

■ 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