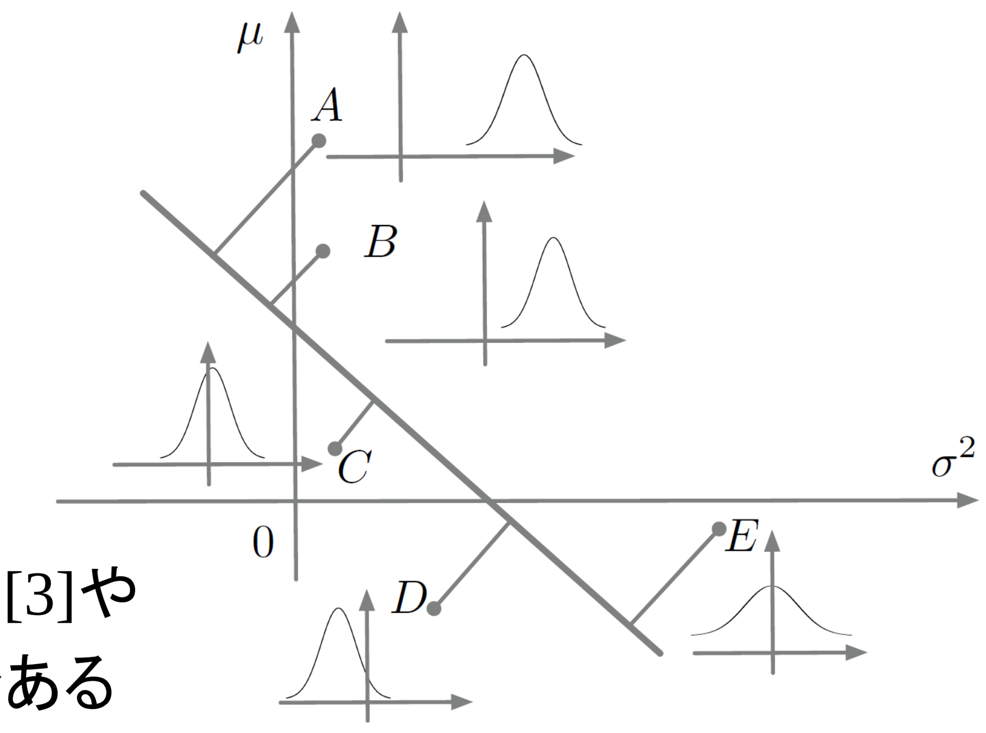
ガウス過程回帰モデルの次元圧縮法

赤穂 昭太郎　大学統計教員育成センター 特任教授

1. 確率分布パラメータの多変量解析法

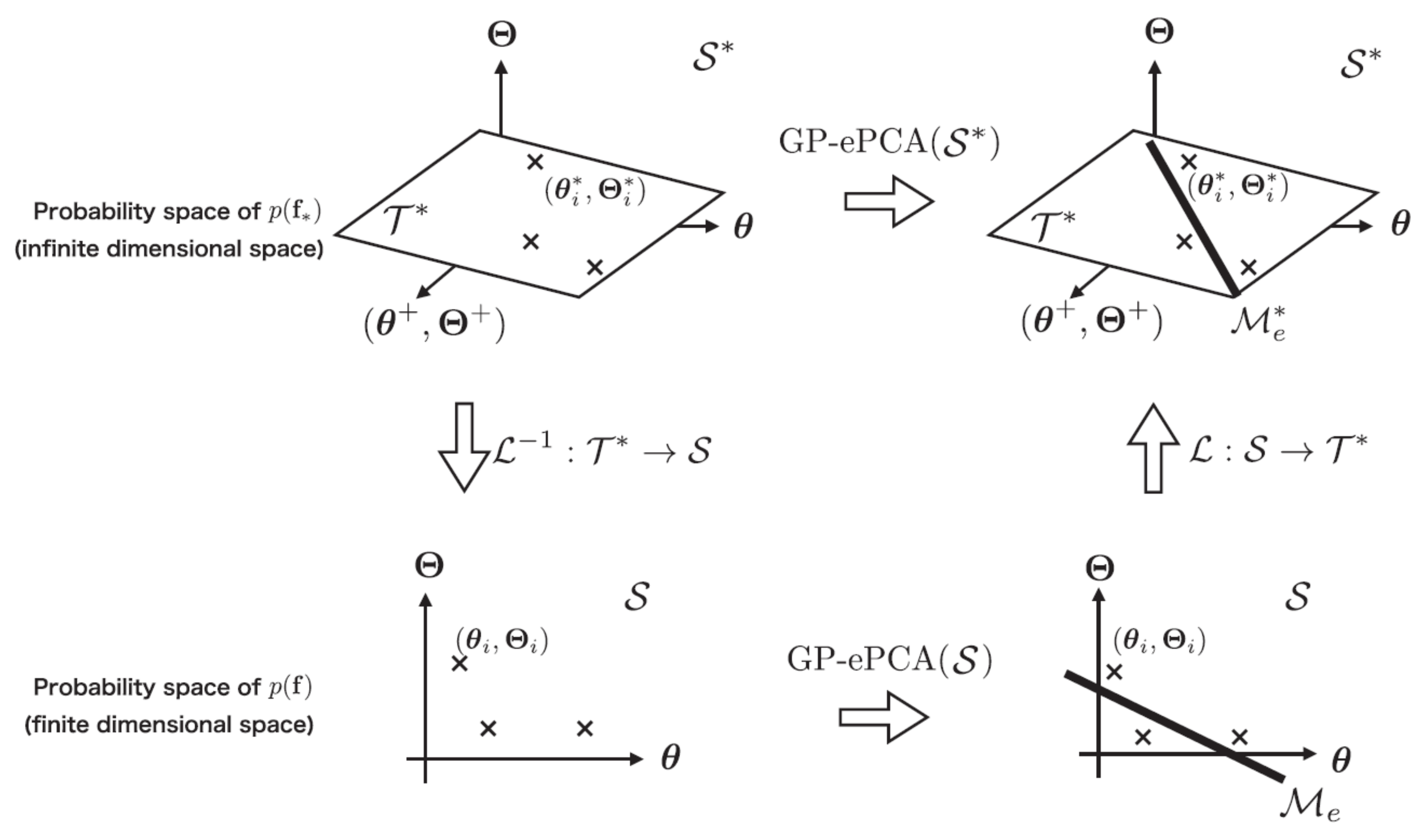
確率分布のパラメータ(例えば正規分布の期待値・分散パラメータ)が多数得られたときに,
それらの共通する低次元構造を抽出する問題を考える.
この問題の応用先として，転移学習やセンサフュージョンなどが挙げられる[1,2].
通常の主成分分析(PCA)で次元圧縮して射影すると，負の分散が現れたり,
またユークリッド距離で分布距離を測ることが妥当でない場合がある.
これまで，情報幾何学における平坦双対空間の構造を用いて有限パラメータをもつ指数分布族[3]や
その混合分布[4]などについての定式化を行ってきた．ここでは，新たに無限次元指数分布族である
ガウス過程回帰(GPR)についての定式化を行った結果[5]を報告する.



2. 主要な結果

事前分布を共有するGPR(入力点は共有していなくてよい)集合が与えられたとする.
このとき,(無限次元の)GPRの e-PCA M_e^*(下記参照)は，入力点の和集合からなる有限次元ガウス分布
の e-PCA M_e のアフィン写像 $M_e^* = L(M_e)$ として得られる．つまり，無限次元の問題を有限次元の問題に帰着して
解くことができる.

3. 言葉と記号の定義



- i 番目のGPRの入力点集合 $X^i \in R^{d\times N_i}, X = \bigcup_{i=1}^K X^i$
- X を含む任意個数(実質無限個)の検査点集合 $X^* \in R^{d\times N_*}$
- X^* 上のガウス分布の空間 S^*, X 上のガウス分布の空間 S
- X^* 上の事前分布を共有するGPRの導くガウス分布の空間 $T^* \subseteq S^*$,
- i 番目のGPRの S^* での自然パラメータ (θ_i^*, Θ_i^*), S でのパラメータ (θ_i, Θ_i^*)
- ePCA:自然パラメータで表現された データ点集合 $\{\xi_i \in \Xi\}_{i=1,\dots,K}$ に対し,
  基底 $\{u_j \in \Xi\}_{j=0,\dots,m}$ の張る平坦(自己平行)部分多様体 $M_e = \{\sum_j w_j u_j \in \Xi \mid w_j \in R\}$ で，$\sum_i KL(\xi_i, \sum_j w_{ij} u_j)$ を最小にするもの
  cf. 期待値パラメータに対して双対的に同様の部分多様体 mPCA も定義できる.

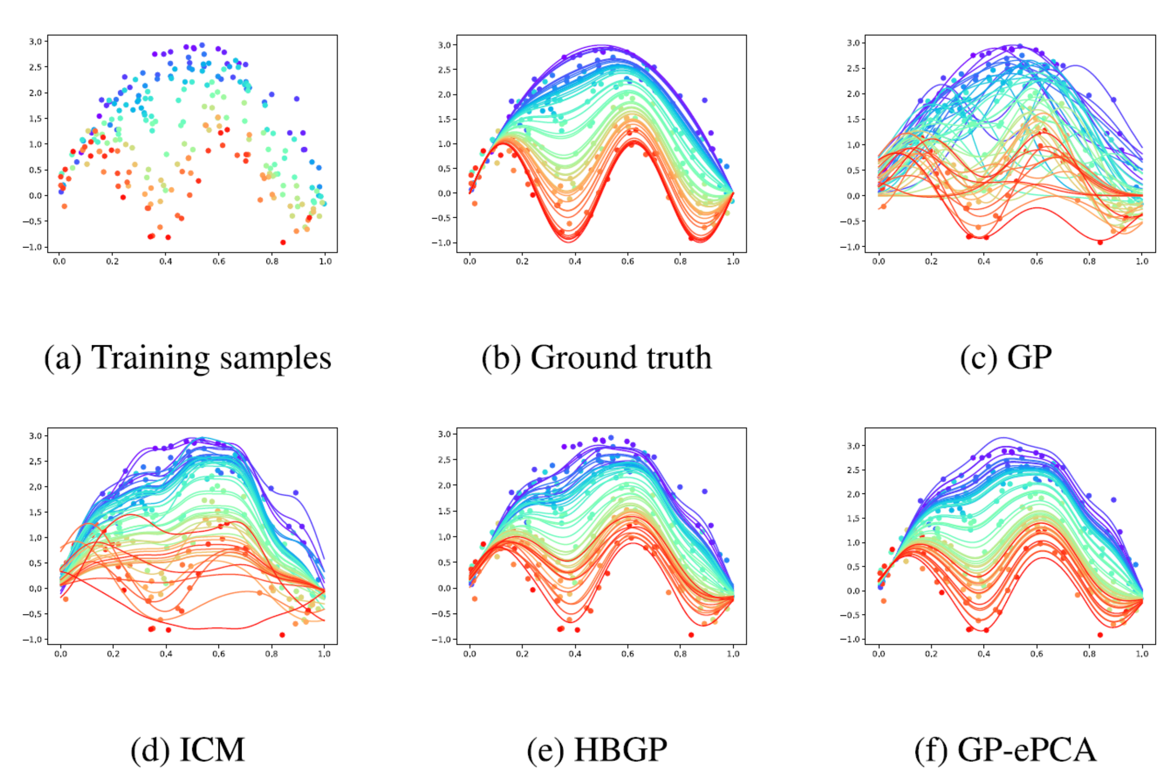
4. 証明の概略

以下の3つの補題から示される

1. $(\theta, \Theta) \in S$ から $(\theta^*, \Theta^*) \in T^*$への自然パラメータ間のアフィン変換 が具体的に構成できる(注:自然パラメータは期待値と共分散の非線形関数)
2. S 上の任意の2点間の KL ダイバージェンスと対応する T^* のKLダイバージェンスは一致する
3. $M_e^* \subset T^*$ (注:一般にアフィン部分空間上の点の ePCA がその空間内に含まれるとは限らない)

5. 数値実験の結果

人工データを用いた提案手法(GP-ePCA)の実験結果とほかの手法との比較s
(GP: 転移なし，ICM: Intrinsic Coregional Method, HBGP: 階層ベイズGP)



(a) Training samples　(b) Ground truth　(c) GP
(d) ICM　(e) HBGP　(f) GP-ePCA

6. 今後の課題

1. **事前分布を共有しない場合への拡張**
2. **学習やハイパーパラメータ推定にかかる計算量の削減(スパース化など通常のカーネル法・GPの方法は流用可能)**

参考文献

[1] 赤穂 昭太郎 , 渡辺 一帆 , 岡田 真人 (2010). 指数型分布族の空間におけるデータ解析法について, 統計数理,58(2),167-183
[2] Hino, H., Akaho, S., & Murata, N. (2022). Geometry of EM and related iterative algorithms. Information Geometry, 1-39.
[3] Akaho, S. (2004, July). The e-PCA and m-PCA: Dimension reduction of parameters by information geometry. In 2004 IEEE International Joint Conference on Neural Networks (IEEE Cat. No. 04CH37541) (Vol. 1, pp. 129-134). IEEE.
[4] Akaho, S. (2008). Dimension Reduction for Mixtures of Exponential Families. In ICANN (1) (pp. 1-10).
[5] Ishibashi, H., & Akaho, S. (2022). Principal component analysis for Gaussian process posteriors. Neural Computation, 34(5), 1189-1219.