Statisztikai tanulás az idegrendszerben, 2018.

Algoritmikus következtetés valószínűségi modellekben

Bányai Mihály
banyai.mihaly@wigner.mta.hu
http://golab.wigner.mta.hu/people/mihaly-banyai/

Introduction

elméleti

Knowledge representation

Probabilistic models

Bayesian behaviour

Approximate inference I (computer lab)

kognitív

Vision I

Approximate inference II: Sampling

Measuring priors

neurális

Neural representation of probabilities

Structure learning

Vision II

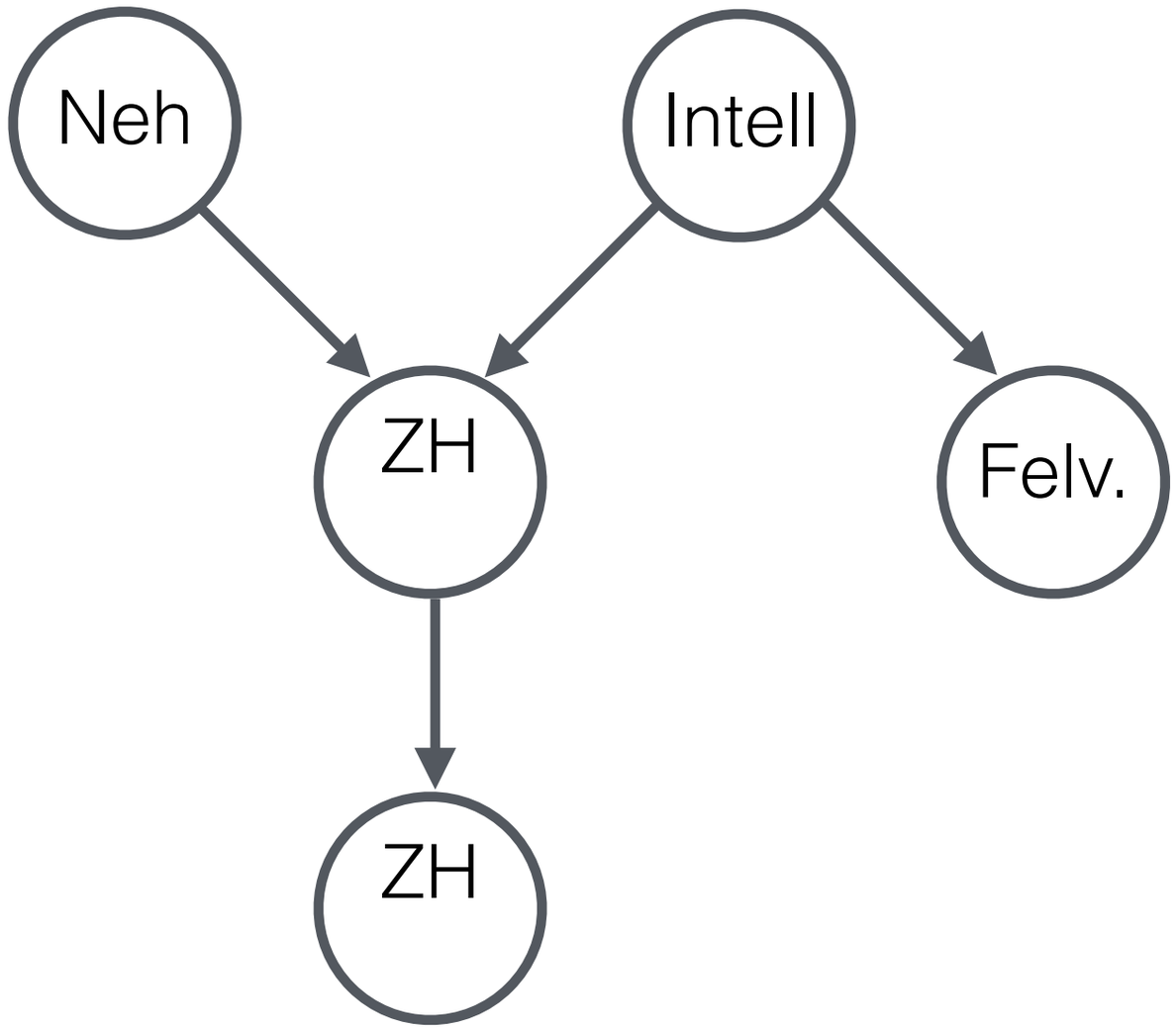
Decision making and reinforcement learning

Generatív modellek

- Mit jelentenek a nyilak?

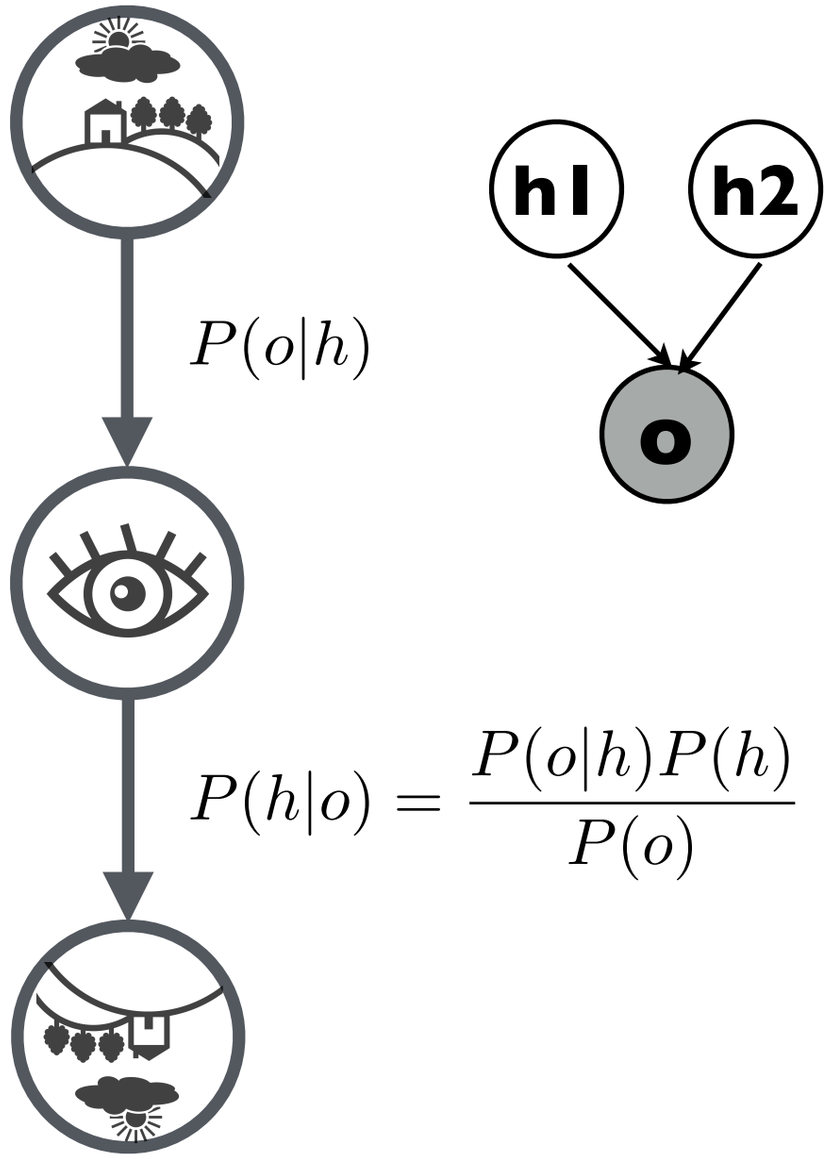
- Generatív irányban a függetlenség

- a kauzalitás intuíciója

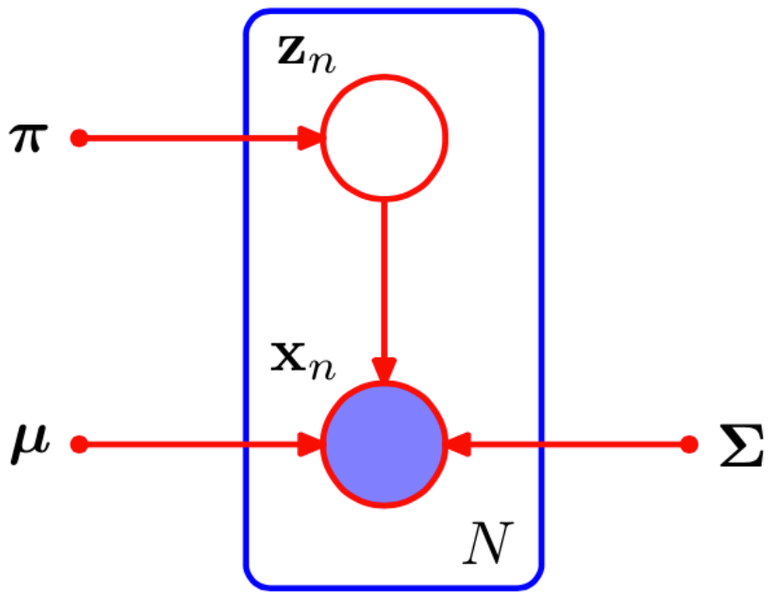


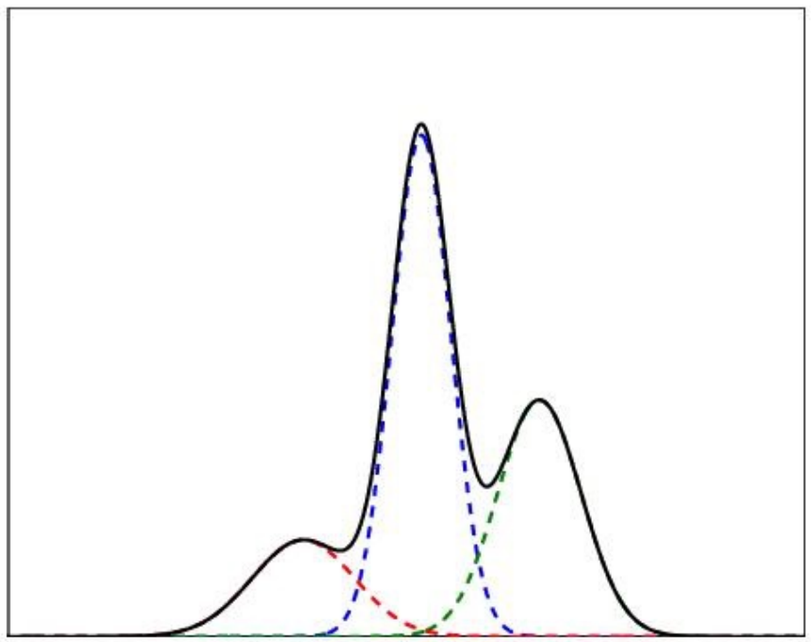
Megfigyelt és rejtett változók

- bizonyos változókról rendelkezünk adatokkal
  - jelölés: sötét kör
- a többi csak a jelenség struktúrájáról alkotott feltételezéseinket reprezentálja
  - látens, rejtett változók: üres kör
- Mire lehetünk kíváncsiak
  - poszterior eloszlás a látensek fölött
  - marginális poszteriorok
  - a prediktív eloszlás: a megfigyelt változók marginális eloszlása



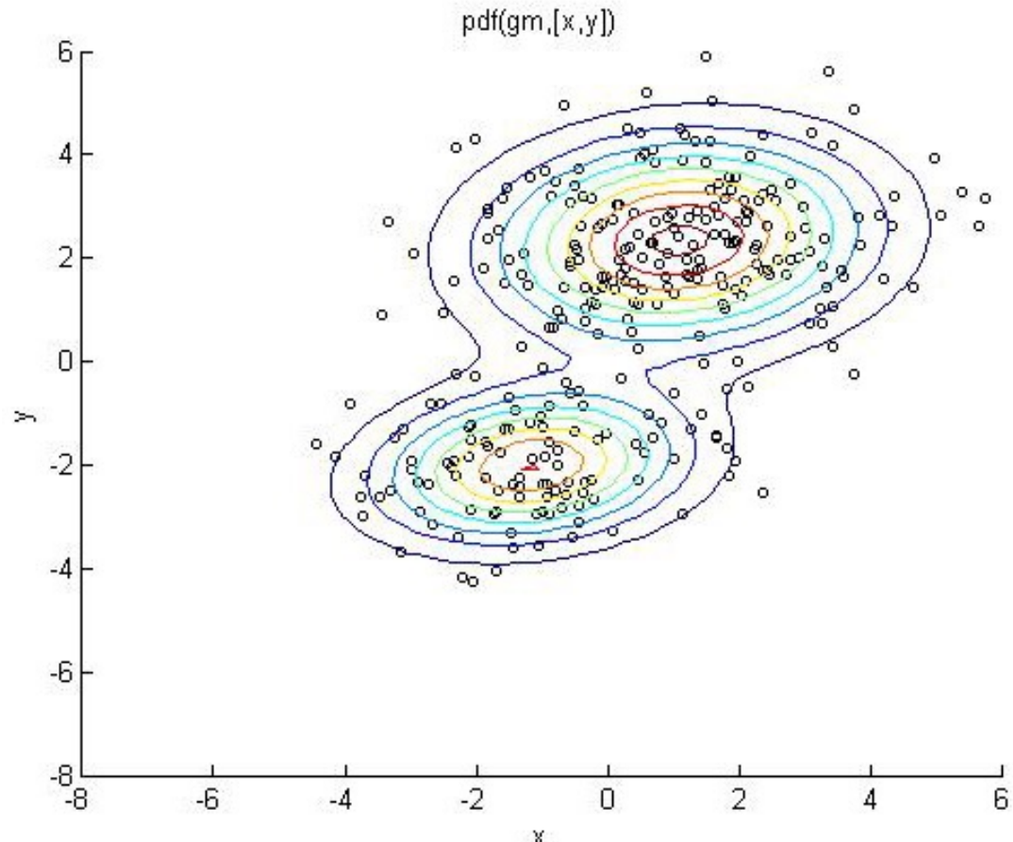
Keverékmodellek





$$p(z) = Mult(z; \pi)$$

$$p(x \mid z) = \mathcal{N}(x; \mu_z, \Sigma_z)$$



notebook 1

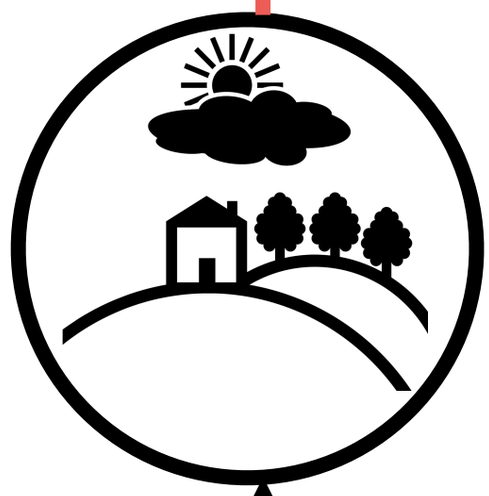
érzékelés

percepció (észlelés)

jelenlegi megfigyelésből kikövetkeztetett információ

világ tanult szabályosságai

múltbeli események



környezet

döntéshozás → izomvezérlés

cselekvés

Az inferencia nehézségei

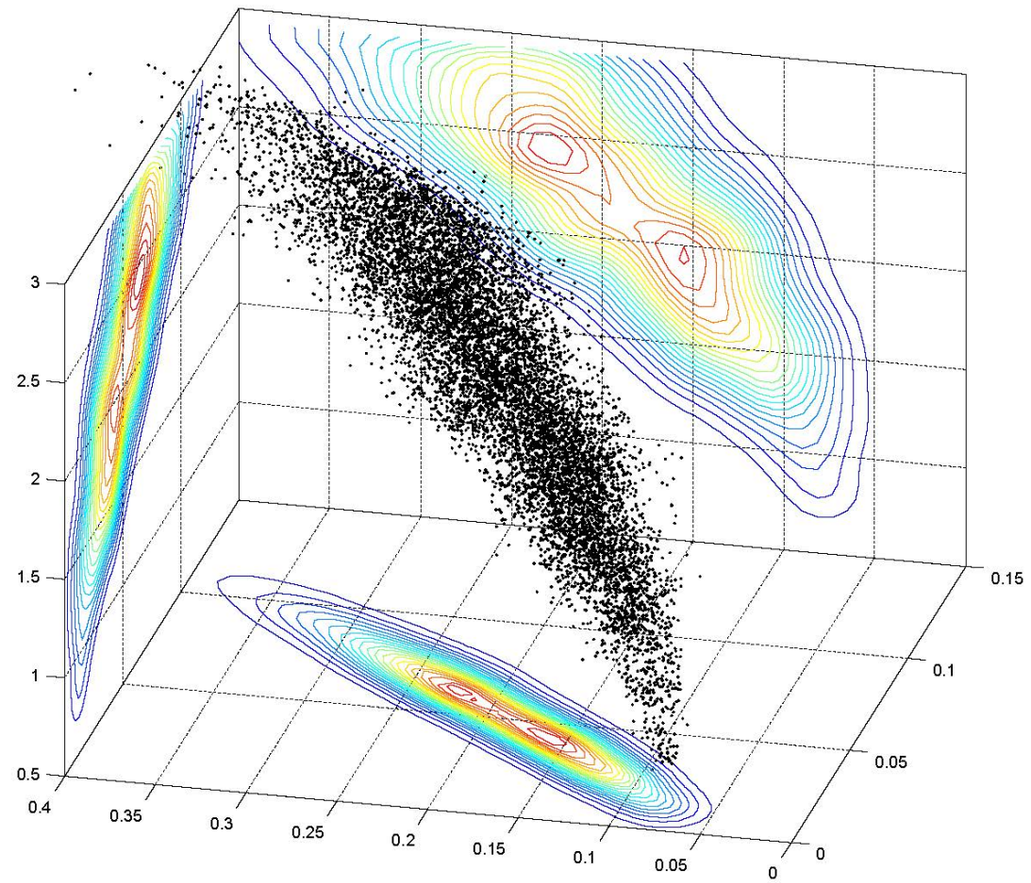
- Zárt alakban nem megadható eloszlások
  - integrálok, marginalizáció
  - szorzatalakok Bayes tétel sok megfigyelésen történő alkalmazásából

Poszterior közelítő becslése

- Sztochasztikus
  - mintákat veszünk belőle
  - véletlenszámgenerátorra van szükség
  - a minták számától függ a pontosság
- Determinisztikus
  - egyszerűbben kezelhető eloszlásokkal közelítjük
  - nem használunk véletlenszámokat
  - a közelítő eloszlás formájától függ a pontosság

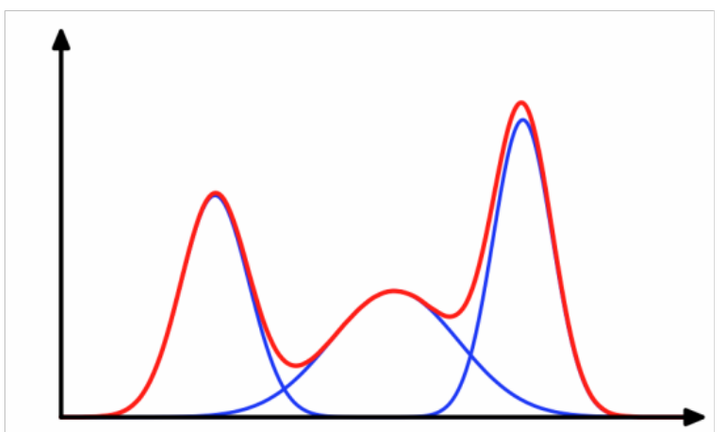
Sztochasztikus becslés

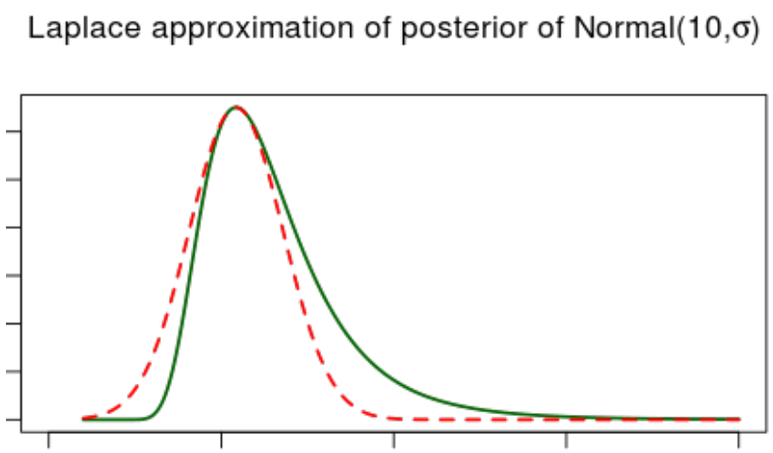
- A poszterior eloszlást az abból vett mintákkal ábrázoljuk
- Aszimptotikusan egzakt
- Könnyen implementálható
- Számításigényes lehet
- A következő órán bővebben

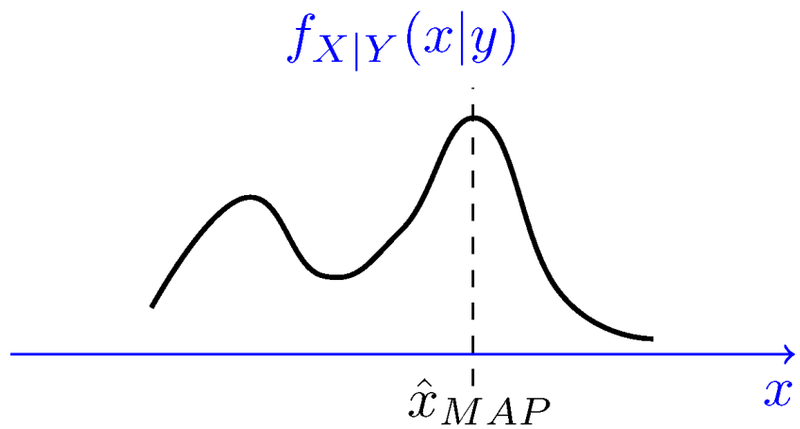


Determinisztikus közelítés - variációs módszerek

- A kérdés, hogy mennyi információt dobunk el a poszteriorból?
  - Gyakran a függőségek teszik nehézzé az inferenciát -> faktorizált közelítés: $p(h1,h2 \mid o) \approx p(h1 \mid o)\, p(h2 \mid o)$
  - Jól kezelhető parametrikus eloszlásokkal is közelíthetünk
    - bonyolultabbakkal, pl többkomponensű keverékeloszlások
    - egyszerűbbekkel, pl Gauss (Laplace-közelítés)
- Egyetlen jellemző értéken kívül mindent eldobunk -> delta eloszlással közelítünk -> pontbecslés







Probabilisztikus programozási nyelvek

- Deklaratív nyelvek (mint pl. a PROLOG)
- A generatív modellt és a megfigyeléseket kell specifikálni
- Látens változók poszterior eloszlására vonatkozó inferencia nyelvi elemként használható
- Ismertebb példák: BUGS, Church, Stan, Edward

notebook 2

érzékelés

jelenlegi
megfigyelésből
kikövetkeztetett
információ

világ tanult
szabályosságai

múltbeli
események

tanulás

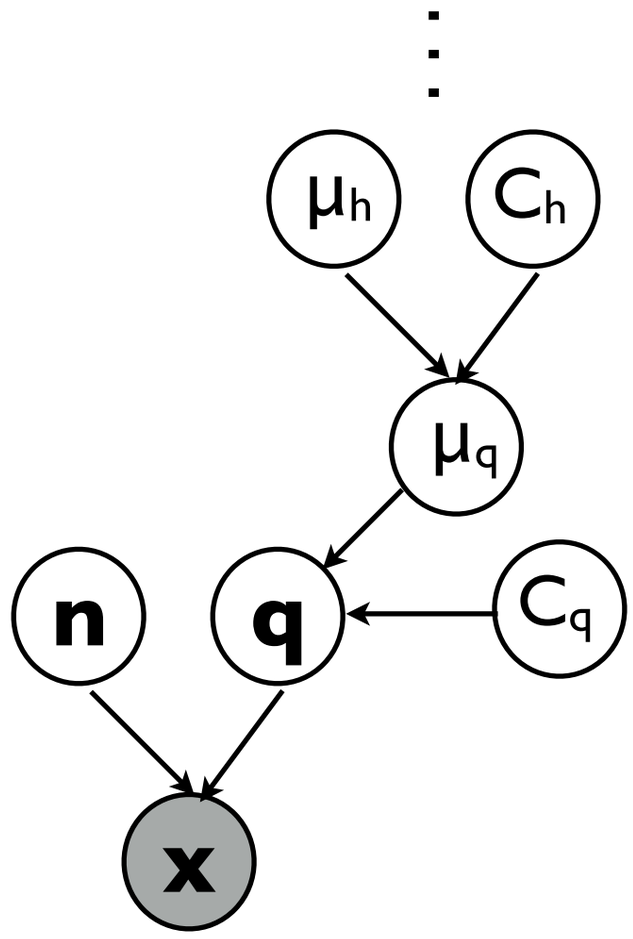
környezet

döntéshozás → izomvezérlés

cselekvés

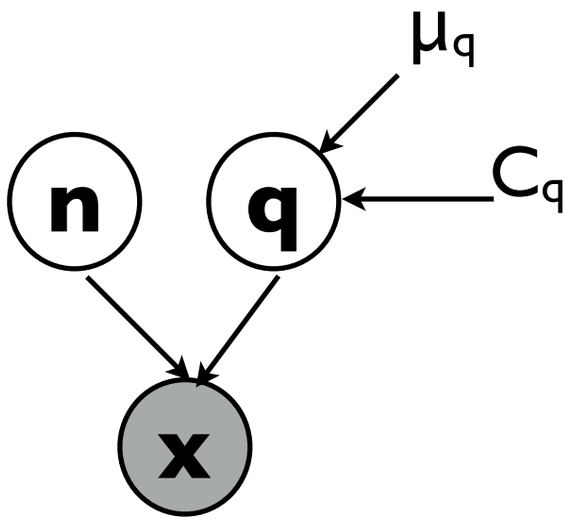
Paraméterek mint valószínűségi változók

- a valószínűségi modelben specifikálnom kell a változók prior és kondicionális eloszlásait
  - ezek gyakran parametrikus eloszláscsaládok példányai lesznek, pl. Gauss, Poisson, stb
  - ezek paraméterei szintén látens változók, amennyiben nem fixálom az értéküket teljesen
- a változó prior eloszlásának ismét lesznek paraméterei -> hierarchikus modell
  - valahol meg kell állnom
- vagy olyan priort választok, amiben nincs paraméter, illetve ami mégis, azt nem illesztem az adatra, hanem a világ konstans tulajdonságának tételezem fel az általam választott értékét



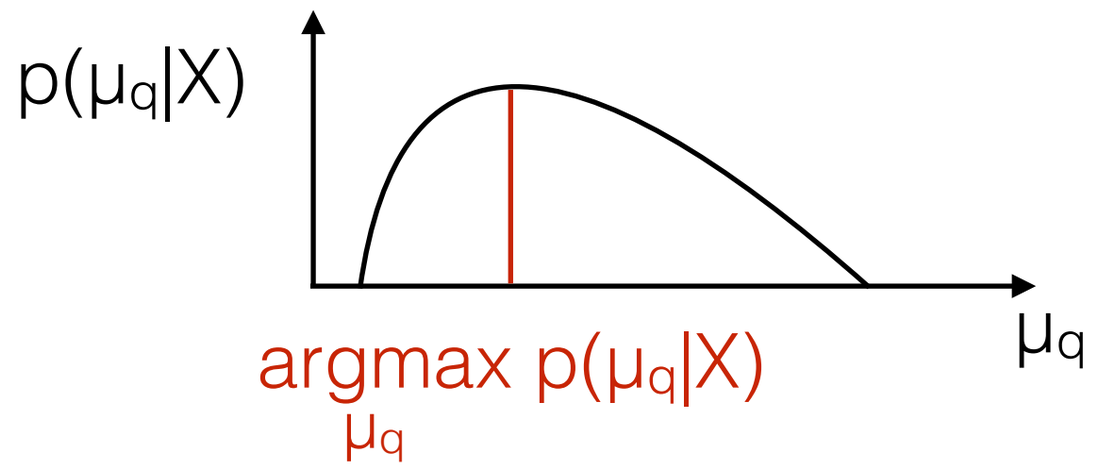
Pontbecslések

- Az inferencia általában a poszterior keresése
  - ha nem kell a teljes poszterior, csak egy pontbecslés, akkor szélsőértékkereséssé redukálhatom
  - ha nincs prior: maximum likelihood
- Hogyan változik pontbecslésnél a prediktív eloszlás bizonytalansága?



$$p(\mu_q, C_q \mid X) \sim p(X \mid \mu_q, C_q)\cancel{p(\mu_q, C_q)}$$

konstans



Maximum likelihood tanulás

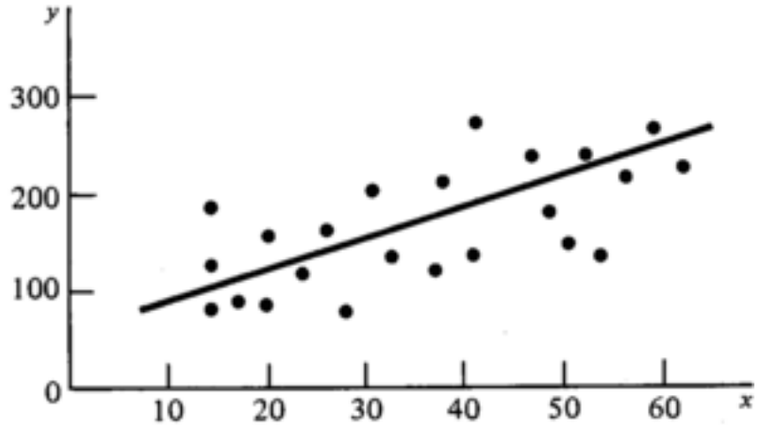
- Általában több mérésünk van a megfigyelt változókról, amiket függetlennek tekintünk
- A likelihood faktorizálódik $$p(X \mid \theta) = \prod_{n=1}^{N} p(x_n \mid \theta)$$
- A log-likelihood maximumát keressük
  - numerikusan stabilabb $$\ln p(X \mid \theta) = \sum_{n=1}^{N} \ln p(x_n \mid \theta)$$
  - exponenciális formájú eloszlásoknál egyszerűbb
- Ki kell integrálni a látens változókat (várható érték)

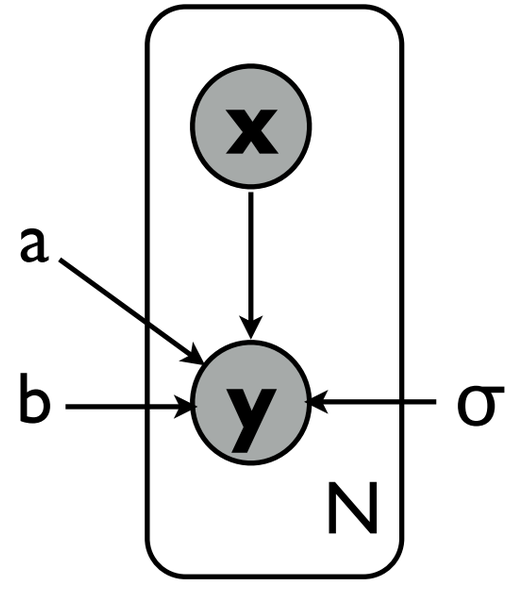
$$p(X \mid \theta) = \int_{-\infty}^{\infty} p(X \mid Z, \theta) p(Z \mid \theta) \mathrm{d}Z$$

Mikor hasznosak a pontbecslések?

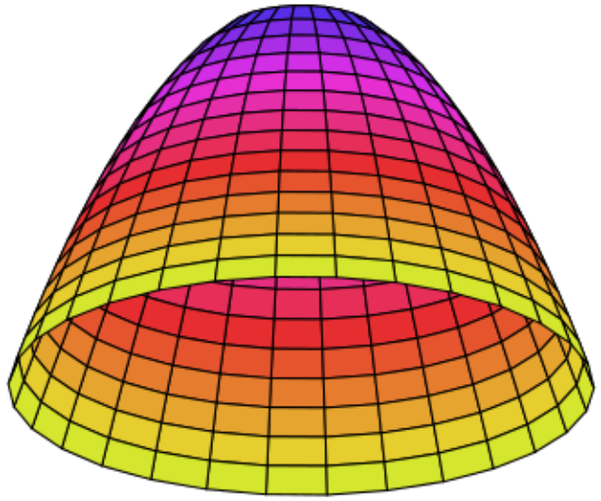
- Ha jellemző a becsült pont értéke a poszterior alakjára
  - unimodális
  - szimmetriája a pontbecslés természetével egyező

Példa - lineáris regresszió





- Nincs rejtett változó a paramétereken kívül
- Gauss maximum likelihood = négyzetes hiba
- polinomokra változtatás nélkül kiterjeszthető



$$p(y \mid x, a, b, \sigma) = \mathcal{N}(y; ax + b, \sigma)$$

$$\ln p(Y \mid X, a, b, \sigma) \sim -\sum_{n=1}^{N} \left[(ax_n + b) - y_n\right]^2$$

Amikor a pontbecslés is nehéz

- Általában itt is igaz, hogy vannak olyan láttens változók amelyek felett marginalizálni akarunk, aminek lehet, hogy nincs zárt alakja

- vagy az *argmax* nem fejezhető ki zárt alakban

Algoritmikus becslés

- ha a pontbecslés nem adható meg egzaktul, megfogalmazhatjuk optimalizációs problémaként, amelyben a hibafüggvény pl. a negatív log-likelihood

- a becslőalgoritmusok nem (csak) a valószínűségszámítás szabályait használják

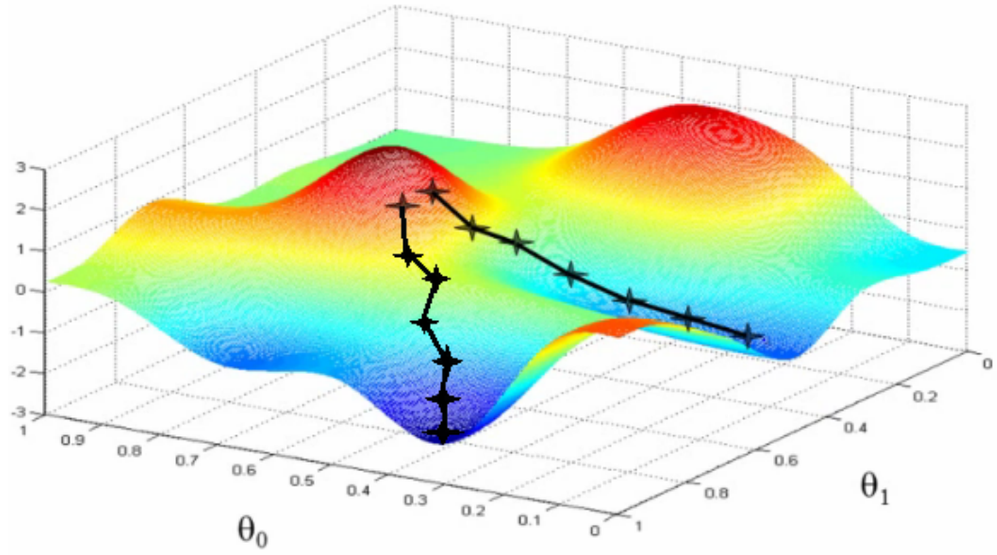
- sokszor nagyon hatékonyak az iteratív algoritmusok, akár zárt formájú megoldásoknál is gyorsabbak lehetnek nagy dimenziójú modellekre

- viszont sokszor nem tudjuk levezetni, hogy mennyire pontosan találják meg a globális maximumot

Gradiens-módszer

- használjuk ki azt az információt, hogy adott pontban merre emelkedik a célfüggvény (vagy csökken a hibafüggvény), pl likelihood

$$\theta_{t+1} = \theta_t + \varepsilon \frac{\partial}{\partial \theta} \ln p(X \mid \theta_t)$$



- lokális szélsőértéket talál
- a tanulási ratât megfelelően be kell állítani
- kiterjesztések
  - második derivált, Hessian-based módszerek
  - lendületet is definiálhatunk a paramétertérbeli mozgáshoz

notebook 3

Honnan tudjuk, hogy az algoritmus eredménye hasznos?

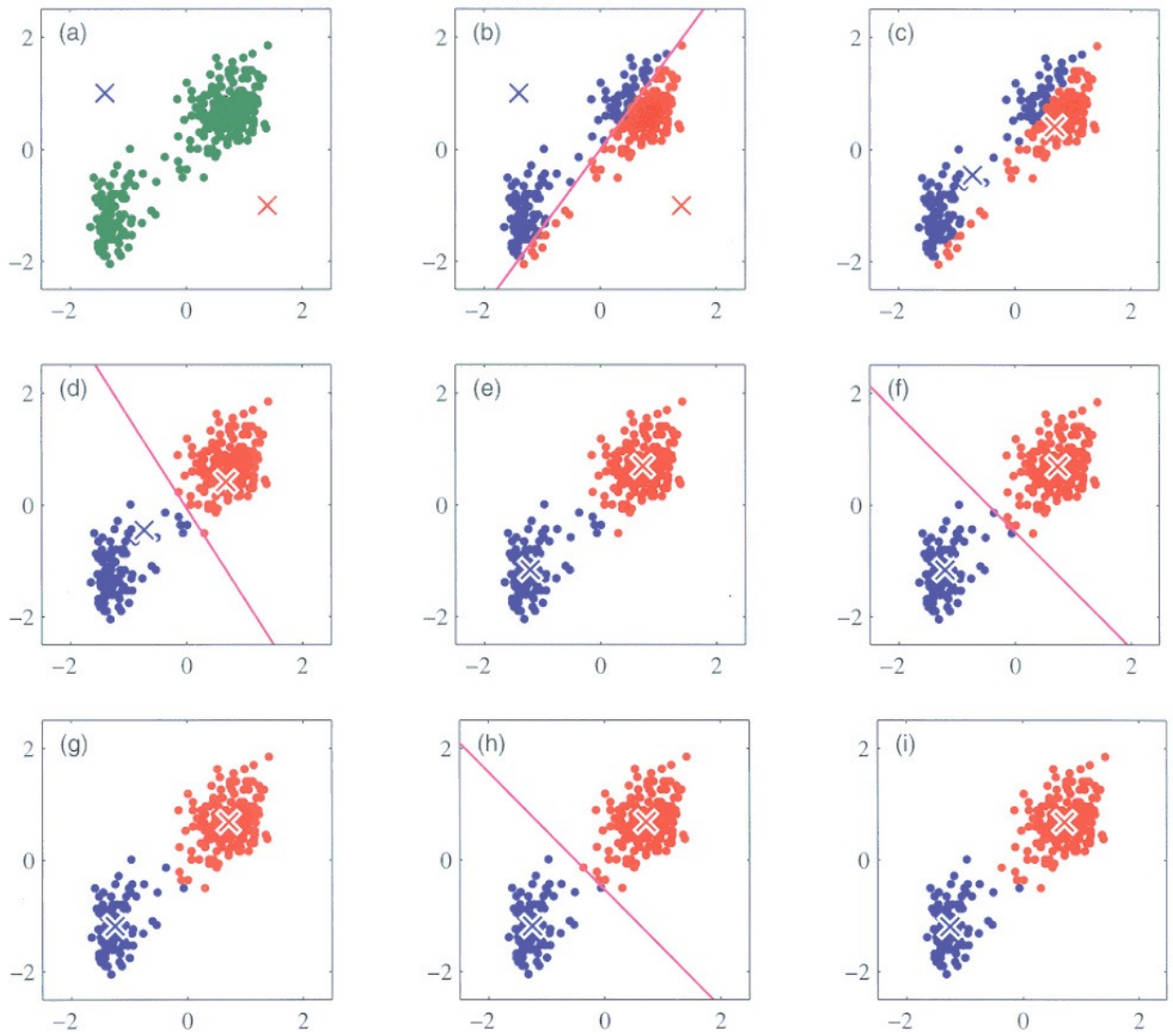
- Konvergencia
  - likelihoodban
  - paraméterek értékeiben
- Az illesztett modell predikciói beválnak
- Honnan tudjuk, hogy jól választottuk meg az olyan hiperparamétereket, mint pl. a komponensek száma?

Hogyan tehetünk predikciókat az illesztett modellel?

- A jövőre a prediktív eloszlásból
- A látens változók értékeire a poszteriorból
- Ha agykérgi tanulórendszer modelljét alkotjuk, akkor el kell döntenünk, hogy
  - a paraméterillesztési algoritmust biofizikai folyamatok predikciójára akarjuk használni
  - vagy az algoritmust csak arra használjuk, hogy eljussunk egy optimális modellig, és csak azt feltételezzük, hogy az agy is megteszi ezt valahogy, de nem feltétlenül így

Algoritmikus paraméterbecslés a gradiens-módszeren túl
K-means klaszterezés

- Klaszterközéppontokat keresünk
- Kiválasztjuk a klaszterek számát
- Véletlenszerűen inicializáljuk a középpontokat
- Hozzárendeljük a megfigyeléseket a legközelebbi klaszterközépponthoz
- Elmozgatjuk a klaszterközéppontokat úgy, hogy a négyzetes távolság a legkisebb legyen a hozzárendelt pontoktól
- Addig ismételjük, amíg átsorolás történik
- Mi az ekvivalens valószínűségi modell?



Expectation Maximization

- Általánosítsuk a k-means ötletét
    - complete-data likelihood: mintha minden változó megfigyelt lenne

$$p(X, Z \mid \theta)$$

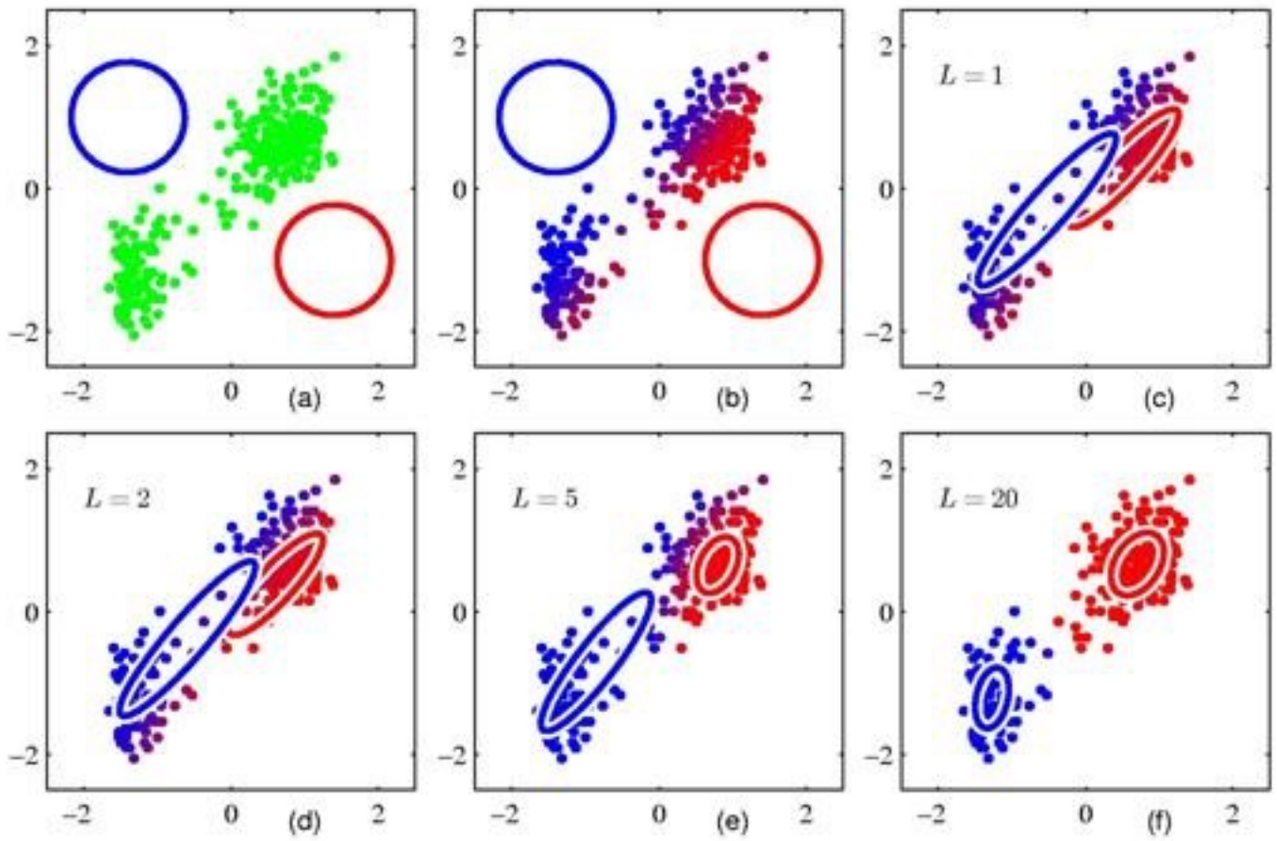
- Az algoritmus kétfajta lépést váltogat
    - E: megbecsüljük a látens változók poszterior eloszlását a paramétereket fixen tartva

$$p(Z \mid X, \theta_t)$$

    - M: megbecsüljük a paraméterek értékét az becsült poszterior alapján
        - a CDL logarimusának vesszük a poszterior feletti várható értékét, és ezt maximalizáljuk a likelihood helyett

$$\theta_{t+1} = argmax_\theta \int_{-\infty}^{\infty} p(Z \mid X, \theta_t) \ln p(X, Z \mid \theta) \mathrm{d}Z$$

EM keverékmodellre



- E: mi a poszterior valószínűsége, hogy egy adott pontot egy adott komponens generált a jelenleg becsült paraméterekkel
  - a komponensek pontokért viselt “felelőssége”
- M: a felelőségekkel súlyozott pontokra mi lenne a legjobb mean és kovariancia
  - keverési együtthatók: a felelősségek összegének aránya a pontok számához

Házi feladat

- Egészítsd ki az órán használt 1-es notebookot az EM-algoritmussal történő paraméterbecsléssel
  - miután szintetikus adatokat generáltál a modellből, a paramétereit állítsd át véletlen értékekre
  - implementáld az EM-algoritmust, ahogy C. M. Bishop: Pattern Recognition and Machine Learning c. könyvének megfelelő, a tárgyhonlapról letölthető fejezetében le van írva
  - hasonlítsd össze az eredményt az adatok generálásához ténylegesen használt paraméterekkel
- Eredményedet illusztráld