

目次

| | | | |
|--|-----|--|--|
| ■ シリーズの刊行にあたって | iii | | |
| ■ まえがき | iv | | |
| 第 0 章 たった 5 分でガウス過程法が分かってしまう | 1 | | |
| 0.1 第 1 ステップ: 機械学習って何? | 2 | | |
| 0.2 第 2 ステップ: 回帰と最小二乗法 | 3 | | |
| 0.3 第 3 ステップ: 確率モデリングとベイズ推定 | 4 | | |
| 0.4 第 4 ステップ: ガウス分布と共分散 | 6 | | |
| 0.5 第 5 ステップ: ガウス過程とガウス過程回帰 | 7 | | |
| コラム: 関数の雲とガウス過程 | 11 | | |
| 第 1 章 線形回帰モデル | 13 | | |
| 1.1 単回帰 | 15 | | |
| 1.2 重回帰とベクトル表現 | 19 | | |
| 1.3 線形回帰モデル | 28 | | |
| 1.4* リッジ回帰 | 32 | | |
| コラム: 相関係数と回帰モデル | 37 | | |
| 第 2 章 ガウス分布 | 39 | | |
| 2.1 ガウス分布とは | 39 | | |
| 2.1.1 ガウス分布からのサンプリング | 41 | | |
| 2.1.2 線形回帰の確率モデル | 42 | | |
| 2.2 重みの事前分布とリッジ回帰 | 43 | | |
| 2.3 多変量ガウス分布 | 45 | | |
| 2.3.1 多変量ガウス分布と線形変換 | 48 | | |
| 2.3.2 多変量ガウス分布からのサンプリング | 48 | | |
| 2.3.3 多変量ガウス分布の周辺化 | 49 | | |
| 2.3.4 多変量ガウス分布の条件付き分布 | 52 | | |
| 第 3 章 ガウス過程 | 57 | | |
| 3.1 線形回帰モデルと次元の呪い | 57 | | |
| 3.2 ガウス過程 | 59 | | |
| 3.2.1 ガウス過程の意味 | 62 | | |
| 3.2.2 カーネルトリック | 63 | | |
| 3.2.3 ガウス過程の定義 | 65 | | |
| 3.2.4 ガウス過程からのサンプル | 68 | | |
| 3.3 ガウス過程とカーネル | 71 | | |
| 3.3.1 RBF カーネルと基底関数 | 71 | | |
| 3.3.2 さまざまなカーネル | 74 | | |
| 3.3.3 観測ノイズ | 79 | | |
| 3.4 ガウス過程回帰モデル | 81 | | |
| 3.4.1 ガウス過程回帰の予測分布 | 81 | | |
| 3.4.2 ガウス過程回帰の計算 | 86 | | |
| 3.4.3 ガウス過程回帰の要素表現 | 88 | | |
| 3.5 ガウス過程回帰のハイパーパラメータ推定 | 89 | | |
| 3.6* ガウス過程回帰の一般化 | 95 | | |
| 3.6.1 ロバストなガウス過程回帰 | 95 | | |
| 3.6.2 ガウス過程識別モデル | 97 | | |
| 3.6.3 ポアソン回帰モデル | 99 | | |
| コラム: ニューラルネットワークとガウス過程 | 102 | | |
| 第 4 章 確率的生成モデルとガウス過程 | 107 | | |
| 4.1 確率変数と確率的生成モデル | 108 | | |
| 4.1.1 確率変数 X と確率分布 $p(X)$ | 108 | | |
| 4.1.2 同時確率 $p(X, Y)$ と周辺化 | 112 | | |
| 4.1.3 独立性: $p(X, Y) = p(X)p(Y)$ と条件付き独立性: $p(X, Y Z) = p(X Z)p(Y Z)$ | 116 | | |
| 4.1.4 ガウス過程回帰モデルのグラフィカルモデル | 119 | | |
| 4.2 最尤推定とベイズ推定 | 123 | | |
| 4.2.1 確率的生成モデルと最尤推定 | 123 | | |
| 4.2.2 確率的生成モデルとベイズ推定 | 127 | | |
| 4.3 確率分布の表現 | 132 | | |
| 4.3.1 ノンパラメトリックモデルとは | 132 | | |
| 4.3.2 確率分布を標本で表現する | 133 | | |
| コラム: ブラウン運動とガウス過程 | 141 | | |
| 第 5 章 ガウス過程の計算法 | 143 | | |
| 5.1 ガウス過程回帰の計算コスト | 143 | | |
| 5.2 補助変数法 | 146 | | |
| 5.2.1 部分データ法 | 146 | | |
| 5.2.2 補助入力点と補助変数法の計算 | 147 | | |
| 5.2.3 補助変数法の計算コスト | 155 | | |
| 5.2.4 補助入力点の配置 | 156 | | |
| 5.3 変分ベイズ法と確率的勾配法 | 158 | | |
| 5.3.1 変分ベイズ法と独立分解仮定 | 158 | | |

| | | |
|-----------------|--------------------------|-----|
| 5.3.2 | 変分ベイズ法を補助変数法に適用する | 164 |
| 5.3.3 | ミニバッチと確率的勾配法 | 167 |
| 5.4 | 格子状補助入力点配置にもとづくガウス過程法計算 | 167 |
| 5.4.1 | クロネッカー法 | 169 |
| 5.4.2 | テブリッツ法 | 172 |
| 5.4.3 | 局所的カーネル補間 | 173 |
| 5.4.4 | KISS-GP 法とその演算量 | 175 |
| | | |
| 第 5 章 | ガウス過程の適用 | 177 |
| 6.1 | クリギングと空間統計学 | 177 |
| 6.2 | ベイズ最適化 | 181 |
| 6.2.1 | ベイズ最適化とは | 181 |
| 6.2.2* | 関連度自動決定 (ARD) | 184 |
| 6.2.3* | 行列微分の公式と ARD アルゴリズムの導出 | 185 |
| | | |
| 第 6 章 | ガウス過程による教師なし学習 | 189 |
| 7.1 | ガウス過程潜在変数モデル (GPLVM) | 189 |
| 7.1.1 | GPLVM の生成モデル | 192 |
| 7.1.2 | GPLVM の目的関数 | 193 |
| 7.1.3 | GPLVM の学習 | 195 |
| 7.2 | ガウス過程潜在変数モデルの性質 | 198 |
| 7.3* | ガウス過程潜在変数モデルの拡張 | 201 |
| 7.3.1 | 無限ワープ混合モデル (IWMM) | 201 |
| 7.3.2 | ガウス過程力学モデル (GPDM) | 204 |
| 7.4* | 潜在的ガウス過程のサンプリング | 206 |
| 7.4.1 | ポアソン点過程と Cox 過程 | 206 |
| 7.4.2 | 楕円スライスサンプリング | 210 |
| | | |
| 付録 | 付 録 | 215 |
| A.1 | 行列の分割と逆行列 | 215 |
| A.2 | 巡回行列の固有値が離散フーリエ変換で得られること | 215 |
| A.3 | 行列微分の計算 | 217 |
| | | |
| 文献案内 | | 220 |
| ガウス過程のためのソフトウェア | | 222 |
| あとがき | | 223 |
| 参考文献 | | 225 |
| 索引 | | 232 |