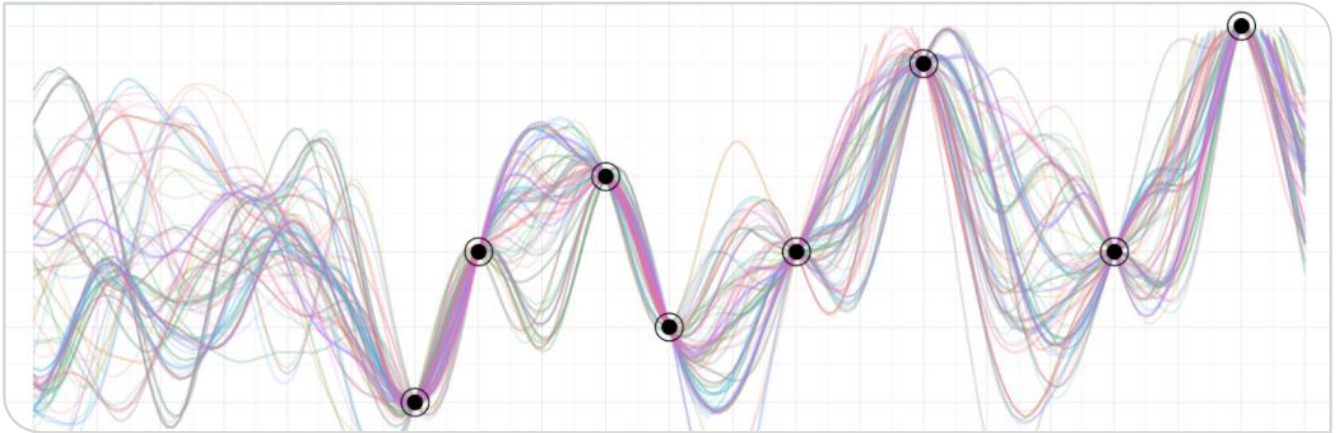


Geodatenanalyse I: Gauß-Prozesse

Kathrin Menberg



Stundenplan

	08:30 – 12:30 Uhr	13:30 – 17:30 Uhr
Montag	Tag 1 / Block 1	Tag 1 / Block 2
Dienstag	Tag 2 / Block 1	Tag 2 / Block 2
Mittwoch	Tag 3 / Block 1	Tag 3 / Block 2
Donnerstag	Tag 4 / Block 1	Tag 4 / Block 2
Freitag	Tag 5 / Block 1	Tag 5 / Block 2

- ▶ 2.10 Interpolation: Deterministische Verfahren
- ▶ 2.11 Interpolation: Kriging
- ▶ **2.12 Gauß-Prozesse**

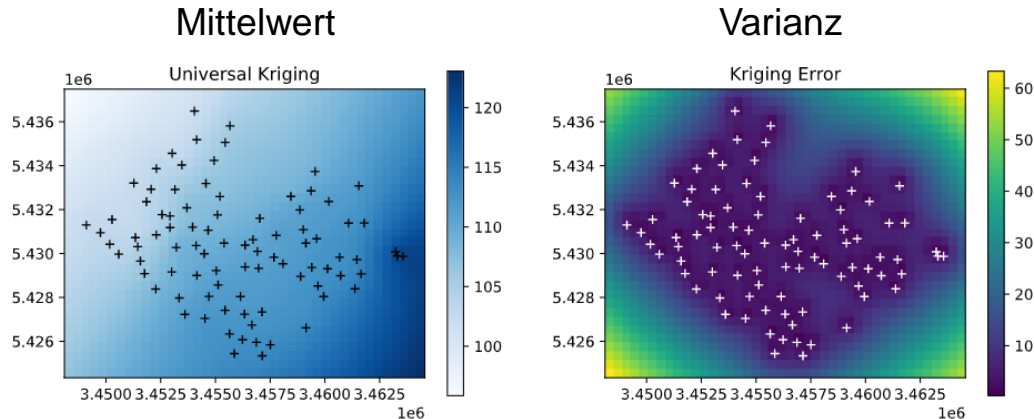
Lernziele Block 2.12

Am Ende der Stunde werden die Teilnehmer:

- ▶ ... mit den mathematischen Grundlagen Gauß-Prozessen vertraut sein.
- ▶ ... verschiedene Anwendungsgebiete von Gauß-Prozessen in den Geowissenschaften kennen.
- ▶ ... Gauß-Prozess Regression in Python zur Interpolation von Geodaten anwenden können.

Fortführung der Kriging-Idee

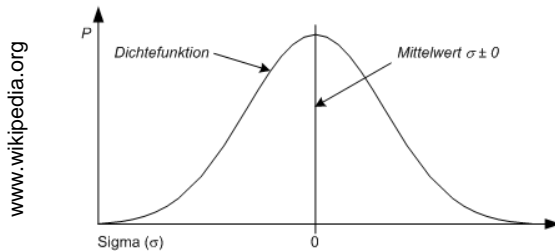
- Interpolation, bzw. Vorhersage von Datenwerten



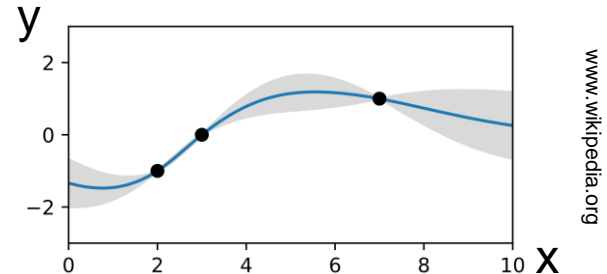
- Schließen auf Normalverteilungen von Werten
- Mittelwert & Varianz als Funktion von x- und y-Koordinaten
- Gauß-Prozesse schließen direkt auf diese Funktion

Gauß-Verteilung vs. Gauß-Prozesse

Normalverteilung



Gauß-Prozess

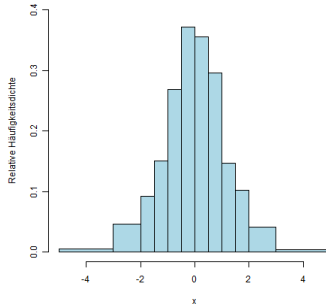


- ▶ Wahrscheinlichkeitsverteilung von Zufallswerten
- ▶ Definiert durch Mittelwert und Varianz
- ▶ 1-dimensional

- ▶ Wahrscheinlichkeitsverteilung von Zufallsfunktionen
- ▶ Definiert durch Erwartungswertfunktion und Kovarianzfunktion
- ▶ multidimensional

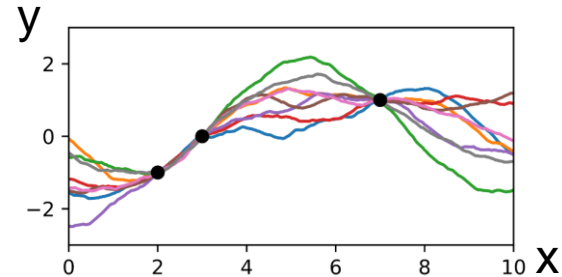
Gauß-Verteilung vs. Gauß-Prozesse

Normalverteilung



- ▶ Wahrscheinlichkeitsverteilung von Zufallswerten
- ▶ Definiert durch Mittelwert und Varianz
- ▶ 1-dimensional

Gauß-Prozess



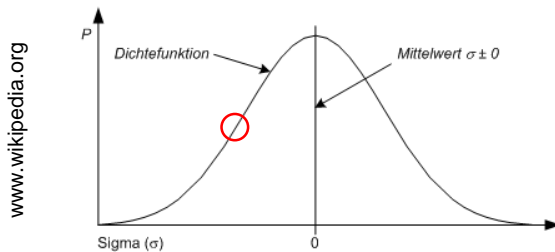
- ▶ Wahrscheinlichkeitsverteilung von Zufallsfunktionen
- ▶ Definiert durch Erwartungswertfunktion und Kovarianzfunktion
- ▶ multidimensional

Formulierung von Gauß-Prozessen

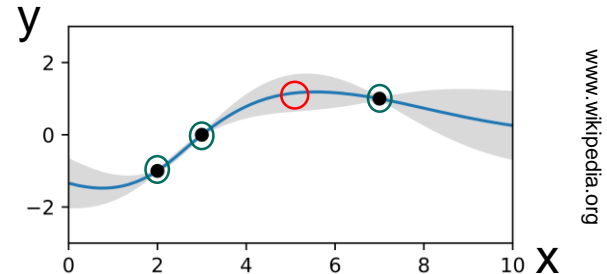
- ▶ Gauß-Prozess (GP): $p(x) \sim GP(m(x), k(x, x'))$
- ▶ m : Erwartungswertfunktion
 - ▶ oft als lineare Funktion: $m(x) = X\beta$
 - ▶ mit Erwartungswert $E = 0$, also $m(x) = 0$
- ▶ k : Kovarianzfunktion
 - ▶ oft als quadratische Exponentialfunktion $k(x, x') = \tau^2 \exp(-\frac{|x-x'|^2}{l^2})$
 - ▶ τ (magnitude) und l (lengthscale) als unbekannte Parameter
 - ▶ verschiedene Funktionen für periodische, nicht-stationäre, u.a. Datenstrukturen
 - ▶ beschreibt Korrelation zwischen benachbarten Punkten

Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion

Normalverteilung



Gauß-Prozess



- ▶ für eindimensionale Normalverteilung analytisch bestimmbar
- ▶ Gauß Prozess: an **Stützstellen** analytisch lösbar
- ▶ An neuen, **interpolierten Stellen** Approximation nötig

Schritte zur Interpolation mit GPs

1. Definition a-priori Erwartungswertfunktion
 - ▶ Berücksichtigung von Trend oder Drift
2. Definition a-priori Kovarianzfunktion
 - ▶ Beschreibung der Korrelation eines Punktes zu seiner Nachbarschaft
 - ▶ Unbekannte Parameter an Messwerte anpassen
3. Feinabstimmung der Parameter
 - ▶ Automatische Anpassung über die Randwahrscheinlichkeit
 - ▶ Maximierung Übereinstimmung von vermuteten Gaußprozess und vorhandene Messdaten
 - ▶ Abwägung zwischen Fehlerminimierung und Einfachheit der Theorie
 - ▶ Maximum-Likelihood-Methode

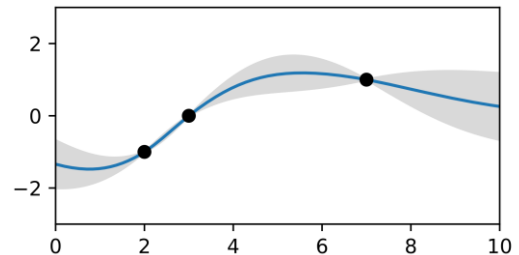
Schritte zur Interpolation mit GPs

4. Bedingter Gauß-Prozess an Stützstellen

- ▶ Vorhersage, bzw. Interpolation an unbekannten Stellen
- ▶ Basierend auf der Funktion an bekannten Stützstellen

5. Interpretation

- ▶ A-posteriori Gauß-Prozess, der bekannte Information berücksichtigt
- ▶ Gesamtheit aller möglichen Lösungen
- ▶ Lösungsfunktionen mit unterschiedlichen Wahrscheinlichkeiten gewichtet
- ▶ Quantifizierung der Unsicherheit



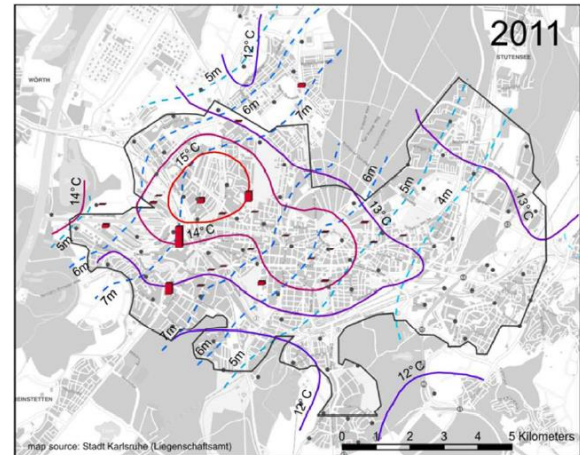
Anwendung von Gauß-Prozessen

- ▶ Interpolation, Extrapolation und Glättung von Messdaten (Gauß-Prozess Regression)
- ▶ Klassifikation in der multivariaten Statistik
- ▶ Überwachtes maschinelles Lernen zur abstrakten Modellierung (Gauß-Prozess Modelle)
- ▶ Emulatoren bzw. Surrogate-Modelle für komplexe numerische Modelle
 - ▶ Berücksichtigung von Unsicherheiten

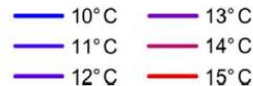
Übung 2.12: Gauß-Prozesse

- ▶ Gauß-Prozess Regression
 - ▶ Interpolation von GW Daten
 - ▶ Definition der Kovarianzfunktion
 - ▶ Vorhersagen an neuen Stellen
 - ▶ Darstellung der Fehler und Unsicherheiten

- ▶ Aufgaben in Jupyter Notebook:
geodatenanalyse_1-2-12



groundwater temperature



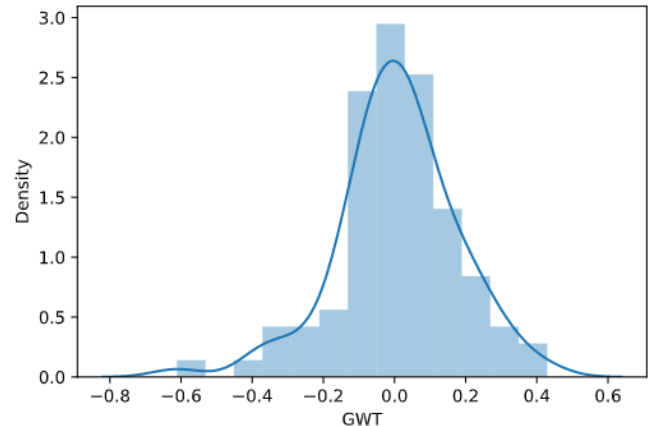
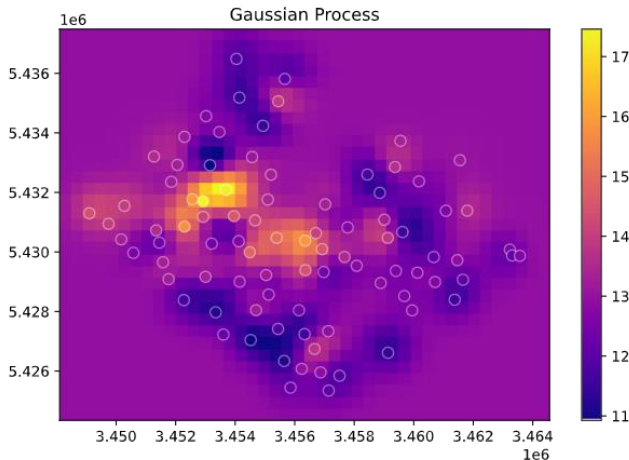
water level below the surface



Menberg et al. (2013)

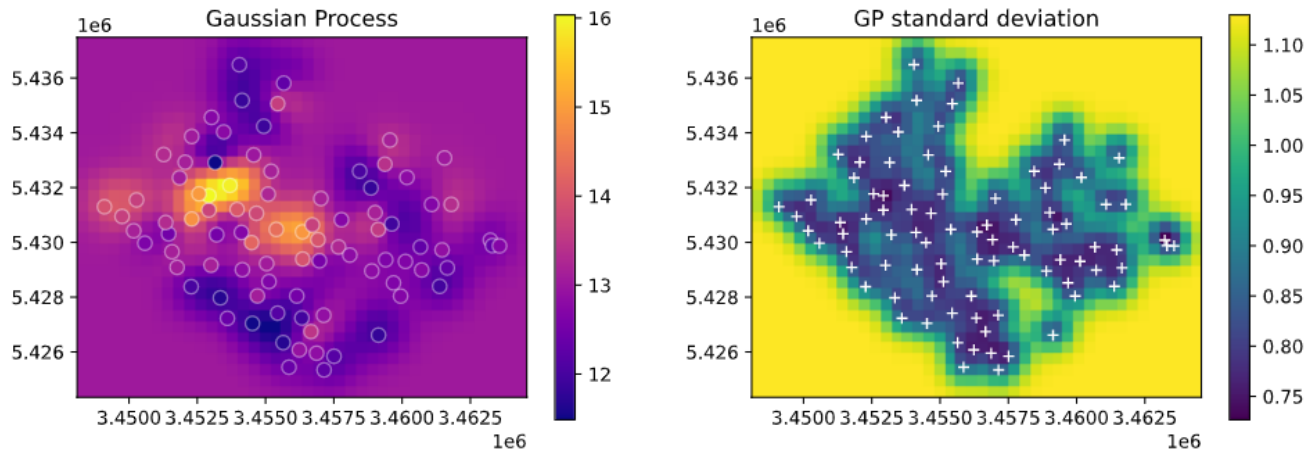
Aufgabenbesprechung

- ▶ Gauß-Prozess Regression mit einfacher Kovarianzfunktion
- ▶ RMSE = 0.17



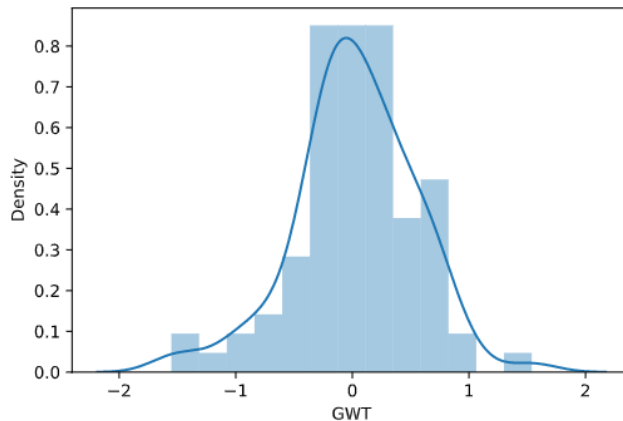
Aufgabenbesprechung

► Gauß-Prozess Regression mit Störgeräuschen



Aufgabenbesprechung

- ▶ Gauß-Prozess Regression mit Störgeräuschen
- ▶ $RMSE = 0.27$



Literatur

- ▶ Gelman et al. (2014): Bayesian Data Analysis, 2nd Ed., CRC Press
- ▶ C.E. Rasmussen, C.K. Williams (2006): Gaussian processes for machine learning, the MIT Press.

