

Гауссовские процессы, часть 1

Максим Кочуров

МГУ им. М.В. Ломоносова

Лекция 4



① Введение

- Подготовка
- Математика ядерных методов
- Основные гиперпараметры
- Виды ядер
- Математика ядер

② Разбираем пример

- Пространственная иерархия



Непараметрические модели

- Предположения обычно весьма условны
- Структура (функции) задаётся априорно
- Это характерно не только для Гауссовских процессов



Непараметрические модели

- Предположения обычно весьма условны
 - Априорные распределения на функции
 - Априорные распределения на временные или пространственные эффекты
 - Структура (функции) задаётся априорно
-
- Это характерно не только для Гауссовских процессов



Непараметрические модели

- Предположения обычно весьма условны условны
 - Априорные распределения на функции
 - Априорные распределения на временные или пространственные эффекты
- Структура (функции) задаётся априорно
 - Почти не изменяется
 - Волатильна
 - Принимает значения из диапазона между y_0 и y_1
 - экстраполирует периодичность
 - Может иметь другие структурные допущения
- Это характерно не только для Гауссовских процессов



Непараметрические модели

- Предположения обычно весьма условны
 - Априорные распределения на функции
 - Априорные распределения на временные или пространственные эффекты
- Структура (функции) задаётся априорно
 - Почти не изменяется
 - Волатильна
 - Принимает значения из диапазона между y_0 и y_1
 - экстраполирует периодичность
 - Может иметь другие структурные допущения
- Это характерно не только для Гауссовских процессов
 - Процесс Дирихле
 - Байесовские аддитивные регрессионные деревья (BART)
 - И еще много для чего

Обозначения



$$x \in \mathbb{R}^n, y \in \mathbb{R}$$

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



Обозначения

$$x \in \mathbb{R}^n, y \in \mathbb{R}$$

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

$$\begin{bmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_N \end{bmatrix} \sim \mathcal{N} \left(\begin{bmatrix} m(x_1) \\ \vdots \\ m(x_N) \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} k(x_1, x_1) & \dots & k(x_1, x_N) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ k(x_N, x_1) & \dots & k(x_N, x_N) \end{bmatrix} \right)$$

- 1 \mathcal{GP} Гауссовский процесс - обычно, с $m(x)$ в качестве среднего и ковариационной матрицей $k(x, x')$



Обозначения

$$x \in \mathbb{R}^n, y \in \mathbb{R}$$

$$Y \sim \mathcal{GP}(\textcolor{red}{m}(x), k(x, x'))$$

$$\begin{bmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_N \end{bmatrix} \sim \mathcal{N} \left(\begin{bmatrix} \textcolor{red}{m}(x_1) \\ \vdots \\ \textcolor{red}{m}(x_N) \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} k(x_1, x_1) & \dots & k(x_1, x_N) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ k(x_N, x_1) & \dots & k(x_N, x_N) \end{bmatrix} \right)$$

- ① \mathcal{GP} Гауссовский процесс - обычно, с $m(x)$ в качестве среднего и ковариационной матрицей $k(x, x')$
- ② $\textcolor{red}{m}(x)$ - функция среднего, например
 - Линейная регрессия $\textcolor{red}{m}(x) = x^\top \beta$
 - Константа или ноль $\textcolor{red}{m}(x) = c$
 - Другие функции на выбор, например $\textcolor{red}{m}(x) = \sin(x)$



Обозначения

$$x \in \mathbb{R}^n, y \in \mathbb{R}$$

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

$$\begin{bmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_N \end{bmatrix} \sim \mathcal{N} \left(\begin{bmatrix} m(x_1) \\ \vdots \\ m(x_N) \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} k(x_1, x_1) & \dots & k(x_1, x_N) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ k(x_N, x_1) & \dots & k(x_N, x_N) \end{bmatrix} \right)$$

- ① \mathcal{GP} Гауссовский процесс - обычно, с $m(x)$ в качестве среднего и ковариационной матрицей $k(x, x')$
- ② $m(x)$ - функция среднего, например
 - Линейная регрессия $m(x) = x^\top \beta$
 - Константа или ноль $m(x) = c$
 - Другие функции на выбор, например $m(x) = \sin(x)$
- ③ $k(x, x')$ - ядровая функция, мера схожести между x и x'
 - $[K]_{ij} = k(x_i, x_j)$ симметричная и положительно определенная матрица



Ядровая функция

Напомним, что $\mathcal{GP}(M(x), K(x, x'))$ является, по сути, нормальным распределением. Тогда ядро может быть задано следующим образом:

$$\begin{aligned} k(x, x') &= RBF(x, x') \\ &= \exp(-\|x - x'\|/2L) \end{aligned}$$

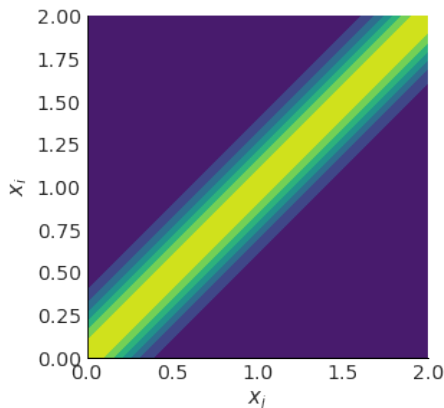


Рис.: Ядро RBF (пространство данных)



Ядровая функция

Напомним, что $\mathcal{GP}(M(x), K(x, x'))$ является, по сути, нормальным распределением. Тогда ядро может быть задано следующим образом:

$$\begin{aligned} k(x, x') &= RBF(x, x') \\ &= \exp(-\|x - x'\|/2L) \end{aligned}$$

Интерпретация параметра

L - масштаб длины x , что малые изменения не меняют u сильно

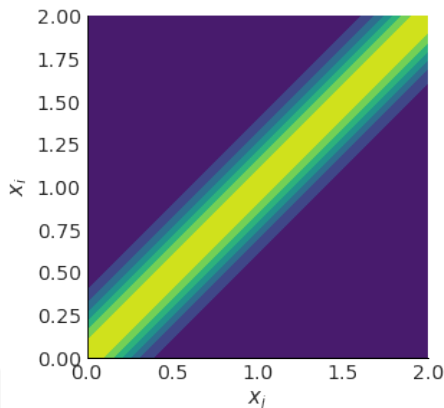


Рис.: Ядро RBF (пространство данных)



Ядровая функция

Напомним, что $\mathcal{GP}(M(x), K(x, x'))$ является, по сути, нормальным распределением. Тогда ядро может быть задано следующим образом:

$$\begin{aligned} k(x, x') &= RBF(x, x') \\ &= \exp(-\|x - x'\|/2L) \end{aligned}$$

Интерпретация параметра

L - масштаб длины x , что малые изменения не меняют у сильно

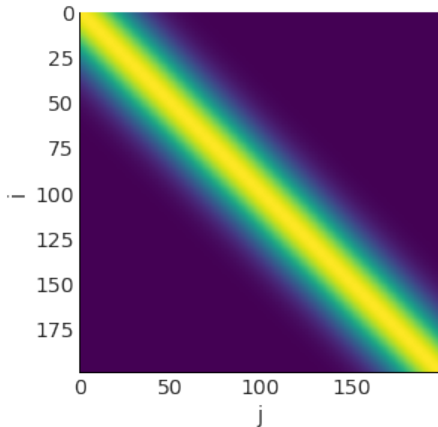


Рис.: Ядро RBF (ковариационная матрица)



Математика ядерных методов

Ядра можно комбинировать ([тут подробнее](#)). Если $k_1(x, x')$ и $k_2(x, x')$ удовлетворяют свойствам ядра, то

- ❶ $k_*(x, x') = a \cdot k_1(x, x') + b \cdot k_2(x, x')$ удовлетворяет свойствам ядра
 - Правило сложения
 - $a, b > 0$
- ❷ $k_*(x, x') = k_1(x, x')^a \cdot k_2(x, x')^b$ удовлетворяет свойствам ядра
 - Правило умножения
 - $a, b > 0$



Математика ядерных методов

Ядра можно комбинировать ([тут подробнее](#)). Если $k_1(x, x')$ и $k_2(x, x')$ удовлетворяют свойствам ядра, то

- ❶ $k_*(x, x') = a \cdot k_1(x, x') + b \cdot k_2(x, x')$ удовлетворяет свойствам ядра
 - Правило сложения
 - $a, b > 0$
- ❷ $k_*(x, x') = k_1(x, x')^a \cdot k_2(x, x')^b$ удовлетворяет свойствам ядра
 - Правило умножения
 - $a, b > 0$

При параметризации обычно настраиваются следующее

- Белый шум ε
- Амплитуда σ
- Масштаб длины L

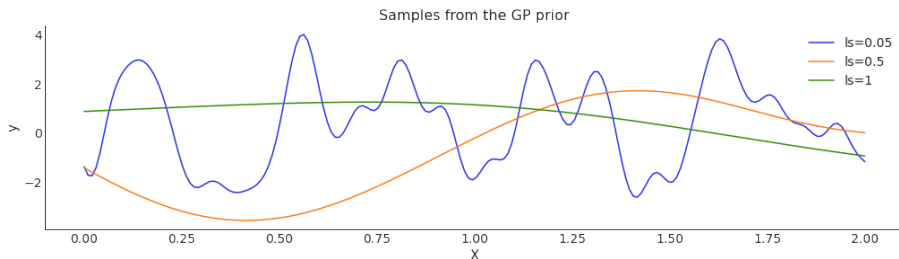
$$k(x, x') \cdot \sigma^2 + \varepsilon^2$$



Масштаб длины

- Как **сильно** меняется y
- Не оценивает величину изменений!
- Хорошо подбирается итеративно
- Трудно оценить эмпирически

$$k(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \cdot \sigma^2 + \varepsilon^2$$





Соображению по подбору масштаба длины

- Периодичность данных
 - Для годовых данных подойдет L в 1 год
 - Интерполяция на пропущенные наблюдения
 - Интерполяция на более частотные данные (помесячные)

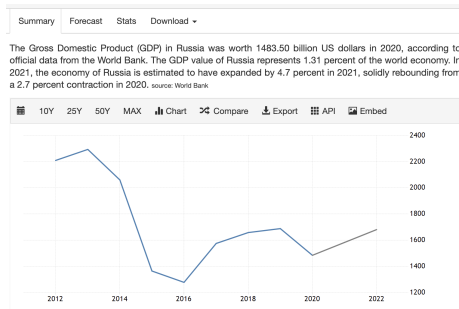


Рис.: ВВП России
(tradingeconomics.com)



Соображению по подбору масштаба длины

- Периодичность данных
 - Для годовых данных подойдет L в 1 год
 - Интерполяция на пропущенные наблюдения
 - Интерполяция на более частотные данные (помесячные)
- Другие примеры
 - Дистанция (км, м, см)
 - Возраст
 - Длительность обучения

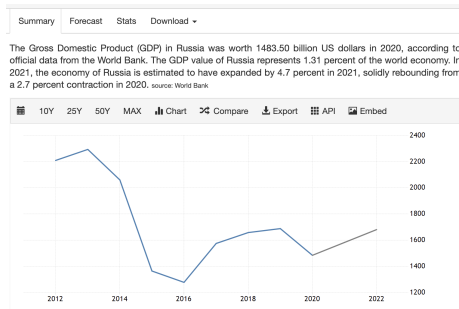


Рис.: ВВП России
(tradingeconomics.com)



Амплитуда

$$k(x, x') \cdot \sigma^2 + \varepsilon^2$$

- Насколько изменчива зависимая переменная
- Не стандартное отклонение (т.е. не белый шум)
- Априорное распределение подбирается на основе предиктивного

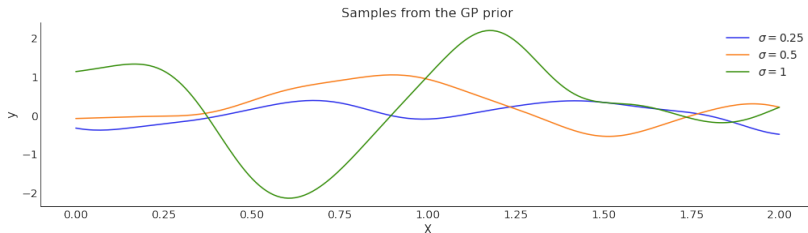


Рис.: Сравнение амплитуд (σ)



Амплитуда и Белый шум

$$k(x, x') \cdot \sigma^2 + \epsilon^2$$

- Белый шум не стоит путать с амплитудой

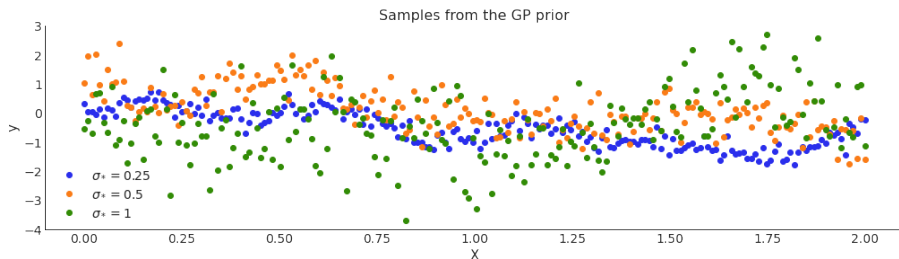


Рис.: Сравнение белого шума (ϵ)



Подводим итоги

$$\begin{aligned}k(x, x') &= RBF(x, x') \cdot \sigma^2 + \varepsilon^2 \\ &= \exp(-||x - x'||/2L) \cdot \sigma^2 + \varepsilon^2\end{aligned}$$



Подводим итоги

- масштаб длины L –
размерность исходных данных

$$\begin{aligned}k(x, x') &= RBF(x, x') \cdot \sigma^2 + \varepsilon^2 \\ &= \exp(-\|x - x'\|/2L) \cdot \sigma^2 + \varepsilon^2\end{aligned}$$



Подводим итоги

- масштаб длины L –
размерность исходных данных
- амплитуда σ – изменчивость
результата

$$\begin{aligned}k(x, x') &= RBF(x, x') \cdot \sigma^2 + \varepsilon^2 \\&= \exp(-||x - x'||/2L) \cdot \sigma^2 + \varepsilon^2\end{aligned}$$



Подводим итоги

- масштаб длины L –
размерность исходных данных
- амплитуда σ – изменчивость
результата
- ε – белый шум результата

$$\begin{aligned}k(x, x') &= RBF(x, x') \cdot \sigma^2 + \varepsilon^2 \\ &= \exp(-||x - x'||/2L) \cdot \sigma^2 + \varepsilon^2\end{aligned}$$



Подводим итоги

- масштаб длины L – размерность исходных данных
- амплитуда σ – изменчивость результата
- ε – белый шум результата

$$\begin{aligned}k(x, x') &= RBF(x, x') \cdot \sigma^2 + \varepsilon^2 \\ &= \exp(-\|x - x'\|/2L) \cdot \sigma^2 + \varepsilon^2\end{aligned}$$

Заметка

Масштаб длины можно вынести из ядровой функции, так как для большинства из них это не внутреннее свойство

$$\exp(-\|x - x'\|/2L) = \exp(-\|x/\textcolor{red}{L} - x'/\textcolor{red}{L}\|/2)$$



Виды ядер

Каждое ядро – это структурное ограничение

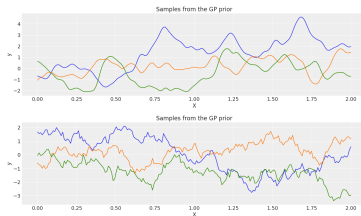
- Стационарные
- Периодическое/циклическое
- Линейное/полиномиальное
(нестационарные)



Виды ядер

Каждое ядро – это структурное ограничение

- Стационарные
 - "При экстраполяции распределение вернется к априорному"
- Периодическое/циклическое
- Линейное/полиномиальное (нестационарные)

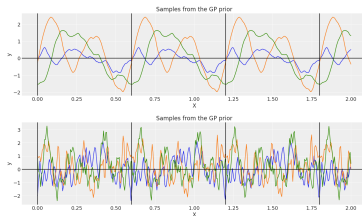




Виды ядер

Каждое ядро – это структурное ограничение

- Стационарные
 - "При экстраполяции распределение вернется к априорному"
- Периодическое/циклическое
 - "Наблюдения неизменны во времени"
- Линейное/полиномиальное (нестационарные)

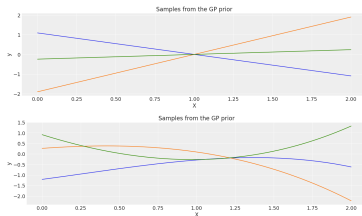




Виды ядер

Каждое ядро – это структурное ограничение

- Стационарные
 - "При экстраполяции распределение вернется к априорному"
- Периодическое/циклическое
 - "Наблюдения неизменны во времени"
- Линейное/полиномиальное (нестационарные)
 - Линейная регрессия
 - Полиномиальная регрессия

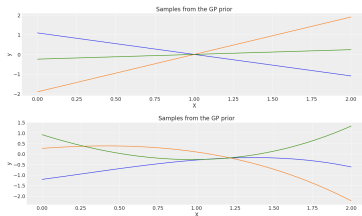




Виды ядер

Каждое ядро – это структурное ограничение

- Стационарные
 - "При экстраполяции распределение вернется к априорному"
- Периодическое/циклическое
 - "Наблюдения неизменны во времени"
- Линейное/полиномиальное (нестационарные)
 - Линейная регрессия
 - Полиномиальная регрессия



Математическое преимущество ядер

Можно комбинировать разные семейства ядер. Пример [здесь](#).
Комбинирование ядер – это искусство (разберем на семинаре)



Комбинации ядер



Рис.: Экспоненциальные и периодические ядра



Комбинации ядер

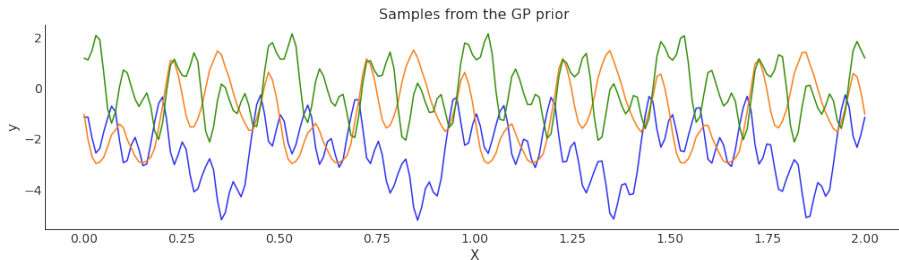


Рис.: Сумма периодических ядер



Комбинации ядер

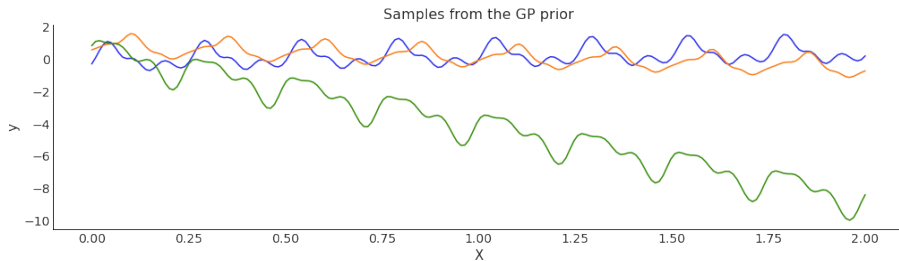


Рис.: Линейные и периодические ядра



Выводы

- Ядра отображают структурные особенности
- Особенности можно вычленить из данных
- Комбинируя ядра можно учитывать несколько особенностей данных



Мотивация

Есть несколько примеров, когда гауссовские процессы – решение проблемы. Например:

- Параметры изменяются во времени
- Данные – временные ряды
- Данные – пространственные
- Данные – пространственные, с панельной структурой



Разбираем пример

Смотрим на данные по 8 школам

$$\mu \sim \text{Normal}(0, 5)$$

$$\tau \sim \text{HalfCauchy}(5)$$

$$\theta_i \sim \text{Normal}(\mu, \tau)$$

$$y_i \sim \text{Normal}(\theta_i, \sigma_i)$$

Данные – пары рядов $\{(y_i, \sigma_i)\}$



Разбираем пример

Смотрим на данные по 8 школам

$$\mu \sim \text{Normal}(0, 5)$$

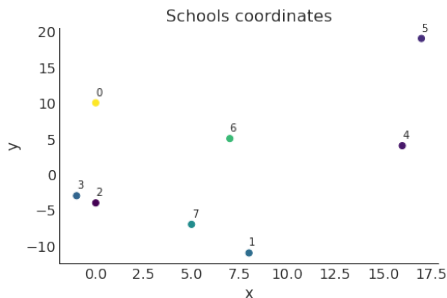
$$\tau \sim \text{HalfCauchy}(5)$$

$$\theta_i \sim \text{Normal}(\mu, \tau)$$

$$y_i \sim \text{Normal}(\theta_i, \sigma_i)$$

Данные – пары рядов $\{(y_i, \sigma_i)\}$

- Что если у нас появится дополнительная информация?
- Учтем расположение школ?





Разбираем пример

Смотрим на данные по 8 школам

$$\mu \sim \text{Normal}(0, 5)$$

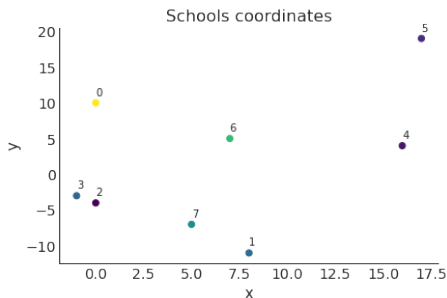
$$\tau \sim \text{HalfCauchy}(5)$$

$$\theta_i \sim \text{Normal}(\mu, \tau)$$

$$y_i \sim \text{Normal}(\theta_i, \sigma_i)$$

Данные – пары рядов $\{(y_i, \sigma_i)\}$

- Что если у нас появится дополнительная информация?
- Учтем расположение школ?



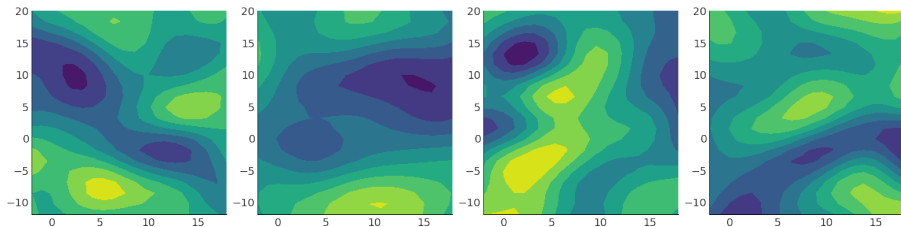
Предположение

Соседние школы похожи



Гауссовский процесс в пространстве

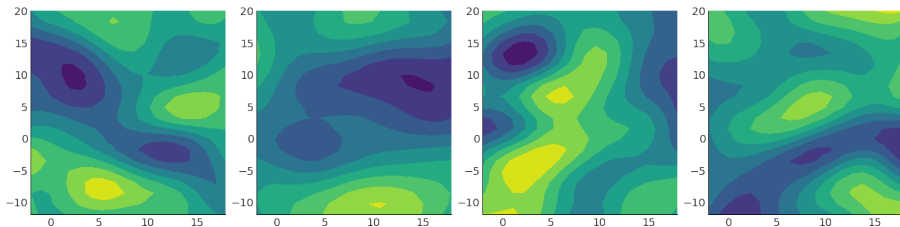
- Гладкая функция в двумерном пространстве
- Масштаб длины важен и его можно вычислить





Гауссовский процесс в пространстве

- Гладкая функция в двумерном пространстве
- Масштаб длины важен и его можно вычислить



Идея

Вместо независимой иерархии применим GP-иерархию!



GP-иерархии

До: (центрированное)

$$\mu \sim \text{Normal}(0, 5)$$

$$\tau \sim \text{HalfCauchy}(5)$$

$$\theta_i \sim \text{Normal}(\mu, \tau)$$

$$y_i \sim \text{Normal}(\theta_i, \sigma_i)$$

(нецентрированное)

$$\mu \sim \text{Normal}(0, 5)$$

$$\tau \sim \text{HalfCauchy}(5)$$

$$\bar{\theta}_i \sim \text{Normal}(0, 1)$$

$$\theta_i = \mu + \tau \cdot \bar{\theta}_i$$

$$y_i \sim \text{Normal}(\theta_i, \sigma_i)$$

После: (нецентрированное + GP)

$$\mu \sim \text{Normal}(0, 5)$$

$$\tau \sim \text{HalfCauchy}(5)$$

$$\bar{\theta}_i \sim \mathcal{GP}(x_i)$$

$$\theta_i = \mu + \tau \cdot \bar{\theta}_i$$

$$y_i \sim \text{Normal}(\theta_i, \sigma_i)$$



GP-иерархии

До: (центрированное)

$$\mu \sim \text{Normal}(0, 5)$$

$$\tau \sim \text{HalfCauchy}(5)$$

$$\theta_i \sim \text{Normal}(\mu, \tau)$$

$$y_i \sim \text{Normal}(\theta_i, \sigma_i)$$

(нецентрированное)

$$\mu \sim \text{Normal}(0, 5)$$

$$\tau \sim \text{HalfCauchy}(5)$$

$$\bar{\theta}_i \sim \text{Normal}(0, 1)$$

$$\theta_i = \mu + \tau \cdot \bar{\theta}_i$$

$$y_i \sim \text{Normal}(\theta_i, \sigma_i)$$

После: (нецентрированное + GP)

$$\mu \sim \text{Normal}(0, 5)$$

$$\tau \sim \text{HalfCauchy}(5)$$

$$\bar{\theta}_i \sim \mathcal{GP}(x_i)$$

$$\theta_i = \mu + \tau \cdot \bar{\theta}_i$$

$$y_i \sim \text{Normal}(\theta_i, \sigma_i)$$

Комментарий

У центрированного распределения есть сложности с геометрией (см. лек. 2)



GP-иерархии

До: (центрированное)

$$\mu \sim \text{Normal}(0, 5)$$

$$\tau \sim \text{HalfCauchy}(5)$$

$$\theta_i \sim \text{Normal}(\mu, \tau)$$

$$y_i \sim \text{Normal}(\theta_i, \sigma_i)$$

(нецентрированное)

$$\mu \sim \text{Normal}(0, 5)$$

$$\tau \sim \text{HalfCauchy}(5)$$

$$\bar{\theta}_i \sim \text{Normal}(0, 1)$$

$$\theta_i = \mu + \tau \cdot \bar{\theta}_i$$

$$y_i \sim \text{Normal}(\theta_i, \sigma_i)$$

После: (нецентрированное + GP)

$$\mu \sim \text{Normal}(0, 5)$$

$$\tau \sim \text{HalfCauchy}(5)$$

$$\bar{\theta}_i \sim \mathcal{GP}(x_i)$$

$$\theta_i = \mu + \tau \cdot \bar{\theta}_i$$

$$y_i \sim \text{Normal}(\theta_i, \sigma_i)$$

Комментарий

Проблемы можно решить
нецентрированной
параметризацией



GP-иерархии

До: (центрированное)

$$\mu \sim \text{Normal}(0, 5)$$

$$\tau \sim \text{HalfCauchy}(5)$$

$$\theta_i \sim \text{Normal}(\mu, \tau)$$

$$y_i \sim \text{Normal}(\theta_i, \sigma_i)$$

(нецентрированное)

$$\mu \sim \text{Normal}(0, 5)$$

$$\tau \sim \text{HalfCauchy}(5)$$

$$\bar{\theta}_i \sim \text{Normal}(0, 1)$$

$$\theta_i = \mu + \tau \cdot \bar{\theta}_i$$

$$y_i \sim \text{Normal}(\theta_i, \sigma_i)$$

После: (нецентрированное + GP)

$$\mu \sim \text{Normal}(0, 5)$$

$$\tau \sim \text{HalfCauchy}(5)$$

$$\bar{\theta}_i \sim \mathcal{GP}(x_i)$$

$$\theta_i = \mu + \tau \cdot \bar{\theta}_i$$

$$y_i \sim \text{Normal}(\theta_i, \sigma_i)$$

Комментарий

В изначальной модели θ_i (или $\bar{\theta}_i$) независимы для разных школ



GP-иерархии

До: (центрированное)

$$\mu \sim \text{Normal}(0, 5)$$

$$\tau \sim \text{HalfCauchy}(5)$$

$$\theta_i \sim \text{Normal}(\mu, \tau)$$

$$y_i \sim \text{Normal}(\theta_i, \sigma_i)$$

(нецентрированное)

$$\mu \sim \text{Normal}(0, 5)$$

$$\tau \sim \text{HalfCauchy}(5)$$

$$\bar{\theta}_i \sim \text{Normal}(0, 1)$$

$$\theta_i = \mu + \tau \cdot \bar{\theta}_i$$

$$y_i \sim \text{Normal}(\theta_i, \sigma_i)$$

После: (нецентрированное + GP)

$$\mu \sim \text{Normal}(0, 5)$$

$$\tau \sim \text{HalfCauchy}(5)$$

$$\bar{\theta}_i \sim \mathcal{GP}(x_i)$$

$$\theta_i = \mu + \tau \cdot \bar{\theta}_i$$

$$y_i \sim \text{Normal}(\theta_i, \sigma_i)$$

Комментарий

Гауссовский процесс добавляет зависимость, что делает соседские школы схожими. $\sigma_{\mathcal{GP}} = 1$



Результаты и выводы

Когда гауссовские процессы хороши

- 1 Гибкая структура
- 2 Построение непростых иерархий
- 3 Предсказания для новых наблюдений

