Introducción GP

Rafael Molina University of Granada (Spain)

http://decsai.ugr.es/~rms

rms@decsai.ugr.es

Índice

- La distribución de Gauss*
- De distribuciones gaussianas a procesos gaussianos
 - Funciones de covarianza
- Interpretación de un GP a través de un modelo generativo

* Recordatorio

I. La distribución de Gauss

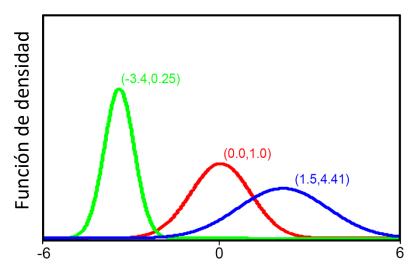
Caso Unidimensional

$$Pr(x|\mu,\sigma^2) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp[-0.5(x-\mu)^2/\sigma^2]$$

que también escribiremos:

Notación de Prince

$$Pr(x|\mu, \sigma^2) = \text{Norm}_x[\mu, \sigma^2] = \mathcal{N}(x|\mu, \sigma^2)$$



La distribución Normal Univariante describe una variable continua unidimensional.

Utiliza 2 parámetros μ y $\sigma^2 > 0$

I. La distribución de Gauss

Caso Multi-dimensional

D es el número de componentes de x

$$Pr(\mathbf{x}|\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma}) = \frac{1}{(2\pi)^{D/2} |\boldsymbol{\Sigma}|^{1/2}} \exp[-0.5(\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu})^T \boldsymbol{\Sigma}^{-1} (\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu})]$$

que también escribimos

. .

Notación de Prince

$$Pr(\mathbf{x}|\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma}) = \text{Norm}_{\mathbf{x}}[\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma}] = \mathcal{N}(\mathbf{x}|\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma})$$

La distribución Normal Multivariante describe variables aleatorias múltiples. Utiliza dos parámetros:

- Un vector que contiene las medias, μ
- Una matriz de covarianzas simétrica "definida positiva" Σ

Matriz definida positiva: $\mathbf{z}^T \mathbf{\Sigma} \mathbf{z}$ es positivo para cualquier vector no nulo \mathbf{z}

Transformación de Variables (muy importante)

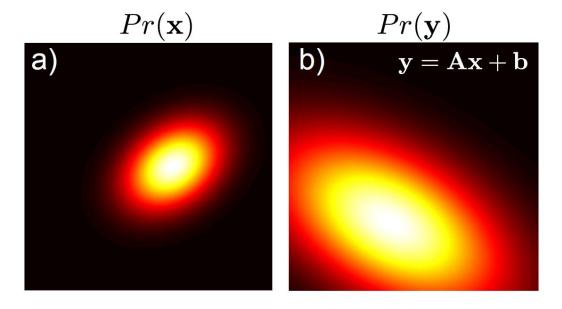
Si

$$Pr(\mathbf{x}|\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma}) = \text{Norm}_{\mathbf{x}}[\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma}]$$

 $\mathbf{y} = \mathbf{A}\mathbf{x} + \mathbf{b}$

entonces

$$Pr(\mathbf{y}) = \text{Norm}_{\mathbf{y}}[\mathbf{A}\boldsymbol{\mu} + \mathbf{b}, \mathbf{A}\boldsymbol{\Sigma}\mathbf{A}^T)$$



Transformación de Variables (muy importante)

Si

$$\mathbf{y} = \mathbf{A}\mathbf{x} + \boldsymbol{\epsilon}$$

donde

$$Pr(\mathbf{x}|\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma}) = \text{Norm}_{\mathbf{x}}[\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma}],$$

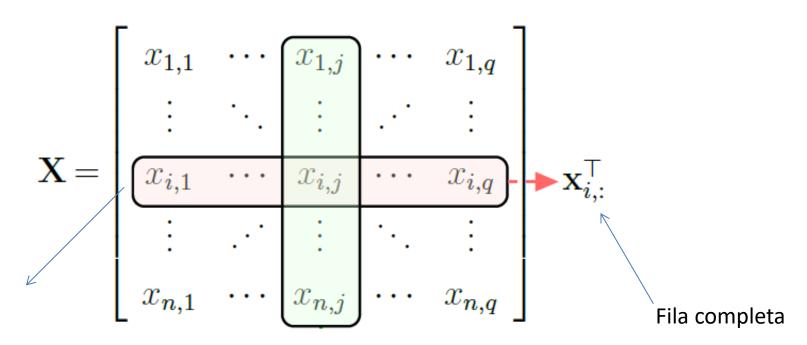
 $Pr(\boldsymbol{\epsilon}|\mathbf{0}, \sigma^2 \mathbf{I}) = \text{Norm}_{\boldsymbol{\epsilon}}[\mathbf{0}, \sigma^2 \mathbf{I}]$

siendo independientes \mathbf{x} y $\boldsymbol{\epsilon}$

entonces

$$Pr(\mathbf{y}) = \text{Norm}_{\mathbf{y}}[\mathbf{A}\boldsymbol{\mu}, \mathbf{A}\boldsymbol{\Sigma}\mathbf{A}^T + \sigma^2\mathbf{I}]$$

Supongamos que las filas de **X** contienen los rasgos de nuestras muestras. Tenemos n muestras y cada una de ellas tiene q componentes



Rasgos de la i-ésima muestra

$$\mathbf{x}_{i,:} \in \mathcal{X} = \mathcal{R}^q$$

Escribimos

$$p(\mathbf{f}|\mathbf{x}) = \mathcal{N}(\mathbf{f}|\mathbf{0}, \mathbf{K}_{ff}) = (2\pi)^{-\frac{n}{2}} |\mathbf{K}_{ff}|^{-\frac{1}{2}} \exp\left(-\frac{1}{2}\mathbf{f}^{\mathsf{T}}\mathbf{K}_{ff}^{-1}\mathbf{f}\right)$$

Casi sería mejor utilizar aquí mayúscula para x.

La matriz de covarianzas

$$\mathbf{K}_{ff} = (k_f(\mathbf{x}_{i,:}, \mathbf{x}_{j,:}))$$

- se construye evaluando la función $k_{\rm f}\,$ sobre las parejas de muestras. Tiene tamaño nxn.
- Tiene que ser semidefinida positiva para cualquier número n y cualquier conjunto de vectores de rasgos.

Observa que deberíamos escribir, incluyendo los parámetros desconocidos de la función de covarianza (núcleo),

$$p(\mathbf{f}|\mathbf{x}, \boldsymbol{\theta}_f)$$

Obviamente, una de las tareas durante el aprendizaje será aprender los parámetros del núcleo

Ejemplo

$$\mathcal{X} = \mathcal{R}$$

$$\mathbf{X} = \begin{bmatrix} -2 \\ -1.8 \\ \vdots \\ 1.8 \\ 2 \end{bmatrix}$$
 Fijate que son números pero las filas podrían ser vectores.

$$\leftarrow$$
 $\mathbf{X}_{2,:}$

$$\mathbf{K}_{ff} = (k_f(\mathbf{x}_{i,:}, \mathbf{x}_{j,:})) = (\text{var} \times \exp[-\frac{1}{sc^2} \| \mathbf{x}_{i,:} - \mathbf{x}_{j,:} \|^2])$$

Exponentiated quadratic (EQ) covarianza. También se le llama RBF o núcleo Gaussiano

```
% poco eficiente pero fácil de entender
sc=0.1; var=1;
X=-2:.2:2;
[U,V] = meshgrid(X,X);
Sigma = var*exp(-(1/(2*sc*sc))*(U-V).^2);
mean=zeros(1,numel(X));
sample=mvnrnd(mean,Sigma,1);
plot([-2:.2:2],sample,'b','LineWidth',2)
sample=mvnrnd(mean,Sigma,1);
hold on;plot([-2:.2:2],sample,'r','LineWidth',2)
sample=mvnrnd(mean,Sigma,1);
hold on; plot([-2:.2:2],sample,'g','LineWidth',2)
```

```
Tres realizaciones de EQ GP, escala=0.1 varianza=1
                                 0.5
```

title(['Tres realizaciones de EQ GP, escala=',num2str(sc),' varianza=',num2str(var)])

```
% poco eficiente pero fácil de entender
sc=1; var=1;
X=-2:.2:2;
[U,V] = meshgrid(X,X);
Sigma = var*exp(-(1/(2*sc*sc))*(U-V).^2);
mean=zeros(1,numel(X));
sample=mvnrnd(mean,Sigma,1);
plot([-2:.2:2],sample,'b','LineWidth',2)
sample=mvnrnd(mean,Sigma,1);
hold on;plot([-2:.2:2],sample,'r','LineWidth',2)
sample=mvnrnd(mean,Sigma,1);
hold on; plot([-2:.2:2],sample,'g','LineWidth',2)
```

```
Tres realizaciones de EQ GP, escala=1 varianza=1
0.5
   0
-0.5
  -1
-1.5
  -2
-2.5
  -3
-3.5 <sup>L</sup>
-2
```

```
title(['Tres realizaciones de EQ GP, escala=',num2str(sc),' varianza=',num2str(var)]);
```

```
% poco eficiente pero fácil de entender
                                                          Tres realizaciones de EQ GP, escala=10 varianza=1
sc=10; var=1;
X=-2:.2:2;
[U,V] = meshgrid(X,X);
Sigma = var*exp(-(1/(2*sc*sc))*(U-V).^2);
mean=zeros(1,numel(X));
sample=mvnrnd(mean,Sigma,1);
plot([-2:.2:2],sample,'b','LineWidth',2)
                                                -0.5
sample=mvnrnd(mean,Sigma,1);
hold on;plot([-2:.2:2],sample,'r','LineWidth',2)
sample=mvnrnd(mean,Sigma,1);
hold on; plot([-2:.2:2],sample,'g','LineWidth',2)
title(['Tres realizaciones de EQ GP, escala=',num2str(sc),' varianza=',num2str(var)]);
```

II. De Distribuciones Gaussianas a Procesos

Gaussianos

En situaciones reales se supone que sólo disponemos de observaciones ruidosas y escribiremos

$$\mathbf{y} = f(\mathbf{x}) + \boldsymbol{\epsilon}, \ \boldsymbol{\epsilon} \sim \mathcal{N}\left(\mathbf{0}, \beta^{-1}\mathbf{I}\right)$$

que induce la verosimilitud

$$p(\mathbf{y}|\mathbf{f}) = \mathcal{N}(\mathbf{y}|\mathbf{f}, \beta^{-1}\mathbf{I})$$

y da lugar a la marginal (a utilizar para aprendizaje, training)

$$p(\mathbf{y}|\mathbf{x}) = \int p(\mathbf{y}|\mathbf{f})p(\mathbf{f}|\mathbf{x})d\mathbf{f} = \mathcal{N}\left(\mathbf{y}|\mathbf{0}, \mathbf{K}_{ff} + \beta^{-1}\mathbf{I}\right)$$

que será utilizada para aprender los parámetros del modelo, es decir, los parámetros de la covarianza y β .

La distribución predictiva (a utilizar para prueba, test) para una colección n_{*} de input de prueba x_{*}

$$p(\mathbf{f}_*|\mathbf{y}, \mathbf{x}, \mathbf{x}_*) = \mathcal{N}(\mathbf{f}_*|\mathbf{L}\mathbf{y}, \mathbf{K}_{**} - \mathbf{L}\mathbf{K}_{f*})$$

donde

$$\mathbf{L} = \mathbf{K}_{*f}(\mathbf{K}_{ff} + \beta^{-1}\mathbf{I})^{-1}$$

$$\mathbf{K} = \left[egin{array}{ccc} \mathbf{K}_{ff} & \mathbf{K}_{fst} \ \mathbf{K}_{st f} & \mathbf{K}_{stst} \end{array}
ight]$$

es la matriz de covarianza asociada a la matriz de rasgos de la derecha $egin{array}{c|c} \mathbf{X} \\ \mathbf{X}_* \end{array}$

¿De dónde sale la fórmula?

Demostración de la MUY IMPORTANTE fórmula de la distribución condicionada en la diapositiva anterior. Sabemos que

$$p(\mathbf{f}_{*}|\mathbf{f}) = \mathcal{N}(\mathbf{f}_{*}|\mathbf{K}_{*f}\mathbf{K}_{ff}^{-1}\mathbf{f}, \mathbf{K}_{**} - \mathbf{K}_{*f}\mathbf{K}_{ff}\mathbf{K}_{f*})$$

$$p(\mathbf{f}|\mathbf{y}) = \mathcal{N}(\mathbf{f}|(\mathbf{K}_{ff}^{-1} + \beta \mathbf{I})^{-1}\beta \mathbf{y}, (\mathbf{K}_{ff}^{-1} + \beta \mathbf{I})^{-1})$$

$$= \mathcal{N}(\mathbf{f}|(\beta^{-1}\mathbf{K}_{ff}^{-1} + \mathbf{I})^{-1}\mathbf{y}, (\mathbf{K}_{ff}^{-1} + \beta \mathbf{I})^{-1})$$

De donde obtenemos

$$\begin{aligned} \mathbf{p}(\mathbf{f}_*|\mathbf{y}) &= \int \mathbf{p}(\mathbf{f}_*|\mathbf{f}) \mathbf{p}(\mathbf{f}|\mathbf{y}) d\mathbf{f} \\ &= \mathcal{N}(\mathbf{f}_*|K_{*f}(K_{ff} + \beta^{-1}\mathbf{I})^{-1}\mathbf{y}, \\ K_{**} - K_{*f}K_{ff}^{-1}K_{f*} + K_{*f}K_{ff}^{-1}(K_{ff}^{-1} + \beta^{-1}\mathbf{I})^{-1}K_{ff}^{-1}K_{f*} \end{aligned}$$

Una de las grandes ventajas del uso de GP es la tratabilidad de su marginal

$$p(\mathbf{y}|\mathbf{x}) = \int p(\mathbf{y}|\mathbf{f})p(\mathbf{f}|\mathbf{x})d\mathbf{f} = \mathcal{N}\left(\mathbf{y}|\mathbf{0}, \mathbf{K}_{ff} + \beta^{-1}\mathbf{I}\right)$$

$$p(\mathbf{y}|\mathbf{x}) = (2\pi)^{-\frac{n}{2}} \left| \mathbf{K}_{ff} + \beta^{-1} \mathbf{I} \right|^{-\frac{1}{2}} \exp\left(-\frac{1}{2} \mathbf{y}^{\top} (\mathbf{K}_{ff} + \beta^{-1} \mathbf{I})^{-1} \mathbf{y}\right)$$

Nos gustaría que fuese grande

Nos gustaría que fuese pequeño

- La matriz de covarianza seleccionada decide las propiedades y no la forma paramétrica de f.
- El tamaño de la matriz de covarianzas nos generará problemas si tenemos que calcular su inversa.

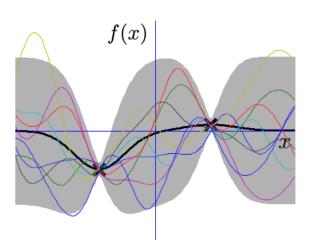
Rafael Molina Introducción GP 17

II. De Distribuciones Gaussianas a Procesos

Gaussianos

- La media del GP se representa como una curva en negro, dos desviaciones estándar se muestran con una sombra de gris.
- Las muestras se dibujan con diferentes colores.

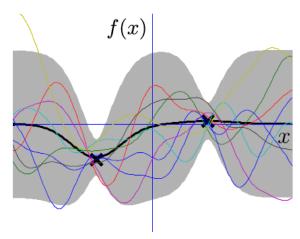
(a) Muestras de la a priori



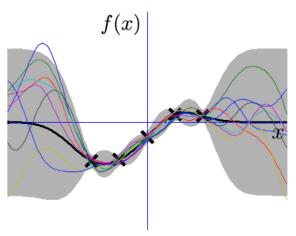
(b) Muestras de la a posteriori

Observa:

- Más ruido, más incertidumbre en la a posteriori, (b) y (c).
- Efecto de tener más observaciones, (d).
- La media vuelve a cero lejos de las observaciones.

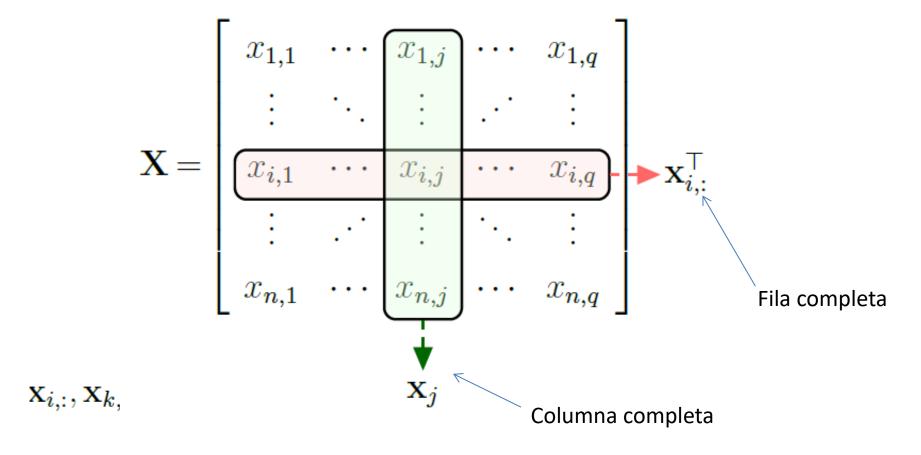


(c) Igual que (b) pero con más varianza del ruido



(d) Muestras de la a posteriori pero con más observaciones

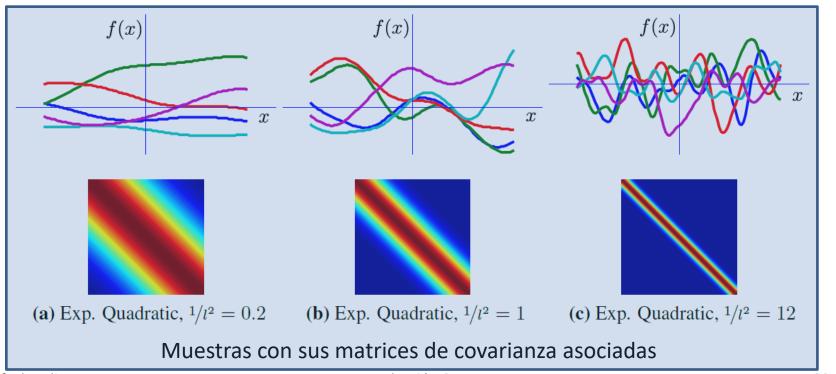
Vamos a ver varios ejemplos de matrices de covarianza. Recuerda la notación



 $k_f(\mathbf{x}_{i,:},\mathbf{x}_{k,:})$ es semidefinida positiva sobre todos los posibles pares de entradas

Exponentiated quadratic (EQ), también llamada RBF.

$$k_{f(\text{EQ})}\left(\mathbf{x}_{i,:},\mathbf{x}_{k,:}\right) = \sigma_{\text{EQ}}^2 \exp\left(-\frac{1}{2\ell^2} \sum_{j=1}^q \left(x_{i,j} - x_{k,j}\right)^2\right)$$
 Observa que $\mathbf{x}_{\text{i},:}$ pueden ser las coordenadas 2-D de un píxel



Exponentiated quadratic (EQ), con pesos diferentes para las distintas dimensiones de los inputs.

Permitirá Automatic Relevance Determination (ARD)

$$k_{f(ARD)}(\mathbf{x}_{i,:}, \mathbf{x}_{k,:}) = \sigma_{ARD}^{2} \exp\left(-\frac{1}{2} \sum_{j=1}^{q} w_{j} (x_{i,j} - x_{k,j})^{2}\right)$$

Pesos. Pequeños, dimensiones no relevantes. Grandes, dimensiones relevantes

Lineal ARD función de covarianza.

$$k_{f(\text{lin})}\left(\mathbf{x}_{i,:},\mathbf{x}_{k,:}\right) = \sigma_{\text{lin}}^{2} \mathbf{x}_{i,:}^{\top} \mathbf{C} \mathbf{x}_{k,:}$$

C es una matriz diagonal que contiene los pesos ARD.

Matérn 3/2

$$k_{f(\text{mat})}\left(\mathbf{x}_{i,:}, \mathbf{x}_{k,:}\right) = \sigma_{\text{mat}}^{2} \left(1 + \frac{\sqrt{3}|\mathbf{x}_{i,:} - \mathbf{x}_{k,:}|}{\ell}\right) \exp\left(\frac{-\sqrt{3}|\mathbf{x}_{i,:} - \mathbf{x}_{k,:}|}{\ell}\right)$$

EQ-periodic

$$k_{f(per)}(x_i, x_j) = \sigma_{per}^2 \exp\left(-\frac{1}{\ell^2} 2\sin^2\left(\frac{\pi}{T}|x_i - x_j|\right)\right)$$

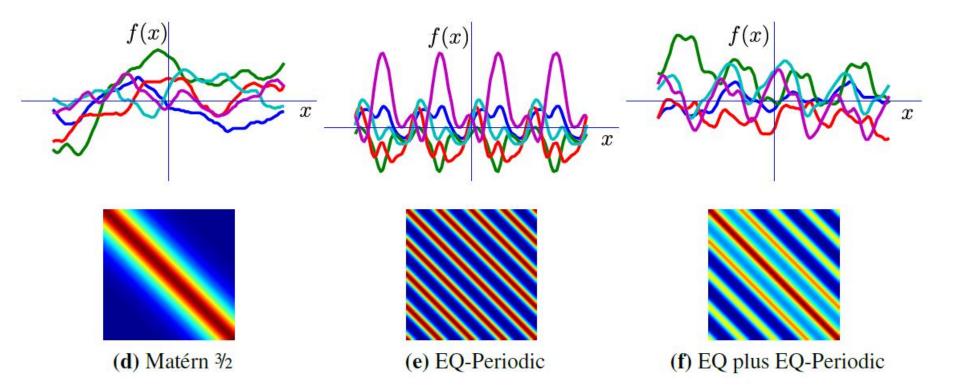
Se aplica a cada componente y luego el resultado se lleva a un EQ.

Ruido

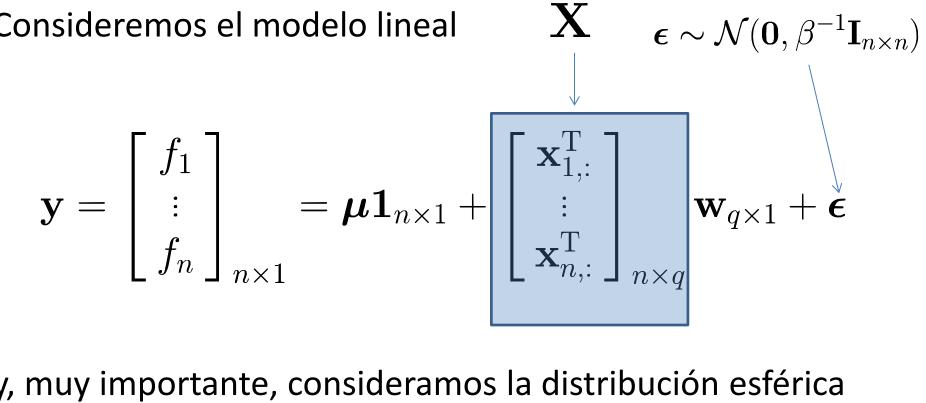
$$k_{\text{white}}(\mathbf{x}_{i,:}, \mathbf{x}_{k,:}) = \theta_{\text{white}} \delta_{i,k}$$

Parece muy tonta pero aparece frecuentemente en problemas relacionados con diccionarios

Rafael Molina Introducción GP 22



Consideremos el modelo lineal



y, muy importante, consideramos la distribución esférica

$$\mathbf{w} \sim \mathcal{N}(\mathbf{0}, \mathbf{I}_{q \times q})$$

Si integramos en w y el error tenemos

$$\mathbf{y} \sim \mathcal{N}(\boldsymbol{\mu} \mathbf{1}, \mathbf{X} \mathbf{X}^T + \beta^{-1} \mathbf{I})$$

¿Y si hacemos la siguiente transformación?

$$\mathbf{x}_{i,:}^T = (x_{i1}, x_{i2}, \ldots, x_{iq}) \longrightarrow$$

$$\mathbf{z}_{i,:}^T = \boldsymbol{\phi}(\mathbf{x}_{i,:}^T) = (\boldsymbol{\phi}_1(x_{i,:}^T) \ \boldsymbol{\phi}_2(x_{i,:}^T) \ \dots \ \boldsymbol{\phi}_{q'}(x_{i,:}^T))$$

Observa que las dimensiones de un vector de rasgos y su transformado pueden no ser las mismas. La dimensión q' puede ser infinito!!!

Podríamos hacer, por ejemplo, la siguiente transformación

Observa que las dimensiones de un vector de rasgos y su transformado pueden no ser las mismas.

III Interpretación de un GP a través de

un modelo generativo

Pasaríamos de
$$\mathbf{y} = \begin{bmatrix} f_1 \\ \vdots \\ f_n \end{bmatrix}_{n \times 1} = \boldsymbol{\mu} \mathbf{1}_{n \times 1} + \begin{bmatrix} \mathbf{x}_{1,:}^T \\ \vdots \\ \mathbf{x}_{n,:}^T \end{bmatrix}_{n \times q} \mathbf{w}_{q \times 1} + \boldsymbol{\epsilon}$$
 a

$$\mathbf{y} = \begin{bmatrix} f_1 \\ \vdots \\ f_n \end{bmatrix}_{n imes 1} = \boldsymbol{\mu}' \mathbf{1}_{n imes 1} + \begin{bmatrix} \mathbf{z}_{1,:}^{\mathrm{T}} \\ \vdots \\ \mathbf{z}_{n,:}^{\mathrm{T}} \end{bmatrix}_{n imes q'} \mathbf{w}_{q' imes 1} + \boldsymbol{\epsilon}'$$

 $\mathbf{w} \sim \mathcal{N}(\mathbf{0}, \mathbf{I}_{q' \times q'})$ $\boldsymbol{\epsilon} \sim \mathcal{N}(\mathbf{0}, (\beta')^{-1} \mathbf{I}_{n \times n})$

y si integramos en w y el nuevo error

$$\mathbf{y} \sim \mathcal{N}(\boldsymbol{\mu}' \mathbf{1}, \mathbf{Z} \mathbf{Z}^T + (\beta')^{-1} \mathbf{I})$$

Este modelo nos indica que sólo necesitamos conocer el producto escalar de los vectores transformados en el dominio transformado.

La matriz $\mathbf{Z}\mathbf{Z}^{\mathrm{T}}$ es semidefinida positiva y corresponderá a una matriz de la forma

$$\mathbf{K}_{ff} = (k_f(\mathbf{x}_{i,:}, \mathbf{x}_{j,:}))$$

¿Qué hace, por tanto, un GP?

$$\mathbf{y} \sim \mathcal{N}(\boldsymbol{\mu}' \mathbf{1}, \mathbf{Z} \mathbf{Z}^T + (\beta')^{-1} \mathbf{I})$$

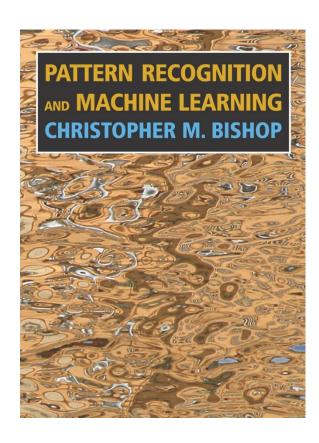
- Como modelo generativo, representar linealmente nuestros datos en un dominio transformado de los rasgos.
- No necesitamos conocer en que vectores se transforman los rasgos. Sólo el producto escalar en el dominio transformado. Es decir, el núcleo asociado.

$$\mathbf{K}_{ff} = (k_f(\mathbf{x}_{i,:}, \mathbf{x}_{j,:}))$$

Rafael Molina Introducción GP 30

Bibliografía



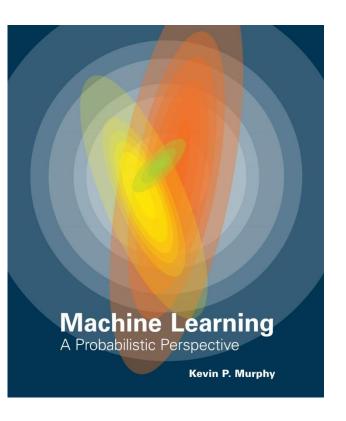


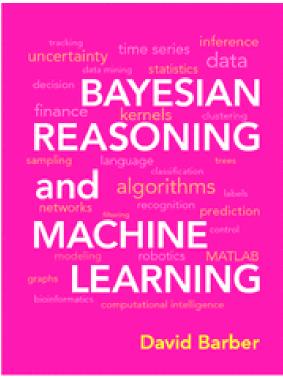
http://www.computervisionmodels.com/

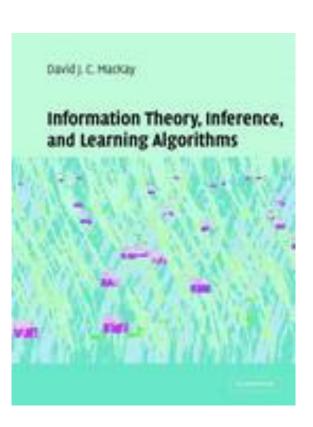
http://research.microsoft.com/en-us/um/people/cmbishop/prml/

Bibliografía

http://www.cs.ubc.ca/~murphyk/MLbook/ http://www.inference.phy.cam.ac.uk/mackay/itila/







http://www.cs.ucl.ac.uk/staff/d.barber/brml/