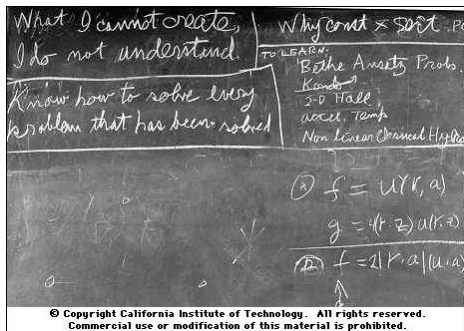


Порождающие и разделяющие модели

Московский Физико-Технический Институт

2021

Идея порождающих (генеративных) моделей

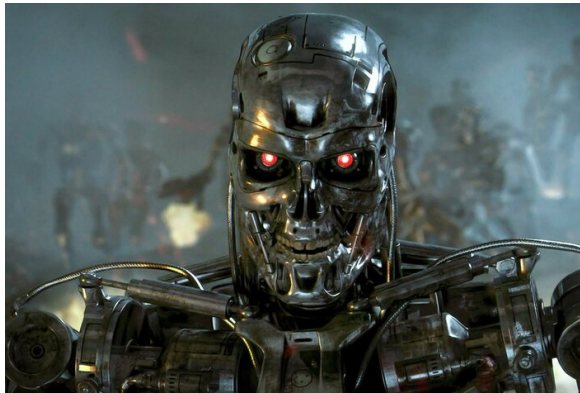


Фейнман: “Чего не могу воссоздать, того не понимаю.”

Идея разделяющих (дискриминативных) моделей



Платон: *“Человек — двуногое животное без перьев”*



Иногда проще решить целевую задачу (например, классификации), чем описать объект.

Генеративные и дискриминативные модели

Разделяющие модели

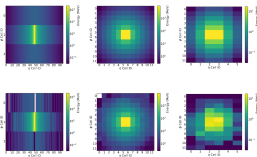
Моделируют: $p(y|x)$.

Порождающие модели

Моделируют: $p(y, x)$.

Порождающие модели:

- Порождение новых элементов выборки (когда генерация — самоцель)
- Создание синтетических данных для обучения/дообучения
- Получение скрытых свойств выборки (например, через латентные переменные)



Выбор модели: связанный байесовский вывод

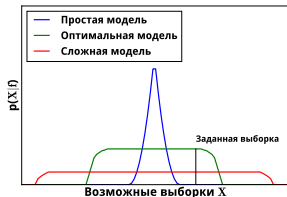
Первый уровень: выбираем оптимальные параметры:

$$\mathbf{w} = \arg \max \frac{p(\mathcal{D}|\mathbf{w})p(\mathbf{w}|\mathbf{h})}{p(\mathcal{D}|\mathbf{h})},$$

Второй уровень: выбираем модель, доставляющую максимум обоснованности модели.

Обоснованность модели ("Evidence"):

$$p(\mathcal{D}|\mathbf{h}) = \int_{\mathbf{w}} p(\mathcal{D}|\mathbf{w})p(\mathbf{w}|\mathbf{h})d\mathbf{w}.$$



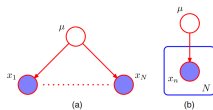
Что такое \mathcal{D} для генеративной и дискриминативной модели? И почему?

Plate notation

Plate notation — формат представления вероятностных моделей, альтернативный вероятностным графам.

Элементы:

- Белые кружки (случайные величины);
- Серые кружки (наблюдаемые реализации случайной величины);
- Маленькие кружки (неслучайные величины);
- Плитки (дублирование вероятностного вывода).



DAG и Plate notation (Bishop)

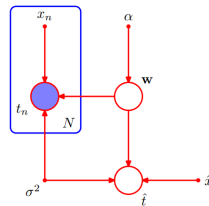
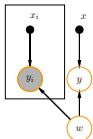


Plate notation для модели регрессии (Bishop)

Plate notation: дискриминативные и генеративные модели

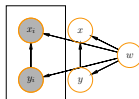
Дискриминативная модель:

- Порождается (или задан!) x
- Порождается w
- Порождается $Y \sim p(y|X, w)$



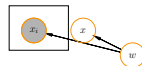
Генеративная модель:

- Порождается y
- Порождается w
- Порождается $x \sim p(X|y, w)$



Генеративная модель без учителя:

- Порождается w
- Порождается $x \sim p(X|w)$



Генеративные модели и обучение без учителя

Всегда ли генеративные модели обучаются без учителя?

Генеративные модели и обучение без учителя

Всегда ли генеративные модели обучаются без учителя?

Нет! Пример: линейные классификаторы

Логистическая регрессия:

$$E(y | \mathbf{X}) \equiv g^{-1}(\mathbf{X}\mathbf{w}),$$

$$g^{-1}(x) \frac{e^x}{1 + e^x} \in [0, 1]$$

Функция, задающая правило классификации, имеет форму сигмоиды.

Генеративная модель:

$$p(y = 1 | x, w) = \frac{p(x | w, y = 1)p(y = 1)}{\sum_{k=0}^1 p(x | w, y = k)p(y = k)},$$

$$p(x | w, y = k) \sim \mathcal{N}(w_m^k, w_s^k).$$

Функция, задающая правило классификации, имеет форму сигмоиды.

Discriminative + generative

Наивный подход: введем априорное распределение на классы

$$p(\mathbf{x}, y | \mathbf{w}) = p(y | \mathbf{w}_y) p(\mathbf{x} | y, \mathbf{w}_x).$$

Два вида оптимизации:

$$L_G = p(\mathbf{w}) \prod_{\mathbf{x}, y} p(\mathbf{x}, y | \mathbf{w}),$$

$$L_D = p(\mathbf{w}) \prod_{\mathbf{x}, y} p(y | \mathbf{x}, \mathbf{w}).$$

Можем комбинировать эти слагаемые:

$$\lambda L_G + (1 - \lambda) L_D \rightarrow \max.$$

Оптимизация эвристична, не соответствует ни оптимизации ML, ни оптимизации MAP.

Discriminative + generative

(Bishop et al., 2007): введем две вероятностные модели: “дискриминативную” и “генеративную”:

$$p(\mathbf{x}, y | \mathbf{w}_G, \mathbf{w}_D) = p(y | \mathbf{x}, \mathbf{w}_D) p(\mathbf{x} | \mathbf{w}_G) p(\mathbf{w}_G, \mathbf{w}_D).$$

Максимизация:

$$p(\mathbf{w}_G, \mathbf{w}_D) \prod_{\mathbf{x}, y} p(y | \mathbf{x}, \mathbf{w}_D) p(\mathbf{x} | \mathbf{w}_G).$$

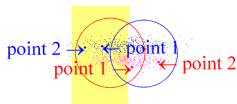
Как назначить $p(\mathbf{w}_G, \mathbf{w}_D)$?

- $p(\mathbf{w}_G, \mathbf{w}_D) = p(\mathbf{w}_G)p(\mathbf{w}_D)$: получаем оптимизацию L_D ;
- $p(\mathbf{w}_G, \mathbf{w}_D) = p(\mathbf{w}_G)\delta(\mathbf{w}_G - \mathbf{w}_D)$: получаем оптимизацию L_G ;
- Компромисс: $p(\mathbf{w}_G, \mathbf{w}_D) \propto p(\mathbf{w}_G)p(\mathbf{w}_D)\exp(-\frac{1}{2\sigma^2}\|\mathbf{w}_G - \mathbf{w}_D\|^2)$.

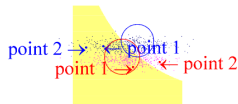
Discriminative + generative

(Bishop et al., 2007): пример разных комбинаций генеративной и дискриминативной модели для синтетической выборки. Размечено только по 2 точки каждого класса.

$\alpha = 0$ - generative case



$\alpha = 0.4$



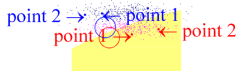
$\alpha = 0.6$



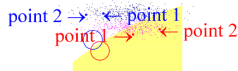
$\alpha = 0.7$



$\alpha = 0.8$



$\alpha = 1$ - discriminative case



Задача выбора модели: revisited

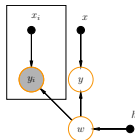
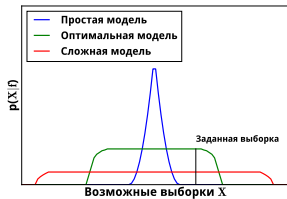
Первый уровень: выбираем оптимальные параметры:

$$\mathbf{w} = \arg \max \frac{p(\mathcal{D}|\mathbf{w})p(\mathbf{w}|\mathbf{h})}{p(\mathcal{D}|\mathbf{h})},$$

Второй уровень: выбираем модель, доставляющую максимум обоснованности модели.

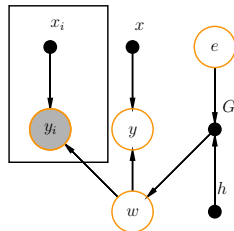
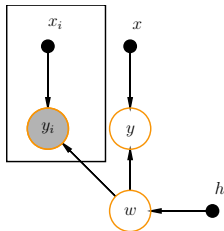
Обоснованность модели (“Evidence”):

$$p(\mathcal{D}|\mathbf{h}) = \int_{\mathbf{w}} p(\mathcal{D}|\mathbf{w})p(\mathbf{w}|\mathbf{h})d\mathbf{w}.$$



Задача выбора модели: revisited

Можно ли задать порождение параметров модели как еще одну модель?



Выбор модели: генеративный подход

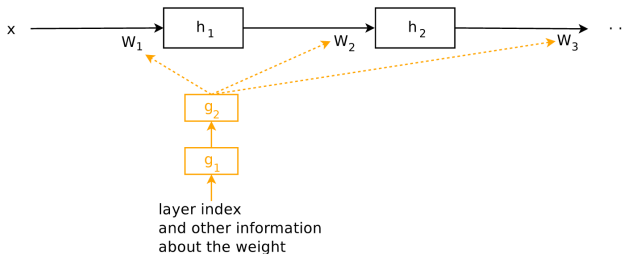
Определение

Пусть задано множество Λ .

Гиперсеть — это параметрическое отображение из множества Λ во множество параметров \mathbb{R}^n модели f :

$$G : \Lambda \times \mathbb{R}^u \rightarrow \mathbb{R}^n,$$

где \mathbb{R}^u — множество параметров гиперсети.



Выбор модели: дискриминативный подход

$$\mathbf{w}_{\text{MOE}} = \langle \gamma(\mathbf{x}), [\mathbf{w}_1, \dots, \mathbf{w}_n] \rangle$$

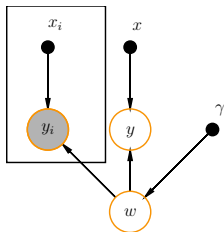


Рис. 1: Схема порождения выборки

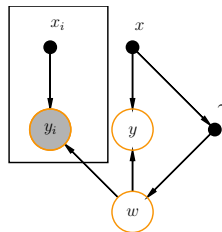


Рис. 2: Оптимизация MOE как дискриминативной модели

Литература и прочие ресурсы

- Bishop C. M. Pattern recognition //Machine learning. – 2006. – Т. 128. – №. 9.
- Генератор котиков: <https://github.com/aleju/cat-generator>
- Paganini M., de Oliveira L., Nachman B. Accelerating science with generative adversarial networks: an application to 3D particle showers in multilayer calorimeters //Physical review letters. – 2018. – Т. 120. – №. 4. – С. 042003.
- Antoran J., Miguel A. Disentangling and learning robust representations with natural clustering //2019 18th IEEE International Conference On Machine Learning And Applications (ICMLA). – IEEE, 2019. – С. 694-699.
- Лекции по LDA:
https://personal.utdallas.edu/~nrr150130/cs6347/2017sp/lects/Lecture_18_LDA.pdf
- Bernardo J. M. et al. Generative or discriminative? getting the best of both worlds //Bayesian statistics. – 2007. – Т. 8. – №. 3. – С. 3-24.
- Гребенькова О. С., Бахтеев О. Ю., Стрижов В. В. Вариационная оптимизация модели глубокого обучения с контролем сложности //Информатика и её применения. – 2021. – Т. 15. – №. 1. – С. 42-49.
- Ha D., Dai A., Le Q. V. Hypernetworks //arXiv preprint arXiv:1609.09106. – 2016.
- Адуенко А. А. Выбор мультимоделей в задачах классификации : дис. – Федер. исслед. центр "Информатика и управление" РАН, 2017.