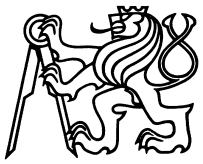
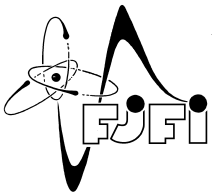


České vysoké učení technické v Praze
Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská



Generativní modely dat popsaných stromovou strukturou

Generative models of tree structured data

Bakalářská práce

Autor: **Jakub Bureš**

Vedoucí práce: **Doc. Ing. Václav Šmídl, Ph.D.**

Konzultant: **Doc. Ing. Tomáš Pevný, Ph.D.**

Akademický rok: 2019/2020

1. Seznamte se s popisem dat pomocí stromové struktury. Zvláštní pozornost věnujte metodám více instančního učení (multiple instance learning). Seznamte se s konceptem vnořeného prostoru (embedded space) a jeho reprezentace pomocí neuronových sítí.

2. Seznamte se se základními generativními modely dat popsaných vektorem příznaků. Zvláštní pozornost věnujte metodám typu autoencoder a jejich variační formě. Demonstrujte vlastnosti modelů na jednoduchých příkladech. V maximální míře využijte dostupné knihovny pro generativní modely.

3. Navrhněte několik příkladů typů dat se stromovou strukturou a pro každý z nich navrhněte generativní model. Navrhněte algoritmus pro určení jeho parametrů z dat a diskutujte vhodnost jednotlivých architektur neuronových sítí.

4. Seznamte se s různými druhy apriorních rozložení používaných na latentní proměnné autoencoderu. Odvoďte algoritmy odhadu jejich parametrů a srovnejte jejich výsledky se základním modelem. Diskutujte výsledné odhady.

5. Vyvinutou metodu aplikujte na vhodně zvolená reálná data a diskutujte vliv zvoleného apriorního rozložení na výsledky.

- Zadání práce (zadní strana) -

Poděkování:
Chtěl bych zde poděkovat především svému školiteli panu Doc. Ing. Václavu Šmídlovi, Ph.D. za pečlivost, ochotu, vstřícnost a odborné i lidské zázemí při vedení mé bakalářské práce. Dále děkuji svému konzultantovi panu Doc. Ing. Tomáši Pevnému, Ph.D.

Čestné prohlášení:
Prohlašuji, že jsem tuto práci vypracoval samostatně a uvedl jsem všechnu použitou literaturu.

V Praze dne 7. července 2020 Jakub Bureš

Název práce:

Generativní modely dat popsaných stromovou strukturou

Autor: Jakub Bureš

Obor: Matematické inženýrství

Zaměření: Aplikované matematicko-stochastické metody

Druh práce: Bakalářská práce

Vedoucí práce: Doc. Ing. Václav Šmídl, Ph.D.
ÚTIA AV ČR Pod vodárenskou věží 4 182 00 Praha 8

Konzultant: Doc. Ing. Tomáš Pevný, Ph.D.
Katedra počítačů FEL ČVUT Praha Technická 1902/2 166 27 Praha 6 - Dejvice

Abstrakt: Tato bakalářská práce řeší

Klíčová slova: klíčová slova (nebo výrazy) seřazená podle abecedy a oddělená čárkou

*Title:*Generative models of tree structured data

Generative models of tree structured data

Author: Jakub Bureš

Abstract: Max. 10 lines of English abstract text.

Key words: keywords in alphabetical order separated by commas

Obsah

Úvod

Internet se stal nedílnou součástí našich životů a mnozí si už ani nedokáží představit, jak by bez něho řešili každodenní starosti. Nakupujeme, prodáváme, spravujeme naše finance, píšeme zprávy a mnoho dalšího pomocí internetu. Zde vyvstává otázka internetové bezpečnosti. Je toto všechno bezpečné? Se zvyšujícím se provozem v internetu, se zvyšuje též počet pokusů o jeho zneužití, ať už pomocí virů, odposlouchávání, botnetů či malwaru obecně. Tradiční obranná řešení se spoléhají na identifikaci předem stanovených znaků, kterými se malware liší od neškodného programu. Inteligence a adaptivita malwaru však neustále roste a prakticky tak znemožňuje nalezení deterministických pravidel či postupů k jeho detekci.
Cílem této bakalářské práce je nejprve seznámit se s postupy využívající strojové učení, které dokáží sestavit pravděpodobnostní model vhodný pro nalezení anomálií v síťovém provozu. To zahrnuje nezbytný matematický aparát, jmenovitě optimalizaci, pravděpodobnostní počet a statistiku, přičemž se předpokládá základní znalost diferenciálního a integrálního počtu Za druhé tato práce vysvětluje problematiku na jednoduchých příkladech. Měla by sloužit jako odrazový můstek, tudíž by na ní mělo být navázáno prací diplomovou, jejímž cílem by mělo být hledání konkrétního modelu aplikovatelného na reálná data.

Kapitola 1

Teorie

1.1 Optimalizace

Optimalizace je matematická úloha, jejíž snahou je nalezení takových hodnot proměnných, pro které daná funkce nabývá minima či maxima. My se budeme snažit najít minimální hodnoty vektoru parametrů θ tzv. ztrátové funkce *(loss function)*. Ztrátovou funkci budeme dle anglického výrazu značit $L(\theta)$. Minimalizací ztrátové funkce získáme odhad parametrů

$$\hat{\theta} = \arg\min_{\theta} L(\theta), \tag{1.1}$$

který budeme vždy značit pomocí stříšky. Existuje nespočet způsobů jak danou funkci minimalizovat. My budeme výhradně používat metodu zvanou Gradient Descent.

1.1.1 Gradient Descent

Jedná se o iterativní optimalizační metodu. Minimalizujeme $L(\theta)$, tedy derivujeme dle vektoru parametrů θ, díky čemuž dostaneme $\nabla_\theta L(\theta)$. Symbol ∇_θ značí gradient funkce $L(\theta)$ přes všechny hodnoty θ. Použijeme bod θ_0 funkce $L(\theta)$ jako výchozí bod. Jelikož gradient udává směr nejvyššího růstu, pohybujeme se ve směru záporného gradientu a to s krokem $h \in \mathbb{R}_+$. Matematickou interpretaci toho postupu můžeme vyjádřit následujícím zápisem

$$\theta_{n+1} = \theta_n - h \cdot \nabla_\theta L(\theta_n). \tag{1.2}$$

Tento postup provádíme, dokud se nenacházíme v minimu funkce, čímž získáme vektor parametrů $\hat{\theta}$, jak je popsáno v (1.1). Ačkoliv se tento algoritmus může zdát na první pohled jako silný nástroj při řešení optimalizačních úloh, ve skutečnosti je opak pravdou. Ve velkých dimenzích a obrovském množství dat je tato metoda pomalá a prakticky se nepoužívá.

ADAM

Kvůli důvodům uvedeným výše, používáme vylepšenou variantu metody Gradient Descent, jedná se o tzv. Stochastic Gradient Descent (dále jen SGD). V této rodině existuje několik algoritmů výpočtu extrému. My budeme využívat adaptivní iterační metodu ADAM *(Adaptive Moment Estimation)* [10], která navíc používá druhý moment gradientu. Zatímco Gradient Descent

má krok stále stejný, u metody ADAM je krok h adaptivní. Více ji specifikovat v tomto textu nebudeme. Pro nás je důležité, že je tento algoritmus silnější a mnohem rychlejší v řešení složitých optimalizačních úloh. Další používané algoritmy z SGD jsou RMSprop, Adagrad nebo AdaMax.

1.1.2 Metoda nejmenších čtverců

Metoda nejmenších čtverců je nejzákladnější metoda pro hledání nejlepší proložení určitých dat nějakou křivkou. Představíme zjednodušenou alternativu, jak tuto metodu odvodit. Předpokládejme, že máme množinu $\mathbf{x} = \{x_i\}_{i=1}^n$, kde ke každému x_i máme právě jedno pozorování y_i, které je zatíženo nějakou neznámou chybou ε_i. Označme $\mathbf{y} = \{y_i\}_{i=1}^n$, komplexně zapsáno zobrazením jako $(x_1, \ldots, x_n) \longmapsto (y_1, \ldots, y_n)$. Naším cílem je najít nejlepší proložení dat, čili fit, pomocí polynomické funkce řádu $p \leq n$ a to ve tvaru

$$\hat{y}(x, \theta) = \theta_0 + \theta_1 x + \theta_2 x^2 + \cdots + \theta_p x^p = \sum_{i=0}^{p} \theta_i x^i, \tag{1.3}$$

která je lineární v neznámých parametrech $\theta = \left(\theta_0, \theta_1, \ldots, \theta_p\right)^\mathsf{T}$. Takové modely nazýváme lineární. Jelikož se jedná o tak jednoduché modely, jejich míra využití je značně omezena. O tom jak tyto modely vylepšit, se dozvíme v kapitole 2.2.
Abychom našli ten nejlepší možný fit, je nutno minimalizovat ztrátovou funkci, která má v tomto případě tvar

$$L(\theta) = \sum_{i=1}^{n} \left[\hat{y}(x_i, \theta) - y_i\right]^2 = (\mathbb{X} \cdot \theta - \mathbf{y})^\mathsf{T} (\mathbb{X} \cdot \theta - \mathbf{y}). \tag{1.4}$$

Tato funkce znázorňuje čtverec vzdálenosti pozorovaní $\mathbf{y}$ k hledané funkci $\hat{y}(x, \theta)$, jenž chceme mít co nejmenší - proto metoda nejmenších čtverců. Matice $\mathbb{X}$ je tvaru

$$\mathbb{X} = \begin{pmatrix} 1 & x_1 & x_1^2 & \ldots & x_1^p \\ 1 & x_2 & x_2^2 & \ldots & x_2^p \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & x_n & x_n^2 & \ldots & x_n^p \end{pmatrix}. \tag{1.5}$$

Odhadovat parametry θ můžeme numericky a to pomocí gradientní metody. Využijeme pravidla pro výpočet derivace dle vektorů [8] a najdeme tak gradient ztrátové funkce

$$\nabla_\theta L(\theta) = 2\mathbb{X}^\mathsf{T}(\mathbb{X} \cdot \theta - \mathbf{y}). \tag{1.6}$$

Dále postupujeme pomocí rovnice (1.2), dokud nezískáme

$$\hat{\theta} = \arg\min_{\theta} L(\theta). \tag{1.7}$$

Toto ovšem není jediný způsob odhadu parametrů. Metoda nejmenších čtverců má i analytické řešení. Systém rovnic můžeme zapsat následující formou

$$\begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & x_1 & x_1^2 & \ldots & x_1^p \\ 1 & x_2 & x_2^2 & \ldots & x_2^p \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & x_n & x_n^2 & \ldots & x_n^p \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \theta_0 \\ \theta_1 \\ \vdots \\ \theta_p \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \varepsilon_0 \\ \varepsilon_1 \\ \vdots \\ \varepsilon_p \end{pmatrix}.$$

Pro jednoduchost budeme tímto zápisem rozumět následující rovnici

$$\mathbf{y} = \mathbb{X} \cdot \theta + \epsilon. \tag{1.8}$$

Naším cílem je opět získání odhadu parametrů θ. Jelikož bude chyba ϵ při $\hat{\theta}$ nulová, můžeme předchozí rovnici přepsat následovně

$$\mathbf{y} = \mathbb{X} \cdot \hat{\theta}. \tag{1.9}$$

Nyní obě strany rovnice vynásobíme zleva výrazem $\mathbb{X}^\mathsf{T}$. Tím nám rovnice přejde do tvaru

$$\mathbb{X}^\mathsf{T} \cdot \mathbf{y} = \mathbb{X}^\mathsf{T} \cdot \mathbb{X} \cdot \hat{\theta}.$$

Teď už stačí rovnici zleva vynásobit inverzní maticí $(\mathbb{X}^\mathsf{T} \cdot \mathbb{X})^{-1}$. Dostaneme tak konečné řešení odhadu parametrů

$$\hat{\theta} = (\mathbb{X}^\mathsf{T}\mathbb{X})^{-1}\mathbb{X}^\mathsf{T}\mathbf{y}. \tag{1.10}$$

Tento postup zahrnuje i lineární regresi pro hodnotu $p = 1$, tzn. že bychom hledali funkci ve tvaru $\hat{y}(x, \theta) = \theta_0 + \theta_1 x$. Matice $\mathbb{X}$ by tak obsahovala pouze první dva sloupce.

1.2 Úvod do pravděpodobnosti a Bayesovská statistika

K hledání pravděpodobnostního modelu je potřeba znát pravděpodobnostní počet [6] a statistiku [7] . Uvedeme zde nezbytné znalosti a ucelíme značení.

1.2.1 Pravděpodobnostní míra

Definice 1.2.1 (Kolmogorova definice pravděpodobnosti)**.** Mějme neprázdnou množinu Ω vybavenou σ-algebrou $\mathscr{A}$, tedy souborem podmnožin obsahujícím Ω a uzavřeným na doplňky a spočetná sjednocení. Pak libovolnou funkci $P : \mathscr{A} \to \mathbb{R}$, která splňuje

1. $(\forall A \in \mathscr{A})(P(A) \geq 0)$,
2. $P(\Omega) = 1$,
3. $\forall A_j$ disjunktní platí $P(\sum_{j=1}^{\infty} A_j) = \sum_{j=1}^{\infty} P(A_j)$,

nazýváme pravděpodobnostní mírou.

Věta 1.2.1 (Vlastnosti P)**.** *Mějme pravděpodobnostní prostor* $(\Omega, \mathscr{A}, P)$ *a nechť* $(\forall j \in \mathbb{N})(A_j \in \mathscr{A})$ *a* $B \in \mathscr{A}$*. Pak platí*

1. $P(\emptyset) = 0$,
2. *Aditivita:* $P(\sum_{j=1}^{n} A_j) = \sum_{j=1}^{n} P(A_j)$,
3. *Monotonie:* $A \subset B \Rightarrow P(A) \leq P(B)$,
4. *Subtraktivita:* $A \subset B \Rightarrow P(B \setminus A) = P(B) - P(A)$,

5. *Omezenost:* $(\forall A \in \mathscr{A})(P(A) \leqslant 1)$,

6. *Komplementarita:* $A \in \mathscr{A} \Rightarrow P(A^C) = 1 - P(A)$.

Definice 1.2.2 (Podmíněná pravděpodobnost)**.** Nechť $A, B \in \mathscr{A}$ a $P(B) > 0$. Pak definujeme podmíněnou pravděpodobnost vztahem

$$P(A|B) = \frac{P(A, B)}{P(B)}. \tag{1.11}$$

Věta 1.2.2 (Součinové pravidlo)**.** *Nechť $A_1, \ldots, A_n \in \mathscr{A}$ a dále nechť také $P(A_1, \ldots, A_n) > 0$. Potom platí*

$$P(A_1, \ldots, A_n) = P(A_1) \cdot P(A_2|A_1) \cdot P(A_3|A_2, A_1) \cdot \ldots \cdot P(A_n|A_1, \ldots, A_{n-1}). \tag{1.12}$$

Věta 1.2.3 (Bayesova věta)**.** *Nechť $A \in \mathscr{A}$ a $P(B) \neq 0$. Potom platí*

$$P(A|B) = \frac{P(B|A)P(A)}{P(B)}. \tag{1.13}$$

$P(A)$ nazýváme prior, $P(A|B)$ posterior a jmenovatel $P(B)$ je často nazýván jako evidence.

Věta 1.2.4 (Nezávislost jevů)**.** *Nechť $A_j \in \mathscr{A}(\forall j \in \mathbb{N})$. Potom jevy nazveme nezávislé právě tehdy, když platí podmínka*

$$P(A_1, \ldots, A_k) = \prod_{i=1}^{k} P(A_i). \tag{1.14}$$

1.2.2 Hustoty pravděpodobnosti

Primárním cílem generativního modelování je hledání distribuce neboli hustoty pravděpodobnosti (případně pravděpodobnostního rozdělení) daných dat. Výhodou je, že pro hustotu pravděpodobnosti můžeme využívat stejným způsobem pravidlo podmíněnosti (1.11), tak i součinové pravidlo (1.12) a Bayeseovo pravidlo (1.13). Toto se pro nás ukáže jako naprosto klíčové.

Definice 1.2.3 (Náhodná veličina)**.** Máme prostor $(\Omega, \mathscr{A})$, potom funkci $\mathbf{X} = (X_1, \ldots, X_n) : (\Omega, \mathscr{A}) \to (\mathbb{R}^n, \mathscr{B}_n)$, kde $\mathscr{B}_n$ značí borelovskou σ-algrebru v $\mathbb{R}^n$, nazveme náhodnou veličinou.

Definice náhodné veličiny vypadá poněkud složitě. Pro nás je důležité, že veškerá **pozorovaná data** jsou náhodnou veličinou. Každý datový záznam bude většinou nezávislý a stejně rozdělený, což budeme značit zkratkou i.i.d. *(Independent Identically Distributed)*.

Definice 1.2.4 (Hustota pravděpodobnosti)**.** Hustotou pravděpodobnosti náhodné veličiny $\mathbf{X}$ rozumíme spojitou funkci $p_{\mathbf{X}}(\mathbf{x})$, která splňuje následující dvě podmínky

1. $\forall \mathbf{x}$, $p_{\mathbf{X}}(\mathbf{x}) \geq 0$,

2. $\int_{\mathbb{R}^n} p_{\mathbf{X}}(\mathbf{x})\, \mathrm{d}\mathbf{x} = 1$.

Obdobou hustoty pravděpodobnosti pro diskrétní náhodnou veličinu je **pravděpodobnostní funkce** $P[\mathbf{X} = \mathbf{x}]$ splňující

1. $\forall \mathbf{x}$, $P[\mathbf{X} = \mathbf{x}] \geq 0$,
2. $\sum_{\mathbf{x}} P[\mathbf{X} = \mathbf{x}] = 1$.

My se většinou omezíme na jednorozměrné a spojité náhodné veličiny. V takovém případě budeme psát X a $p_X(x)$. V případě, že bude mít náhodná veličina nějakou hustotu pravděpodobnosti, budeme to zapisovat pomocí $\sim$, tedy $X \sim p_X(x)$. Index budeme vynechávat, protože bude jasné, ke které náhodné veličině hustota patří. Podívejme se nyní, jak určit hustotu transformované náhodné veličiny.

Věta 1.2.5 (Transformace náhodné veličiny)**.** *Nechť* $\boldsymbol{X} \sim p_{\boldsymbol{X}}(\boldsymbol{x})$ *a nechť* $h : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$ *je regulární a prosté zobrazení na množině* H*, takové že* $\int_H p_{\boldsymbol{X}}(\boldsymbol{x})\,\mathrm{d}\boldsymbol{x} = 1$*. Potom je* $\boldsymbol{Y} = h(\boldsymbol{X})$ *náhodná veličina a její hustota* $\forall \boldsymbol{y} \in h(H)$ *má následující tvar*

$$p_{\boldsymbol{Y}}(\boldsymbol{y}) = p_{\boldsymbol{X}}\left(h^{-1}(\boldsymbol{y})\right) \mid \det \mathbb{J}_{h^{-1}}(\boldsymbol{y}) \mid . \tag{1.15}$$

Symbol $\det \mathbb{J}_{h^{-1}}$ *zde značí determinant z Jacobiho matice inverzního zobrazení k* h*.*

Nyní ukážeme, jak určit vybrané charakteristiky náhodné veličiny. Bude se jednat o střední hodnotu, rozptyl a entropii.

Definice 1.2.5 (Střední hodnota náhodné veličiny)**.** Má–li náhodná veličina $\mathbf{X} \in \mathscr{L}_1$ spojitou hustotu pravděpodobnosti $p(\mathbf{x})$, definujeme její střední (očekávanou) hodnotu $\mathbb{E}[\mathbf{X}]$, alternativně značeno $\langle \mathbf{X} \rangle$, vztahem

$$\mathbb{E}[\mathbf{X}] = \int_{\Omega} \mathbf{X} \mathrm{d}P = \int_{\mathbb{R}^n} \mathbf{x} p(\mathbf{x}) \mathrm{d}\mathbf{x}. \tag{1.16}$$

Pro diskrétní náhodnou veličinu s pravděpodobnostní funkcí $P[\mathbf{X} = \mathbf{x}]$ platí

$$\mathbb{E}[\mathbf{X}] = \sum_k \mathbf{x}_k \cdot P[\mathbf{X} = \mathbf{x}_k]\,. \tag{1.17}$$

Definice 1.2.6 (Rozptyl náhodné veličiny)**.** Má–li náhodná veličina $X \in \mathscr{L}_2$ spojitou hustotu pravděpodobnosti $p(x)$, definujeme rozptyl (varianci) $\mathbb{D}[X]$, alternativně značeno $\mathrm{Var}(X)$, vztahem

$$\mathbb{D}[X] = \mathbb{E}[X - \mathbb{E}[X]]^2 = \mathbb{E}\left[X^2\right] - \mathbb{E}[X]^2\,. \tag{1.18}$$

Pro vícerozměrnou náhodnou veličinu $\mathbf{X} \in \mathscr{L}_2$ je variance $n \times n$ rozměrná matice a nazýváme ji kovarianční. Je definována vztahem

$$\mathbb{D}[\mathbf{X}] = \mathbb{E}\left[(\mathbf{X} - \mathbb{E}[\mathbf{X}])(\mathbf{X} - \mathbb{E}[\mathbf{X}])^{\mathsf{T}}\right]. \tag{1.19}$$

Definice 1.2.7 (Entropie)**.** Má–li náhodná veličina $\mathbf{X} \in \mathscr{L}_1$ spojitou hustotu pravděpodobnosti $p(\mathbf{x})$, definujeme entropii náhodné veličiny $\mathbb{H}[\mathbf{X}]$, vztahem

$$\mathbb{H}[\mathbf{X}] = \mathbb{E}[-\log p(\mathbf{x})]\,, \tag{1.20}$$

kde log značí přirozený logaritmus. Stejně jako pro střední hodnotu, můžeme entropii definovat pro diskrétní náhodnou veličinu

$$\mathbb{H}[\mathbf{X}] = -\sum_k P[\mathbf{X} = \mathbf{x}_k] \cdot \log P[\mathbf{X} = \mathbf{x}_k]\,. \tag{1.21}$$

Poznámka. *Kvůli zjednodušení zápisu nebudeme později uvádět integrační množinu – automaticky tak budeme předpokládat, že se integruje přes celý nosič hustoty.*

V dalším textu uvedeme příklady spojitých či diskrétních rozdělení a pro přehlednost jejich výše zmíněné charakteristiky, jelikož je v této práci budeme využívat.

1.2.2.1 Poissonovo rozdělení

Poissonovo rozdělení popisuje diskrétní náhodnou veličinu. Většinou se jedná o počet výskytu určitého jevu v daném intervalu. Důležité je, že tyto jevy nastávají nezávisle na sobě. Pravděpodobnostní funkci Poissonova rozdělení vyjadřujeme pomocí parametru λ ve tvaru

$$\mathrm{Po}(\lambda) = \frac{\lambda^k}{k!}\mathrm{e}^{-\lambda}. \tag{1.22}$$

- $\mathbb{E}[X] = \lambda$
- $\mathbb{D}[X] = \lambda$
- $\mathbb{H}[X] = \lambda(1 - \log(\lambda)) + \mathrm{e}^{-\lambda}\sum_{k=0}^{\infty}\frac{\lambda^k \log(k!)}{k!}$

1.2.2.2 Rovnoměrné rozdělení

Jedním z nejjednodušších rozdělení pro spojité proměnné. Rovnoměrné rozdělení, někdy také nazýváno uniformní, přiřazuje všem hodnotám stejnou pravděpodobnost. Je definováno na intervalu (a, b) a můžeme ho vyjádřit následujícím způsobem

$$\mathrm{U}(a,b) = \begin{cases} \frac{1}{b-a}, & \text{pro } x \in (a,b) \\ 0, & \text{jinak} \end{cases}. \tag{1.23}$$

- $\mathbb{E}[X] = \frac{1}{2}(a + b)$
- $\mathbb{D}[X] = \frac{1}{12}(b - a)^2$
- $\mathbb{H}[X] = \log(b - a)$

1.2.2.3 Normální rozdělení

Nejdůležitější hustota pravděpodobnosti pro spojité proměnné se nazývá normální nebo také Gaussovo rozdělení. Jeho hustota je definována $\forall x \in \mathbb{R}$ pomocí dvou parametrů $\mu \in \mathbb{R}$ a $\sigma^2 > 0$ vztahem

$$\mathcal{N}(\mu, \sigma^2) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}}\exp\left\{-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}\right\}. \tag{1.24}$$

- $\mathbb{E}[X] = \mu$
- $\mathbb{D}[X] = \sigma^2$
- $\mathbb{H}[X] = \frac{1}{2}\log\left(2\pi\mathrm{e}\sigma^2\right)$

Budeme využívat i n-rozměrnou variantu Gaussova rozdělení, které je definováno vztahem

$$\mathcal{N}(\boldsymbol{\mu}, \Sigma) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^d |\Sigma|}} \exp\left\{-\frac{1}{2}(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu})^T \Sigma^{-1}(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu})\right\}, \tag{1.25}$$

kde Σ je kovarianční matice a $\boldsymbol{\mu}$ je vektor středních hodnot.

- $\mathbb{E}[X] = \boldsymbol{\mu}$
- $\mathbb{D}[X] = \Sigma$
- $\mathbb{H}[X] = \frac{1}{2}\log\det(2\pi\mathrm{e}\Sigma)$

1.2.2.4 Gamma rozdělení

Gamma rozdělení je definováno stejně jako normální rozdělení pomocí dvou parametrů $\alpha > 0$ a $\beta > 0$. Jeho hustota pravděpodobnosti má smysl pro $\forall x > 0$ a můžeme ji najít v několika možných tvarech. My uvedeme tento

$$\mathrm{Gamma}(\alpha, \beta) = \frac{\beta^\alpha}{\Gamma(\alpha)} x^{\alpha-1} \exp\{-\beta x\}, \tag{1.26}$$

kde $\Gamma(\alpha)$ značí gamma funkci. Stejně jako u předchozích rozdělení uvedeme některé důležité charakteristiky.

- $\mathbb{E}[X] = \frac{\alpha}{\beta}$
- $\mathbb{D}[X] = \frac{\alpha}{\beta^2}$
- $\mathbb{H}[X] = \alpha - \log\beta + \log\Gamma(\alpha) + (1-\alpha)\psi(\alpha)$

Přičemž funkce $\psi(\alpha)$ značí digamma funkci, čili $\psi(\alpha) = \frac{\Gamma'(\alpha)}{\Gamma(\alpha)}$.

1.2.2.5 Inverzní gamma rozdělení

Inverzní gamma rozdělení je velmi podobné gamma rozdělení akorát pro převrácenou hodnotu x, je tedy opět popsáno dvěma parametry $\alpha > 0$ a $\beta > 0$ a definováno pro $\forall x > 0$. Jeho hustotu můžeme zapsat následovně:

$$\mathrm{invGamma}(\alpha, \beta) = \frac{\beta^\alpha}{\Gamma(\alpha)} x^{-\alpha-1} \exp\left\{-\frac{\beta}{x}\right\} \tag{1.27}$$

Střední hodnota a rozptyl $\mathrm{invGamma}(\alpha, \beta)$ nejsou ale definována pro $\alpha > 0$.

- $\mathbb{E}[X] = \frac{\beta}{\alpha-1}$, pro $\alpha > 1$
- $\mathbb{D}[X] = \frac{\beta^2}{(\alpha-1)^2(\alpha-2)^2}$, pro $\alpha > 2$
- $\mathbb{H}[X] = \alpha + \log\beta + \log\Gamma(\alpha) - (1+\alpha)\psi(\alpha)$

Poznámka. *V textu budeme používat výraz* $\mathrm{invGamma}(0, 0+)$*, kde symbol* $0+$ *značí číslo velmi blízké* 0*. Budeme tím rozumět hustotu ve tvaru*

$$\mathrm{invGamma}(0, 0+) = \frac{1}{x}.$$

1.2.3 Bayesovská metoda nejmenších čtverců

Uvažujme standardní problém na nejmenší čtverce (1.8), tzn.

$$\mathbf{y} = \mathbb{X} \cdot \theta + \epsilon,$$

předpokládáme však, že pro jednu složku vektoru ϵ platí $\varepsilon_i \sim \mathcal{N}\left(0, \sigma^2\right)$ a navíc jsou tyto složky i.i.d. Díky vlastnostem Gaussova rozdělení můžeme určit distribuci

$$p(\mathbf{y}|\mathbb{X}) = \mathcal{N}\left(\mathbb{X} \cdot \hat{\theta}, \sigma^2 \cdot \mathbb{I}\right), \tag{1.28}$$

kde $\mathbb{I}$ značí jednotkovou matici a $\hat{\theta} = (\mathbb{X}^\mathsf{T}\mathbb{X})^{-1}\mathbb{X}^\mathsf{T}\mathbf{y}$. Označíme–li navíc libovolný řádek matice $\mathbb{X}$ jednoduše jako $X = \left(1, x, x^2, \ldots, x^p\right)$, potom distribuci (1.28) můžeme přepsat jednorozměrně

$$p(y|x) = \mathcal{N}\left(X \cdot \hat{\theta}, \sigma^2\right). \tag{1.29}$$

Tuto distribuci budeme později využívat v generativním modelování. Pokračujme tím, že určíme distribuci vektoru ϵ. To není nic těžkého, jelikož má každá složka stejné jednorozměrné Gaussovo rozdělení a také jsou všechny složky nezávislé. Z vlastností vícerozměrného Gaussova rozdělení [6] víme, že bude mít právě toto rozdělení, tedy

$$p(\epsilon) \propto \exp\left\{-\frac{1}{2}\epsilon^\mathsf{T}\epsilon\right\}, \tag{1.30}$$

kde pro jednoduchost $\sigma^2 = 1$. Dále z rovnice (1.8) získáme

$$\epsilon = \mathbf{y} - \mathbb{X} \cdot \theta \tag{1.31}$$

a transformujeme pomocí vztahu (1.15) z věty o transformaci náhodné veličiny, čímž získáme

$$p(\epsilon) = p(\mathbf{y}|\mathbb{X}, \theta) \propto \exp\left\{-\frac{1}{2}(\mathbf{y} - \mathbb{X}\theta)^\mathsf{T}(\mathbf{y} - \mathbb{X}\theta)\right\}. \tag{1.32}$$

Poznámka. *Normalizační konstantu hustot není nutno neustále psát, proto využíváme znak úměrnosti* $\propto$.

Snažíme se získat hustotu $p(\theta|\mathbf{y}, \mathbb{X})$, kterou získáme pomocí Bayesovy věty (1.13) následovně

$$p(\theta|\mathbf{y}, \mathbb{X}) = \frac{p(\mathbf{y}|\mathbb{X}, \theta)p(\theta|\mathbb{X})}{p(\mathbf{y}|\mathbb{X})} \propto p(\mathbf{y}|\mathbb{X}, \theta)p(\theta|\mathbb{X}). \tag{1.33}$$

K tomu abychom mohli pokračovat ve výpočtu $p(\theta|\mathbf{y}, \mathbb{X})$, potřebujeme znát $p(\theta|\mathbb{X})$. Předpokládejme také, že je θ nezávislé na $\mathbb{X}$, budeme proto psát pouze $p(\theta)$. Pro hustotu $p(\theta)$ předpokládejme následující vztah

$$p(\theta) = \mathcal{N}\left(0, \alpha^{-1}\mathbb{I}\right) \propto \exp\left\{-\frac{1}{2}\theta^\mathsf{T}\theta\alpha\right\}. \tag{1.34}$$

Nyní můžeme pokračovat dosazením do (1.33) a obdržíme

$$\begin{aligned} p(\mathbf{y}|\mathbb{X},\theta)p(\theta|\mathbb{X}) &\propto \exp\left\{-\frac{1}{2}(\mathbf{y}-\mathbb{X}\theta)^{\mathsf{T}}(\mathbf{y}-\mathbb{X}\theta)\right\}\exp\left\{-\frac{1}{2}\theta^{\mathsf{T}}\theta\alpha\right\} \\ &\propto \exp\left\{-\frac{1}{2}\left(\mathbf{y}^{\mathsf{T}}\mathbf{y}-\theta^{\mathsf{T}}\mathbb{X}^{\mathsf{T}}\mathbf{y}-\mathbf{y}^{\mathsf{T}}\mathbb{X}\theta+\theta^{\mathsf{T}}\mathbb{X}^{\mathsf{T}}\mathbb{X}\theta+\theta^{\mathsf{T}}\theta\alpha\right)\right\} \\ &\propto \exp\left\{-\frac{1}{2}\left[\mathbf{y}^{\mathsf{T}}\mathbf{y}-\theta^{\mathsf{T}}\mathbb{X}^{\mathsf{T}}\mathbf{y}-\mathbf{y}^{\mathsf{T}}\mathbb{X}\theta+\theta^{\mathsf{T}}\left(\mathbb{X}^{\mathsf{T}}\mathbb{X}+\alpha\mathbb{I}\right)\theta\right]\right\}. \end{aligned} \tag{1.35}$$

Jedná se o součin dvou vícerozměrných gaussovských distribucí, proto můžeme předpokládat, že řešení bude ve tvaru kvadratické formy, která také odpovídá vícerozměrnému Gaussovu rozdělení. Tento tvar navíc obsahuje zbytek z po nejmenších čtvercích, ten ovšem také není nutné psát. Platí

$$p(\theta|\mathbf{y},\mathbb{X}) \propto \exp\left\{-\frac{1}{2}\left(\theta-\hat{\theta}\right)\Sigma^{-1}\left(\theta-\hat{\theta}\right)+z\right\} \propto \exp\left\{-\frac{1}{2}\left(\theta-\hat{\theta}\right)\Sigma^{-1}\left(\theta-\hat{\theta}\right)\right\},$$

což upravujeme dále tak, abychom dokázali určit $\hat{\theta}$ a Σ. Roznásobením dostaneme

$$p(\theta|\mathbf{y},\mathbb{X}) \propto \exp\left\{-\frac{1}{2}\left(\theta^{\mathsf{T}}\Sigma^{-1}\theta-\hat{\theta}^{\mathsf{T}}\Sigma\theta-\theta^{\mathsf{T}}\Sigma^{-1}\hat{\theta}+\hat{\theta}^{\mathsf{T}}\Sigma^{-1}\hat{\theta}\right)\right\}, \tag{1.36}$$

z čehož už při porovnání výrazu $\theta^{\mathsf{T}}\left(\mathbb{X}^{\mathsf{T}}\mathbb{X}+\alpha\mathbb{I}\right)\theta$, nacházejícím se v konečném tvaru rovnice (1.35), s výrazem $\theta^{\mathsf{T}}\Sigma^{-1}\theta$ v předchozí rovnici (1.36), plyne předpis pro

$$\Sigma^{-1} = \mathbb{X}^{\mathsf{T}}\mathbb{X}+\alpha\mathbb{I}. \tag{1.37}$$

Přímo porovnávejme další dva výrazy z těchto rovnic

$$-\mathbf{y}^{\mathsf{T}}\mathbb{X}\theta = -\hat{\theta}^{\mathsf{T}}\Sigma^{-1}\theta.$$

Nyní z této rovnice jednoduchou úpravou a dosazením za Σ dostaneme předpis pro $\hat{\theta}$, a to

$$\hat{\theta} = \Sigma\mathbb{X}^{\mathsf{T}}\mathbf{y} = \left(\mathbb{X}^{\mathsf{T}}\mathbb{X}+\alpha\mathbb{I}\right)^{-1}\mathbb{X}^{\mathsf{T}}\mathbf{y}. \tag{1.38}$$

1.2.4 Divergence

Divergence je funkce $D(.\|.) : S \times S \to \mathbb{R}$, kde je S je prostor všech distribucí, která navíc splňuje následující dvě podmínky

1. $D(q\|p) \geq 0$,
2. $D(q\|p) = 0 \iff p = q$.

Divergence do jisté míry popisuje vzdálenost nebo rozdíl mezi dvěma distribucemi. Jelikož divergence nemusí splňovat podmínku symetrie a trojúhelníkové nerovnosti, nejedná se tedy o metriku, nýbrž o semimetriku.

f-divergence

Nejdůležitější skupinou divergencí jsou takzvané f-divergence. Jsou definovány pomocí konvexní funkce $f(x)$, kde $x > 0$ a takové že $f(1) = 0$. Jsou tvaru

$$D_f(q||p) = \int q(x) f\left(\frac{q(x)}{p(x)}\right) \mathrm{d}x. \tag{1.39}$$

Kullback-Leiblerova divergence

Pro nás bude užitečná tzv. Kullback-Leiblerova divergence, kde za funkci f bereme přirozený logaritmus. To je rozhodně konvexní funkce, pro kterou platí podmínka $\log 1 = 0$. Tvar KL-divergence je následující

$$D_{KL}(q||p) = \int q(x) \log \frac{q(x)}{p(x)} \mathrm{d}x. \tag{1.40}$$

Divergence se často definují jednorozměrně, lze je ovšem alternativně definovat i ve více rozměrech.

1.2.5 ELBO

Předpokládejme že máme pozorování $\mathbf{y}$ a $\mathbf{z}$ jsou skryté (latentní) proměnné. Toto je zcela obecná definice a $\mathbf{z}$ tak může obsahovat i parametry. Posteriorní distribuci latentní proměnné $\mathbf{z}$ můžeme napsat pomocí Bayesova pravidla (1.13) takto

$$p(\mathbf{z}|\mathbf{y}) = \frac{p(\mathbf{y}|\mathbf{z})p(\mathbf{z})}{p(\mathbf{y})} = \frac{p(\mathbf{y}|\mathbf{z})p(\mathbf{z})}{\int p(\mathbf{y}, \mathbf{z}) \mathrm{d}\mathbf{z}}. \tag{1.41}$$

Dále zadefinujeme nový objekt, věrohodnostní funkci jmenovatele

$$\log p(\mathbf{y}) = \log \int p(\mathbf{y}, \mathbf{z}) \mathrm{d}\mathbf{z}. \tag{1.42}$$

Jmenovatel v Bayesově pravidle se někdy také nazývá **evidence**. Abychom mohli pokračovat, využijeme pomocnou funkci $q(\mathbf{z}|\mathbf{w})$

$$\log p(\mathbf{y}) = \log \int p(\mathbf{y}, \mathbf{z}) \mathrm{d}\mathbf{z} = \log \int q(\mathbf{z}|\mathbf{w}) \frac{p(\mathbf{y}, \mathbf{z})}{q(\mathbf{z}|\mathbf{w})} \mathrm{d}\mathbf{z} = \log \mathbb{E}_q \left[\frac{p(\mathbf{y}, \mathbf{z})}{q(\mathbf{z}|\mathbf{w})} \right]. \tag{1.43}$$

Symbol $\mathbb{E}_q$ značí střední hodnotu přes distribuci $q(\mathbf{z}|\mathbf{w})$. Dále využijeme Jensenovu nerovnost, díky které získáme spodní hranici *(lower bound)*, odtud tedy **Evidence Lower Bound**, čili ELBO

$$\log \mathbb{E}_q \left[\frac{p(\mathbf{y}, \mathbf{z})}{q(\mathbf{z}|\mathbf{w})} \right] \geq \mathbb{E}_q \left[\log \frac{p(\mathbf{y}, \mathbf{z})}{q(\mathbf{z}|\mathbf{w})} \right] = L(\mathbf{w}). \tag{1.44}$$

ELBO je v tomto případě ztrátová funkce, proto ho značíme také $L(\mathbf{w})$. Dále rozepíšeme pomocí součinového pravidla (1.12), využijeme vlastností logaritmů a dle definice KL-divergence (1.40) přepíšeme do tvaru

$$L(\mathbf{w}) = \mathbb{E}_q \left[\log \frac{p(\mathbf{y}, \mathbf{z})}{q(\mathbf{z}|\mathbf{w})} \right] = \mathbb{E}_q \left[\log \frac{p(\mathbf{y}|\mathbf{z})p(\mathbf{z})}{q(\mathbf{z}|\mathbf{w})} \right] = \mathbb{E}_q \left[\log p(\mathbf{y}|\mathbf{z}) \right] - \mathbb{E}_q \left[\log \frac{p(\mathbf{z})}{q(\mathbf{z}|\mathbf{w})} \right] \tag{1.45}$$

$$= \mathbb{E}_q \left[\log p(\mathbf{y}|\mathbf{z}) \right] - D_{KL}(q(\mathbf{z}|\mathbf{w}) || p(\mathbf{z})). \tag{1.46}$$

Budeme–li maximalizovat ELBO přes všechny variační parametry $\mathbf{w}$, získáme nejbližší možnou hodnotu k $\log p(\mathbf{y})$. Navíc je maximalizace ELBO ekvivalentní k minimalizaci KL-divergence mezi $q(\mathbf{z}|\mathbf{w})$ a $p(\mathbf{z}|\mathbf{w})$, jelikož platí

$$\begin{aligned} D_{KL}\left(q\left(\mathbf{z}|\mathbf{w}\right)||p(\mathbf{z}|\mathbf{y})\right) &= \mathbb{E}_q\left[\log\frac{q(\mathbf{z}|\mathbf{w})}{p\left(\mathbf{z}|\mathbf{y}\right)}\right] \\ &= \mathbb{E}_q\left[\log\frac{q(\mathbf{z}|\mathbf{w})p(\mathbf{y})}{p\left(\mathbf{y}|\mathbf{z}\right)p(\mathbf{z})}\right] \\ &= -\mathbb{E}_q\left[\log p(\mathbf{y}|\mathbf{z})\right] + \mathbb{E}_q\left[\log\frac{q(\mathbf{z}|\mathbf{w})}{p\left(\mathbf{z}|\mathbf{y}\right)}\right] + \mathbb{E}_q\left[\log p(\mathbf{y})\right] \\ &= -\mathbb{E}_q\left[\log p(\mathbf{y}|\mathbf{z})\right] + D_{KL}\left(q\left(\mathbf{z}|\mathbf{w}\right)||p(\mathbf{z})\right) + \log p(\mathbf{y}). \end{aligned} \tag{1.47}$$

Z toho jednoduchou úpravou dostaneme konečný vztah

$$D_{KL}\left(q\left(\mathbf{z}|\mathbf{w}\right)||p(\mathbf{z}|\mathbf{y})\right) = -L\left(\mathbf{w}\right) + \log p(\mathbf{y}). \tag{1.48}$$

Příklad

Předvedeme příklad, jak ELBO využít v praxi.
Uvažujme pouze sadu dvou pozorování y_1 a y_2 s normálním rozdělením $\mathcal{N}_{\mathrm{i}}(\theta, 1)$ pro i $\in$1,2. Dále uvažujme jeden parametr $\theta|\alpha \sim \mathcal{N}(0, \alpha)$ a nechť α je tzv. Jeffryho prior, tedy $\alpha \sim$ invGamma$(0, 0+)$. Snažíme se získat sdruženou distribuci parametrů θ a α, tedy $p(\theta, \alpha|y_1, y_2)$. Tuto distribuci můžeme přepsat pomocí definice podmíněné pravděpodobnosti (1.11) a řetězového pravidla (1.12) jako

$$p(\theta, \alpha|y_1, y_2) = \frac{p(\theta, \alpha, y_1, y_2)}{p(y_1, y_2)} = \frac{p(y_1|\theta)p(y_2|\theta)p(\theta)p(\alpha)}{p(y_1, y_2)}. \tag{1.49}$$

Abychom to uvedli do kontextu s definicí ELBO (1.45) - naše pozorování $\mathbf{y}$ je nyní vektor (y_1, y_2) a latentními proměnnými $\mathbf{z}$ rozumíme (α, θ). Dosazením předpokladů do čitatele dostaneme

$$p(y_1|\theta)p(y_2|\theta)p(\theta)p(\alpha) \propto \exp\left\{-\frac{1}{2}(y_1-\theta)^2\right\} \cdot \exp\left\{-\frac{1}{2}(y_2-\theta)^2\right\} \cdot \frac{1}{\sqrt{\alpha}} \exp\left\{-\frac{\theta^2}{2\alpha}\right\} \cdot \frac{1}{\alpha}. \tag{1.50}$$

Zdánlivě se nám může zdát určení jmenovatele jako jednoduché, protože hustota $p(y_1, y_2)$ lze získát tzv. marginalizací, neboli vyintegrováním přes θ a α

$$\begin{aligned} p(y_1, y_2) &= \int p(\theta, \alpha, y_1, y_2)\mathrm{d}\theta\mathrm{d}\alpha \\ &= \int p(y_1|\theta)p(y_2|\theta)p(\theta)p(\alpha)\mathrm{d}\theta\mathrm{d}\alpha \\ &= \int \exp\left\{-\frac{1}{2}(y_1-\theta)^2\right\} \cdot \exp\left\{-\frac{1}{2}(y_2-\theta)^2\right\} \cdot \frac{1}{\sqrt{\alpha}} \exp\left\{-\frac{\theta^2}{2\alpha}\right\} \cdot \frac{1}{\alpha}\ \mathrm{d}\theta\mathrm{d}\alpha. \end{aligned} \tag{1.51}$$

Po bližším přezkoumání (1.51) zjistíme, že nelze přes α vyintegrovat. Proto použijeme ELBO. Dle definice KL-divergence a za předpokladu nezávislosti $q(\theta, \alpha) = q(\theta)q(\alpha)$ můžeme psát:

$$D_{KL}\left(q\left(\theta, \alpha|\mu, \sigma, \gamma, \delta\right)||p(\theta, \alpha|y_1, y_2)\right) = \int q(\alpha)q(\theta)\log\left\{\frac{q(\alpha)q(\theta)}{p(\theta, \alpha|y_1, y_2)}\right\}\mathrm{d}\theta\mathrm{d}\alpha = \blacklozenge. \tag{1.52}$$

Nezapomínejme, že $q(\theta)$ a $q(\alpha)$ jsou distribuce, pro které zvolíme pochopitelný tvar o 4 neznámých parametrech $(\mu, \sigma, \gamma, \delta)$

$$\begin{aligned} q(\theta) &= \mathcal{N}(\mu, \sigma), \\ q(\alpha) &= \text{invGamma}(\gamma, \delta). \end{aligned}$$

Zároveň to jsou naše variační parametry $\mathbf{w}$. Dle (1.2.4) navíc víme, že platí $\int q(\alpha)q(\theta)\mathrm{d}\theta\mathrm{d}\alpha = 1$. Výraz budeme rozepisovat pomocí pravidel pro logaritmy a postupně upravovat. Navíc $p(y_1, y_2)$ v integrálu je konstanta, kterou můžeme pro jednoduchost zanedbat. Výsledek budeme na konci minimalizovat a konstanta polohu maxima nemění

$$\begin{aligned} \blacklozenge &= p(y_1, y_2) \cdot \int q(\alpha)q(\theta) \log \frac{q(\alpha)q(\theta)}{p(y_1|\theta)p(y_2|\theta)p(\theta)p(\alpha)} \mathrm{d}\theta\mathrm{d}\alpha \\ &\propto \int q(\theta)q(\alpha) \left(-\log p(y_1|\theta) - \log p(y_2|\theta) - \log p(\theta) - \log p(\alpha) + \log q(\theta) + \log q(\alpha)\right) \mathrm{d}\alpha\mathrm{d}\theta. \end{aligned} \tag{1.53}$$

Poslední dva výrazy jsou entropie pro Gaussovo rozdělení, resp. inverzní gamma rozdělení

$$\begin{aligned} \int q(\theta) \log q(\theta)\, \mathrm{d}\theta &\propto -\frac{1}{2} \log \sigma, \\ \int q(\alpha) \log q(\alpha)\, \mathrm{d}\alpha &= -\gamma - \log\left(\delta \cdot \Gamma(\gamma)\right) + (1+\gamma)\psi(\gamma). \end{aligned}$$

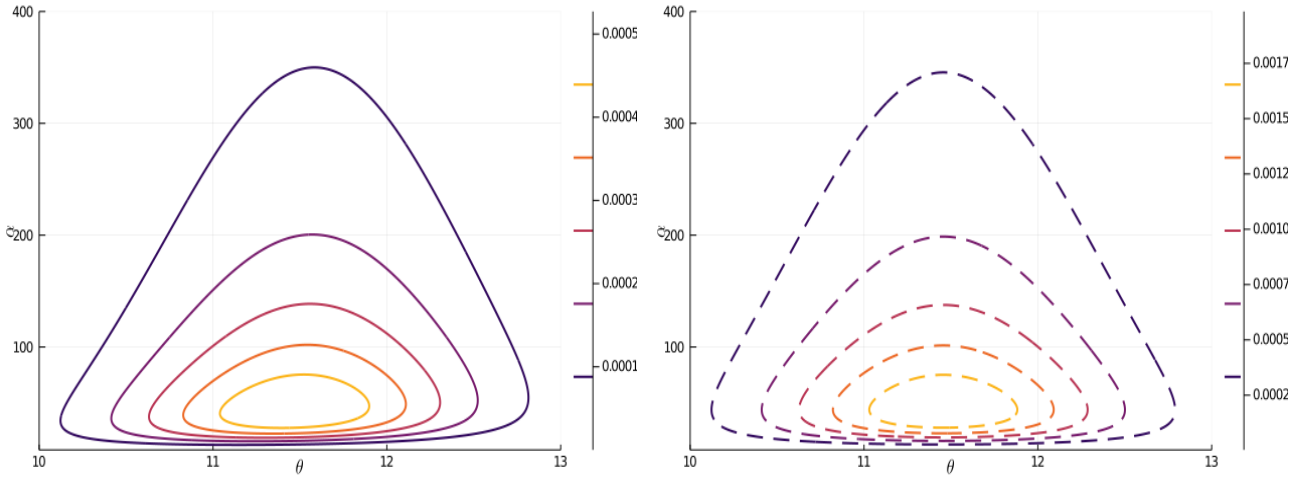
Vypočítejme zbývající výrazy, kde pro jednoduchost budeme pro střední hodnoty využívat značení pomocí špičatých závorek:

$$\begin{aligned} \int q(\theta)q(\alpha) \log p(y_1|\theta)\, \mathrm{d}\alpha\, \mathrm{d}\theta &= \left\langle -\frac{1}{2}(y_1 - \theta)^2 \right\rangle = -\frac{1}{2}\left(y_1^2 - 2y_1\mu + \mu^2 + \sigma\right), \\ \int q(\theta)q(\alpha) \log p(y_2|\theta)\, \mathrm{d}\alpha\, \mathrm{d}\theta &= \left\langle -\frac{1}{2}(y_2 - \theta)^2 \right\rangle = -\frac{1}{2}\left(y_2^2 - 2y_2\mu + \mu^2 + \sigma\right), \\ \int q(\theta)q(\alpha) \log p(\theta)\, \mathrm{d}\alpha\, \mathrm{d}\theta &= \left\langle -\frac{\theta^2}{2\alpha} - \frac{1}{2}\log\alpha \right\rangle = -\frac{1}{2}\left(\left(\mu^2 + \sigma\right)\frac{\gamma}{\delta} + \log\delta - \psi(\gamma)\right), \\ \int q(\theta)q(\alpha) \log p(\alpha)\, \mathrm{d}\alpha\, \mathrm{d}\theta &= \langle -\log\alpha \rangle = \psi(\gamma) - \log\delta. \end{aligned}$$

Nyní máme všechny potřebné výrazy pro výpočet odhadu parametrů $(\mu, \sigma, \gamma, \delta)$ distribuce $q(\theta, \alpha)$ numericky optimalizační metodou ADAM, tedy

$$\hat{\mu}, \hat{\sigma}, \hat{\gamma}, \hat{\delta} = \underset{\mu,\sigma,\gamma,\delta}{\arg\min}\, D_{KL}\left(q\left(\theta, \alpha|\mu, \sigma, \gamma, \delta\right) || p(\theta, \alpha|y_1, y_2)\right). \tag{1.54}$$

Abychom mohli skutečně porovnat, jestli jsou distribuce $q\left(\theta, \alpha|\mu, \sigma, \gamma, \delta\right)$ a $p(\theta, \alpha|y_1, y_2)$ podobné, jsou vykresleny na obrázku 1.1.



(a) Distribuce $p(\theta, \alpha|y_1, y_2)$ (b) Distribuce $q(\theta, \alpha|\mu, \sigma, \gamma, \delta)$

Obrázek 1.1: Contour plot distribucí $p(\theta, \alpha|y_1, y_2)$ (vlevo plnou čárou) a $q(\theta, \alpha|\mu, \sigma, \gamma, \delta)$ (vpravo čerchovaně), kde distribuce q je vyčíslena ve vypočtených odhadech $\hat{\mu}, \hat{\sigma}, \hat{\gamma}, \hat{\delta}$ a distribuce p je vyčíslena v bodech $y_1 = 11$ a $y_2 = 12$. Je patrné, že distribuce jsou téměř totožné.

1.3 Teorie grafů

Poslední teoretickou kapitolou bude vsuvka do teorie grafů. Nepůjde nám však o grafy funkcí nebo o grafy používané ve statistice. Tato kapitola poslouží k výhodnému popsání složitějších datových struktur.

Definice 1.3.1 (Graf)**.** Grafem G se rozumí dvojice (V, H), kde V je množina vrcholů grafu G a H je množina hran tohoto grafu, přičemž jsou tyto množiny vzájemně disjunktní.

Toto je zcela obecná definice grafu. Takto definovaný graf je velmi silný nástroj ke zjednodušování složitých problémů. Je vhodný pro popis takových situací, jenž můžeme znázornit pomocí konečného množství bodů, čili vrcholů V a vztahů mezi nimi, které jsou znázorněny hranami H.

Definice 1.3.2 (Cesta v grafu)**.** Cestou v grafu rozumíme posloupnost vrcholů a hran $(v_0, h_1, v_1, \ldots, h_t, v_t)$, kde vrcholy $v_0, \ldots, v_t$ jsou navzájem různé vrcholy grafu G a pro každé $i = 1, 2, \ldots, t$ je $e_i = \{v_{i-1}, v_i\} \in H$.

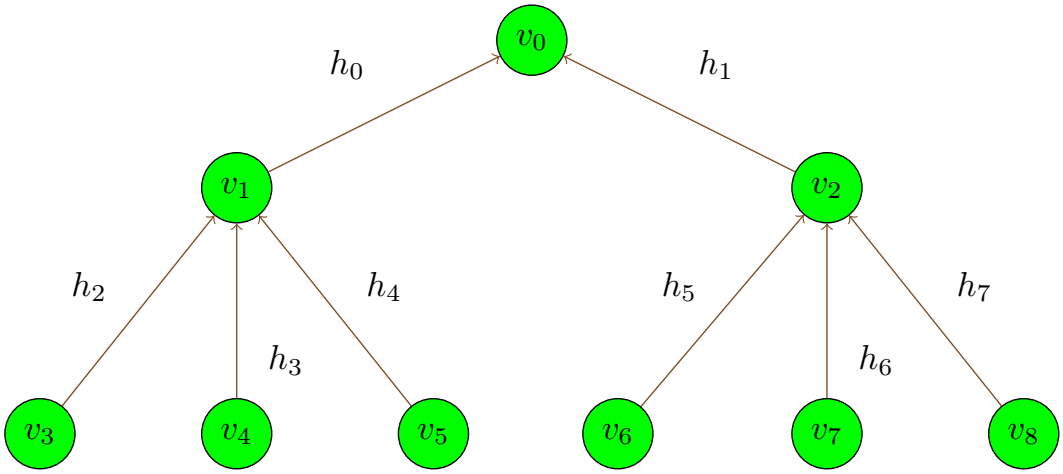
Definice 1.3.3 (Orientace v grafu)**.** Orientovaným grafem nazveme dvojici (V, H), kde H je podmnožina kartézského součinu $V \times V$. Prvky H pak nazýváme orientované hrany. Orientovaná hrana h je tvaru (x, y) a říkáme o ní, že vychází z x a končí v y.

Definice 1.3.4 (Souvislost grafu)**.** Řekneme, že graf G je souvislý, jestliže pro každé dva vrcholy v_0 a v_1 existuje v G cesta z v_0 do v_1.

Definice 1.3.5 (Cyklus v grafu)**.** Cyklem v grafu G rozumíme posloupnost vrcholů a hran $(v_0, h_1, v_1, \ldots, h_t, v_t = v_0)$, kde vrcholy $v_0, \ldots, v_{t-1}$ jsou navzájem různé vrcholy grafu G a pro každé $i = 1, 2, \ldots, t$ je $e_i = \{v_{i-1}, v_i\} \in H$.

Definice 1.3.6 (Strom)**.** Strom je souvislý graf neobsahující cyklus.

Primárním cílem je výhodně zadefinovat stromovou strukturu, budeme totiž pracovat s orientovanými stromy – ten můžeme vidět na obrázku 1.2. Jak na tyto definice napasovat generativní model bude hlavním cílem třetí kapitoly 3. Nejprve je nutno již zmíněný generativní model zadefinovat.



Obrázek 1.2: Příklad orientovaného stromu. Z definice stromu plyne, že mezi každými dvěma vrcholy existuje pouze jedna cesta a navíc platí, že počet vrcholů je o 1 větší, než počet hran.

Kapitola 2

Generativní modely

2.1 Generativní model

Ve strojovém učení se setkáváme s dvěma hlavními typy modelů a to jsou **generativní modely** a **diskriminativní modely**. Každý z nich přistupuje k zadanému problému trochu jinak. Jak už napovídá název této práce, budeme se zde zabývat výhradně generativními modely.

Definice 2.1.1. (Generativní model) Mějme nějakou množinu datových záznamů $\mathbf{x} = (x_1, \ldots, x_n)$, představující nezávislé proměnné a nějakou množinu $\mathbf{y} = (y_1, \ldots, y_n)$, jakožto závislé proměnné. Generativní model je potom takový model, který se učí sdruženou distribuci $p(x, y)$. Jsme tedy schopni generovat nová data pomocí původních.

Příklad

Připomeňme nejprve, že platí $p(x, y) = p(y, x)$. V tomto okamžiku pro nás bude výhodnější hledat distribuci $p(y, x)$. Jeden ze způsobů jak odhadnout tuto distribuci, je využití součinového pravidla (1.12). Pomocí něj získáme tvar

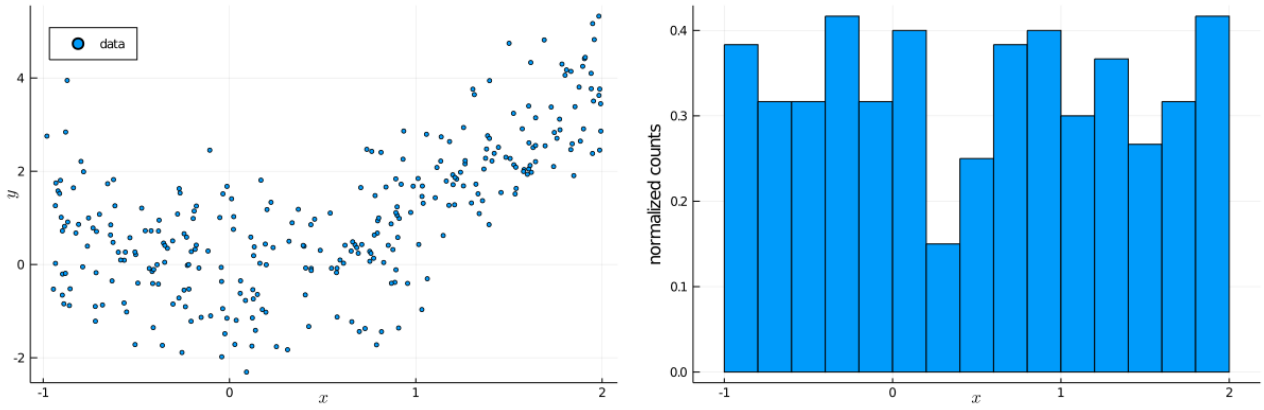
$$p(y, x) = p(y|x) \cdot p(x). \tag{2.1}$$

Problém je tedy převeden na hledání distribucí $p(y|x)$ a $p(x)$. Pro ilustraci uvažujme množinu datových záznamů $\mathbf{x} = (x_1, \ldots, x_n)$ zobrazenou na obrázku 2.1.
Určit distribuci $p(x)$ není u tohoto příkladu nic problematického, můžeme ji určit například z histogramu x–ových souřadnic jednotlivých bodů nebo použít maximálně věrohodný odhad [7] *(Maximum Likelihood Estimation, MLE)*. Data jsou na ose x, přesněji na intervalu (a, b), rozděleny rovnoměrně. To tedy indikuje rovnoměrné rozdělení

$$p(x) = \mathrm{U}(a, b). \tag{2.2}$$

Nyní přejdeme k hledání distribuce $p\,(y|x)$. Tu můžeme určit pomocí metody nejmenších čtverců (1.29), protože víme že pro takovou distribuci platí

$$p(y|x) = \mathcal{N}\left(X \cdot \hat{\theta}, \sigma^2\right), \tag{2.3}$$



(a) Data, pro která hledáme distribuci $p(x, y)$.

(b) Normalizovaný histogram vzorků z distribuce $p(x)$.

Obrázek 2.1: Data, pro která hledáme sdruženou distribuci $p(x, y)$ s histogramem distribuce $p(x)$. Z obrázku (a) je patrné, že distribuce $p(x)$ je rovnoměrná, datové záznamy se na ose x totiž nikde neshlukují.

kde $X = \left(1, x, x^2\right)$, jelikož předpokládáme, že se jedná o kvadratickou závislost a $\hat{\theta} = (\mathbb{X}^\mathsf{T}\mathbb{X})^{-1}\mathbb{X}^\mathsf{T}\mathbf{y}$. Nyní máme obě složky k určení $p(y, x)$, jsme tudíž schopni generovat nová data a to za pomoci původních dat. Naučili jsme se distribuci, ze kterých jsou data generována. Na obrázku 2.2 vidíme contour plot distribuce $p(y, x)$, který nám dává představu, jak tato distribuce vypadá.

2.2 Neuronová síť

Nejjednodušší model je takový, který obsahuje pouze lineární kombinaci vstupních proměnných $(x_1, \ldots, x_n)$, tedy lineární model

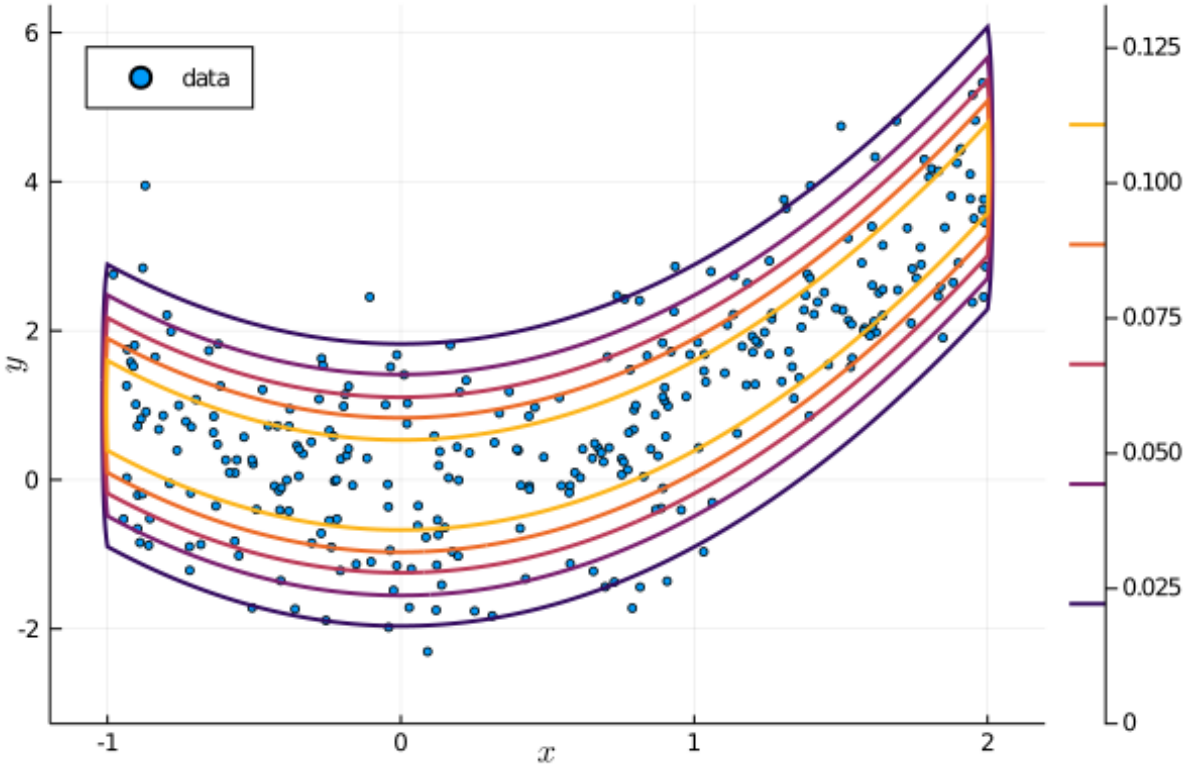
$$y(\mathbf{x}, \mathbf{w}) = w_0 + w_1 x_1 + w_2 x_2 + \cdots + w_n x_n = w_0 + \sum_{i=1}^{n-1} w_i x_i. \tag{2.4}$$

Nyní se pokusíme tento model rozšířit tím, že do něj vneseme nelineární funkce vstupních proměnných a celé to obalíme do nelineární aktivační funkce f, čímž získáme novou funkci

$$y(\mathbf{x}, \mathbf{w}) = f\left(w_0 + \sum_{j=1}^{m} w_j \phi_j(\mathbf{x})\right). \tag{2.5}$$

Funkce $\phi_j(\mathbf{x})$ nazýváme bázové funkce. Parametr w_0 nám dovoluje nastavit offset, neboli tzv. práh *(bias)* v daných datech. Nyní představíme koncept neuronové sítě, který může být popsán sérií funkčních transformací. Nejprve zkonstruujeme m lineárních kombinací vstupních proměnných $(x_1, \ldots, x_n)$ ve tvaru

$$a_j = \sum_{i=1}^{n} w_{ji}^{(1)} x_i + w_{j0}^{(1)}, \tag{2.6}$$



Obrázek 2.2: Data z obrázku 2.1, tentokrát vyobrazená s contour plotem distribuce $p(y, x)$, kde $\sigma^2 = 1$, $a = -1$, $b = 2$ a y závisí na x kvadraticky. Distribuce je na krajích useknutá kvůli uniformnímu rozdělení – kdyby byla distribuce $p(x)$ gaussovská, byla by distribuce na okrajích zakulacená.

kde j nabývá hodnot z $\{1, \ldots, m\}$ a horní index (1) značí, že příslušné parametry jsou v první vrstvě. Parametry $w_{ji}^{(1)}$ budeme nazývat váhy *(weights)* a $w_{j0}^{(1)}$ jsou složky již zmiňovaného prahu. Objekty a_j budeme nazývat aktivace *(activation)*, každou aktivaci transformujeme pomocí diferencovatelné, nelineární aktivační funkce h a dostaneme

$$z_j = h\left(a_j\right). \tag{2.7}$$

Z předchozího textu jasně plyne, že tento objekt odpovídá tomu v (2.5). V kontextu neuronových sítí budeme tyto objekty nazývat skryté jednotky *(hidden units)*, proto tedy to intuitivní značení. Nyní budeme pokračovat ve stejném postupu, vezmeme hodnoty z_j, opět je lineárně zkombinujeme a získáme

$$a_k = \sum_{j=1}^{m} w_{kj}^{(2)} z_j + w_{k0}^{(2)}, \tag{2.8}$$

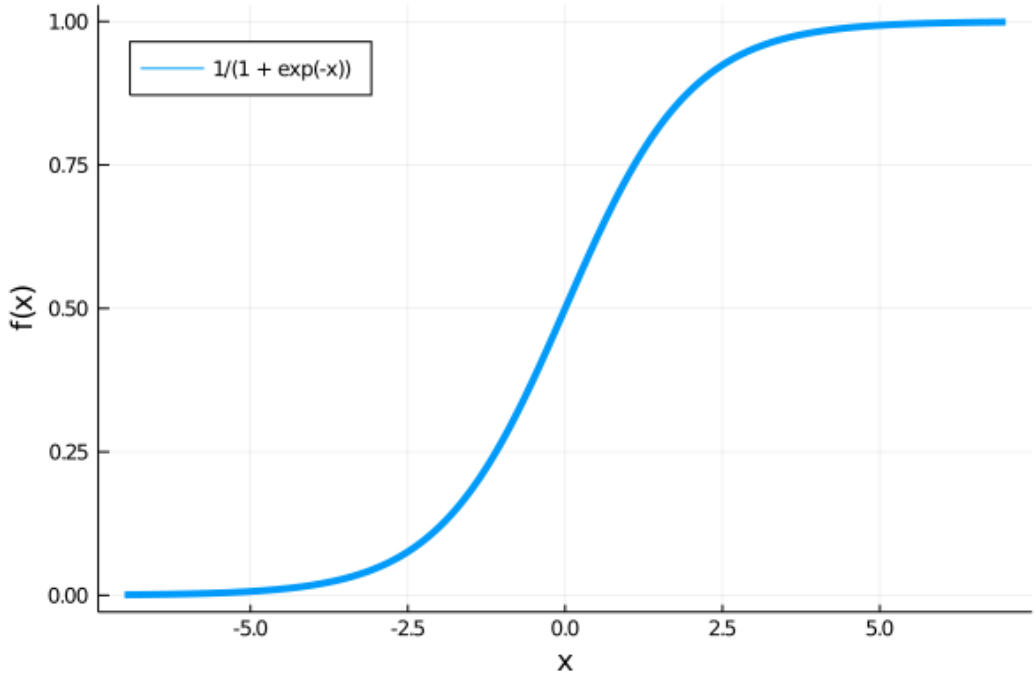
kde k nabývá hodnot z $\{1, \ldots, l\}$, zároveň l značí celkový počet výstupů a podobně jako předtím, horní index (2) značí, že příslušné parametry jsou ve druhé vrstvě. Aktivace rovněž jako v předchozím kroku obalíme do další aktivační funkce f a získáme finální výstup

$$y_k = f\left(a_k\right). \tag{2.9}$$

Aktivační funkci jsme označili f místo h, poněvadž už dané jednotky nejsou skryté, ale jedná se v našem případě o výstup.
Teď se ovšem pokusme pojem aktivační funkce trochu více specifikovat. Volba aktivační funkce je různá případ od případu a záleží čistě na datech, na předpokládaném tvaru distribuce výstupních dat, atd. Existuje jich tedy mnoho, pro ilustraci předvedeme několik nejběžnějších

$$\begin{aligned} &\text{Identita:} && f(x) = x, \\ &\text{Sigmoidální:} && f(x) = \sigma(x) = \frac{1}{1+\exp(-x)}, \\ &\text{Jednotkový skok:} && f(x) = \begin{cases} 1 & \text{pro } x \geq 0 \\ 0 & \text{pro } x < 0 \end{cases}, \\ &\text{ReLU } \textit{(Rectified Linear Unit)}: && f(x) = \begin{cases} x & \text{pro } x \geq 0 \\ 0 & \text{pro } x < 0 \end{cases}. \end{aligned} \tag{2.10}$$

Pokud tedy spojíme všechny tyto kroky a zvolíme–li například sigmoidální tvar aktivační



Obrázek 2.3: Sigmoidální aktivační funkce. Tato funkce zajistí, aby se výstup neuronové sítě nacházel v intervalu $(0, 1)$.

funkce σ, dostaneme tvar dvouvrstvé neuronové sítě

$$y_k(\mathbf{x}, \mathbf{w}) = \sigma\left(\sum_{j=1}^{m} w_{kj}^{(2)} \cdot h\left(\sum_{i=1}^{n} w_{ji}^{(1)} x_i + w_{j0}^{(1)}\right) + w_{k0}^{(2)}\right). \tag{2.11}$$

Všechny váhy a složky prahu byly umístěny do vektoru vah $\mathbf{w}$. Neuronová síť je jednoduše řečeno pouze nelineární funkce z množiny vstupních proměnných $\{x_i\}_{i=1}^{n}$ do množiny $\{y_k\}_{k=1}^{l}$,

určená vektorem **w**. Na množství vrstev v neuronové síti se meze nekladou, alternativně lze sestrojovat další a další vrstvy.

2.3 Variační autoencoder

Jedna z mnoha metod, jak využít neuronové sítě, je metoda variačního autoencoderu [5] [11]. Cílem je najít hustotu $p(\mathbf{x})$ vzorků $\{x_i\}_{i=1}^n$. Předpokládáme následující vztahy

$$\mathbf{x} = f_\theta(\mathbf{z}) + \epsilon, \tag{2.12}$$

kde $\epsilon \sim \mathcal{N}\left(0, \sigma^2 \cdot \mathbb{I}\right)$ a $f_\theta(\mathbf{z})$ je neuronová síť. Využijeme následující formu aproximace

$$p(\mathbf{x}) = \int p(\mathbf{x}|\mathbf{z})p(\mathbf{z})\mathrm{d}\mathbf{z}. \tag{2.13}$$

Podle vztahu pro **x** určíme distribuci $p(\mathbf{x}|\mathbf{z})$ a $p(\mathbf{z})$ zvolíme jednoduše

$$\begin{aligned} p(\mathbf{x}|\mathbf{z}) &= \mathcal{N}\left(f_\theta(\mathbf{z}), \sigma^2 \cdot \mathbb{I}\right) \\ p(\mathbf{z}) &= \mathcal{N}(0, \mathbb{I}) \end{aligned} \tag{2.14}$$

2.3.1 Naivní přístup

K nalezení $p(\mathbf{x})$ je třeba najít parametry θ transformace $f_\theta(\mathbf{z})$, proto zkusme sestavit věrohodnostní funkci $\log p(\mathbf{x}) = \log \prod_{i=1}^n p(x_i)$ a minimalizovat

$$\begin{aligned} \hat{\theta} &= \arg\min_\theta \sum_{i=1}^n \log p(x_i) \\ &= \arg\min_\theta \sum_{i=1}^n \log \int \mathcal{N}\left(f_\theta(z_j), \sigma^2\right) \mathcal{N}(0,1)\, \mathrm{d}z_j \\ &= \arg\min_\theta \sum_{i=1}^n \log \sum_{j=1}^n \exp\left\{-\frac{1}{2\sigma^2}\left(x_i - f_\theta(z_j)\right)^2\right\} \cdot \exp\left\{-\frac{z_j^2}{2}\right\}. \end{aligned} \tag{2.15}$$

Integrace přes **z** je nahrazena vzorkováním. Tento postup ovšem při minimalizaci nemusí konvergovat ke správným výsledkům.

2.3.2 Variační Bayseova metoda

Lepší metodou se ukazuje vzorkovat z podmíněné distribuce $q(\mathbf{z}|\mathbf{x})$ a využít ELBO

$$\begin{aligned} D_{KL}\left(q(\mathbf{z}|\mathbf{x}) \| p(\mathbf{z}|\mathbf{x})\right) &= \mathbb{E}_q\left[\log q(\mathbf{z}|\mathbf{x}) - \log p(\mathbf{z}|\mathbf{x})\right] \\ &= \mathbb{E}_q\left[\log q(\mathbf{z}|\mathbf{x}) - \log p(\mathbf{x}|\mathbf{z}) - \log p(\mathbf{z}) + \log p(\mathbf{x})\right]. \end{aligned} \tag{2.16}$$

Tuto rovnici můžeme přepsat pomocí KL–divergence

$$\log p(\mathbf{x}) - D_{KL}\left(q(\mathbf{z}|\mathbf{x}) \| p(\mathbf{z}|\mathbf{x})\right) = \mathbb{E}_q\left[\log p(\mathbf{x}|\mathbf{z})\right] - D_{KL}\left(q(\mathbf{z}|\mathbf{x}) \| p(\mathbf{z})\right), \tag{2.17}$$

kde pravá strana této rovnice je lower bound objektu $\log p(\mathbf{x})$. Jestliže vybereme parametrickou formu distribuce

$$q(\mathbf{z}|\mathbf{x}) = \mathcal{N}\left(\mu_\phi(\mathbf{x}), \operatorname{diag}\left(\sigma_\phi^2(\mathbf{x})\right)\right), \tag{2.18}$$

můžeme parametry θ a ϕ minimalizovat zároveň a to následovně

$$\begin{aligned}\hat{\theta}, \hat{\phi} &= \arg\min_{\theta,\phi} \sum_{i=1}^{n} \log p(x_i) \\ &= \arg\min_{\theta,\phi} \left\{\mathbb{E}_q\left[\log p(\mathbf{x}|\mathbf{z})\right] - D_{KL}\left(q(\mathbf{z}|\mathbf{x}) \| p(\mathbf{z})\right)\right\}.\end{aligned} \tag{2.19}$$

V metodě variačního autoencoderu jsou nezbytné následující dva fakty. První je trik v reparametrizaci

$$\mathbf{z} = \mu_\phi(\mathbf{x}) + \sigma_\phi(\mathbf{x}) \odot \epsilon, \tag{2.20}$$

kde $\odot$ značí Hadamardův součin, čili součin po složkách. To můžeme zapsat jednodušeji takto

$$z_i = \mu_\phi(x_i) + \sigma_\phi(x_i) \cdot \epsilon_i. \tag{2.21}$$

Nejedná se v podstatě o nic jiného, než o transformaci náhodné veličiny. Druhou důležitou věcí je fakt, že KL–divergence dvou gaussovských distribucí má analytické řešení

$$\begin{aligned}D_{KL}\left(q(\mathbf{z}|\mathbf{x}) \| p(\mathbf{z})\right) &= \frac{1}{2}\left[\operatorname{tr}\left(\operatorname{diag}\left(\sigma_\phi^2(\mathbf{x})\right)\right) - \mu_\phi^\mathsf{T}(\mathbf{x})\mu_\phi(\mathbf{x}) - k - \log\det\operatorname{diag}\left(\sigma_\phi^2(\mathbf{x})\right)\right] \\ &= \frac{1}{2}\left[\sum_{l=1}^{k}(\sigma_\phi^2(\mathbf{x})) - \mu^\mathsf{T}(\mathbf{x})\mu_\phi(x) - k - \sum_{l=1}^{k}\log\sigma_\phi^2(\mathbf{x})\right].\end{aligned} \tag{2.22}$$

Kdybychom totiž nevybrali aproximační distribuci gaussovskou, nemohli bychom tímto způsobem $\hat{\theta}, \hat{\phi}$ určit. Díky tomu získáme konečný tvar

$$\hat{\theta}, \hat{\phi} = \arg\min_{\theta,\phi}\left[\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{p}\left[x_i - f_\theta\left(\mu_\phi(x_i) + \sigma_\phi(x_i)\cdot\epsilon_{i,j}\right)\right]^2 - \frac{1}{2}\left[\sum_{l=1}^{k}(\sigma_\phi^2(x_i)) - \mu_\phi^\mathsf{T}(x_i)\mu_\phi(x_i) - k - \sum_{l=1}^{k}\log\sigma_\phi^2(x_i)\right]\right] \tag{2.23}$$

Příklad

Jednoduchým příkladem může být následující problém, kde v rovnici $x = f_\theta(z) + \epsilon$, je funkce f pouze ve tvaru

$$f_\theta(z) = z + \theta. \tag{2.24}$$

V tomto případě můžeme spočítat analyticky následující distribuce

$$\begin{aligned}p(x) &= \mathcal{N}\left(\theta, \sigma^2 + 1\right) \\ p(z|x) &= \mathcal{N}\left(\frac{x-\theta}{\sigma^2+1}, \frac{\sigma^2}{\sigma^2+1}\right).\end{aligned} \tag{2.25}$$

Díky tomu můžeme zvolit následující formu aproximační distribuce

$$q\left(z|x\right) = \mathcal{N}\left(\gamma x - \theta, \gamma\sigma^2\right), \tag{2.26}$$

kde $\gamma = \frac{1}{\sigma^2+1}$, čímž jsme získali $\mu_\phi\left(x\right)$ a $\sigma_\phi(x)$. Nyní zbývá dosadit do (2.23) - tím získáme

$$\hat{\theta}, \hat{\phi} = \arg\min_{\theta,\phi}\left[\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{p}\left[x_i - f_\theta\left(\mu_\phi(x_i) + \sigma_\phi(x_i)\cdot\epsilon_{i,j}\right)\right]^2 - \frac{1}{2}\left[\sum_{l=1}^{k}(\sigma_\phi^2(x_i)) - \mu_\phi^\intercal(x_i)\mu_\phi(x_i) - k - \sum_{l=1}^{k}\log\sigma_\phi^2(x_i)\right]\right] \tag{2.27}$$

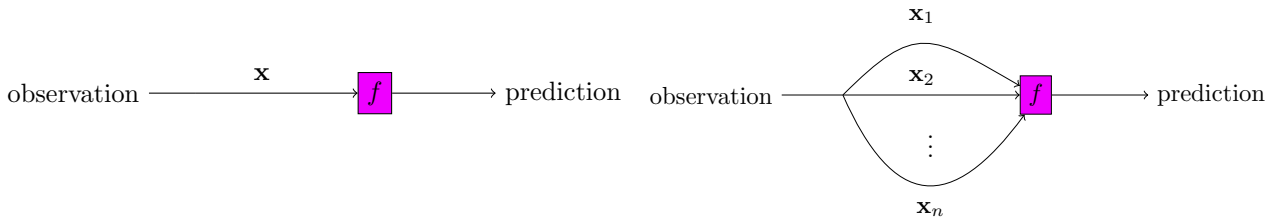
Kapitola 3

Stromové struktury

Stromovou strukturou dat rozumíme množinu datových záznamů popsaných pomocí množiny vrcholů a hran. Vrcholy dané stromové struktury představují jednotlivé body x a y. V podstatě si to můžeme představit opravdu jako strom – má jeden kořen, v první úrovni se dělí na k_1 větví, každá další větev se v druhé úrovni dělí na k_{2_i} a tak dále. My se v této práci budeme zabývat pouze kořenem a první úrovní větví.

3.1 Multi-instanční učení

Multi instanční učení *(Multiple Instance Learning, MIL)* se od klasického strojového učení liší tím, že každý vzorek je popsán pomocí množiny vektorů hodnot $\{\mathbf{x}_1, \ldots, \mathbf{x}_n\}$, zatímco u klasického strojového učení je daný vzorek popsán jedním vektorem hodnot $\mathbf{x}$. Tuto množinu vektorů nazýváme pluk *(bag)* a jednotlivé vektory nazýváme instance *(instances)*, přičemž velikost této množiny může nabývat jakéhokoliv přirozeného čísla včetně 0.



(a) Strandardní strojové učení

(b) Multi-instanční učení

Obrázek 3.1: Rozdíl mezi standardním strojovým učením a multi-instanční učením [13].

Příklad

Mějme vektor pozorování $\mathbf{y} = (y_1, \ldots, y_n)$. Předpokládejme takový model, který ke každému $y_i \in \mathbf{y}$, přiřazuje vektor datových záznamů $\mathbf{x}_i$, $i \in \{1, \ldots, n\}$, přičemž každý $\mathbf{x}_i$ má různý počet prvků $x_j^{(i)}$, $j \in \left\{1, \ldots, N_x^{(i)}\right\}$. Máme tedy $\mathcal{X} = (\mathbf{x}_1, \ldots, \mathbf{x}_n)$, kde každý vektor $\mathbf{x}_i$ může mít jiný

počet prvků $N_x^{(i)}$. Celkový počet datových záznamů v každé instanci množiny $\mathcal{X}$ je m, platí tedy $\sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{N_x^{(i)}} x_j^{(i)} = m$. Přiřazení probíhá následujícím způsobem

$$\begin{aligned} \mathbf{x}_1 &\longmapsto y_1, \\ \mathbf{x}_2 &\longmapsto y_2, \\ &\vdots \\ \mathbf{x}_n &\longmapsto y_n. \end{aligned} \tag{3.1}$$

Jednoduše řečeno je to přiřazení popořadě. Abychom to uvedli do kontextu stromových struktur, znamená to, že y_i jsou uzly jednoho typu, $x_j^{(i)}$ jsou uzly druhého typu, mezi nimiž existují hrany, čili funkce, které tyto hrany spojují. Počet prvků v jedné instanci $N_x^{(i)}$ nechť je generován například Poissonovým rozdělením, tedy

$$p\left(N_x^{(i)}\right) = \mathrm{Po}\,(\lambda) \quad \forall i \in \{1, \ldots, n\}\,. \tag{3.2}$$

Potom všechny prvky každé instance $\mathbf{x}_i$ nechť jsou například generovány pomocí uniformního rozdělení

$$p\left(x_j^{(i)}\right) = \mathrm{U}\,(a, b) \quad \forall i \in \{1, \ldots, n\} \quad \& \quad \forall j \in \left\{1, \ldots, N_x^{(i)}\right\}. \tag{3.3}$$

Jednotlivá y_i potom můžou být určena nějakou závislostí na **agregační funkci** prvků v instancích k nim přiřazených. **Agregační funkcí** budeme rozumět takovou funkci, která dokáže seskupit, neboli agregovat, vícero datových záznamů do jednoho. Nejčastěji používané agregační funkce jsou aritmetický **průměr**, **maximum**, **minimum**, nebo **součet**.
Pokusme se nalézt sdruženou distribuci $p(y, \bar{x}_i)$, kde $\bar{x}_i$ značí aritmetický průměr prvků v i–té instanci, čili

$$\bar{x}_i = \frac{1}{N_x^{(i)}} \sum_{l=1}^{N_x^{(i)}} x_l^{(i)}. \tag{3.4}$$

Použijeme opět součinové pravidlo

$$p(y, \bar{x}_i) = p(y|\bar{x}_i) \cdot p(\bar{x}_i) \tag{3.5}$$

a pokusíme se nalézt tyto dvě distribuce. Tento postup je nám známý už z kapitoly (2). Pro určení podmíněné distribuce $p(y, \bar{x}_i)$ použijeme opět metodu nejmenších čtverců a dostaneme

$$p(y, \bar{x}_i) = \mathcal{N}\left(X \cdot \hat{\theta}, \sigma^2\right). \tag{3.6}$$

Ovšem zde jsou prvky vektoru X právě aritmetické průměry, tedy

$$X = \left(1, \bar{x}, \bar{x}^2, \ldots, \bar{x}^p\right). \tag{3.7}$$

Určit distribuci $p(\bar{x}_i)$ lze určit obdobně pomocí histogramu. Navíc víme–li, že se jedná o výběrové průměry, je z centrální limitní věty [6] jasné, že se bude jednat o Gaussovo rozdělení. Střední hodnotu můžeme odhadnout výběrovým průměrem z $\bar{x}_i$, tedy

$$\bar{\bar{x}} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \bar{x}_i \tag{3.8}$$

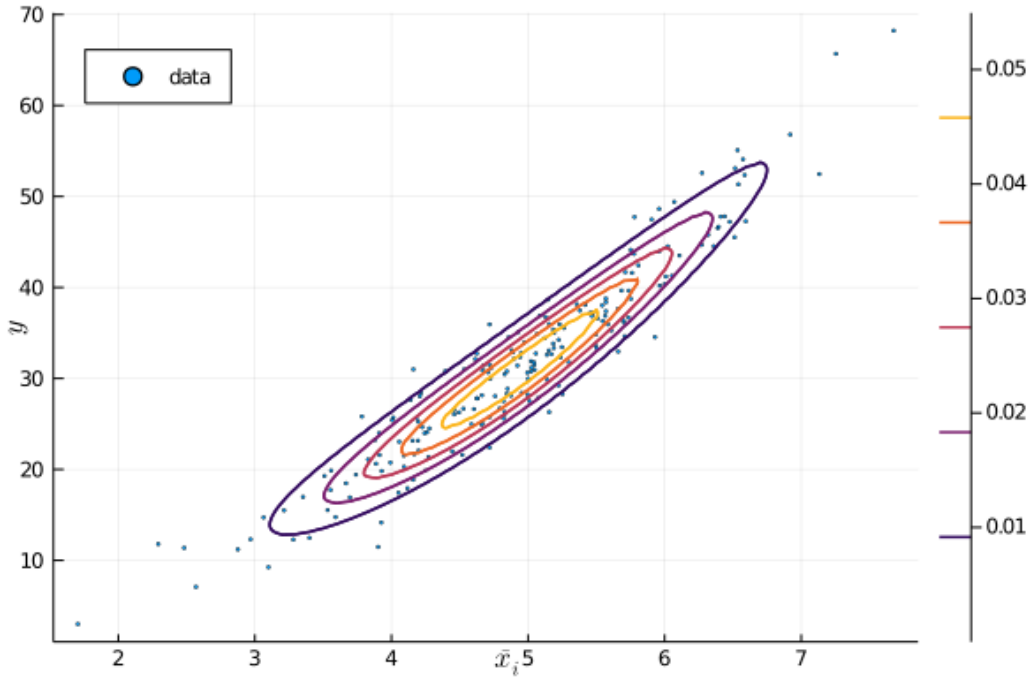
a rozptyl odhadneme pomocí výběrového rozptylu

$$\text{Var}\ (\bar{x}_i) = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(\bar{x}_i - \bar{\bar{x}})^2\,. \tag{3.9}$$

Oba objekty jsou maximálně věrohodnými odhady Gaussova rozdělení. Získáme tak tvar

$$p(\bar{x}_i) = \mathcal{N}\left(\bar{\bar{x}}_i, \text{Var}\ (\bar{x}_i)\right). \tag{3.10}$$

Tímto máme spočtené obě složky. Pro vizualizaci sdružené distribuce $p(y, \bar{x}_i)$ využijeme opět contour plot. Jak tato distribuce vypadá vidíme na obrázku 3.2.
Najít distribuci $p(y|x)$ není v tomto případě snadný úkol, proto jsme se omezili pouze na hledání



Obrázek 3.2: Countour plot distribuce $p(y, \bar{x}_i)$, kde $m = 200, \lambda = 10, a = 0, b = 10$ a y závisí na $\bar{x}_i$ kvadraticky.

distribuce z průměrů jednotlivých složek $\mathcal{X}$.

Příklad

Dalším příkladem stromové struktury může být následující zjednodušený finanční model, který udává hodnotu transakce na bankovním účtu klientů. Budou to dvě gaussovské směsi

$$\begin{aligned} p(x_i|y=1) &= w_1 \cdot \mathcal{N}\left(\mu_1, \sigma_1^2\right) + (1-w_1)\cdot \mathcal{N}\left(\mu_2, \sigma_2^2\right), \\ p(x_j|y=0) &= w_2 \cdot \mathcal{N}\left(\mu_3, \sigma_3^2\right) + (1-w_2)\cdot \mathcal{N}\left(\mu_4, \sigma_4^2\right), \end{aligned} \tag{3.11}$$

přičemž z první máme máme n a z druhé m vzorků. n y je teď diskrétní náhodná veličina nabývajících pouze dvou hodnot z $\{0, 1\}$ a $w \in [0, 1]$ je váha. Veličina y navíc udává, zda je klient schopen splácet půjčku, kde $y = 0$ znamená *není schopen splácet* a $y = 1$ znamená *je schopen splácet*. Dále budeme uvažovat počty transakcí N_x daného klienta a distribuce

$$\begin{aligned} p(N_x|y = 1) &= \mathrm{Po}\left(\lambda_1\right), \\ p(N_x|y = 0) &= \mathrm{Po}\left(\lambda_2\right), \end{aligned} \tag{3.12}$$

což tedy udává takovou distribuci počtů transakcí klienta, jestli je schopen nebo není schopen splácet půjčku.
Jak takové distribuce odhadnout? Jelikož známe tvar těchto distribucí, můžeme použít maximálně věrohodný odhad MLE. Sestavíme věrohodnostní funkce

$$\begin{aligned} \ell\left(\mu_1, \mu_2, \sigma_1^2, \sigma_2^2\right) &= \log\left(\prod_{i=1}^{n} p(x_i|y = 1)\right), \\ \ell\left(\mu_3, \mu_4, \sigma_3^2, \sigma_4^2\right) &= \log\left(\prod_{j=1}^{m} p(x_j|y = 0)\right). \end{aligned} \tag{3.13}$$

Obdobně bychom sestavili věrohodnostní funkce i pro Poissonovo rozdělení. Věrohodnostní funkce opět numericky maximalizujeme pomocí optimalizační metody ADAM a získáme

$$\begin{aligned} \hat{\mu_1}, \hat{\mu_2}, \hat{\sigma_1^2}, \hat{\sigma_2^2} &= \underset{\mu_1, \mu_2, \sigma_1^2, \sigma_2^2}{\arg\max} \log\left(\prod_{i=1}^{n} p(x_i|y = 1)\right) \\ \hat{\mu_3}, \hat{\mu_4}, \hat{\sigma_3^2}, \hat{\sigma_4^2} &= \underset{\mu_3, \mu_4, \sigma_3^2, \sigma_4^2}{\arg\max} \log\left(\prod_{j=1}^{m} p(x_j|y = 0)\right). \end{aligned} \tag{3.14}$$

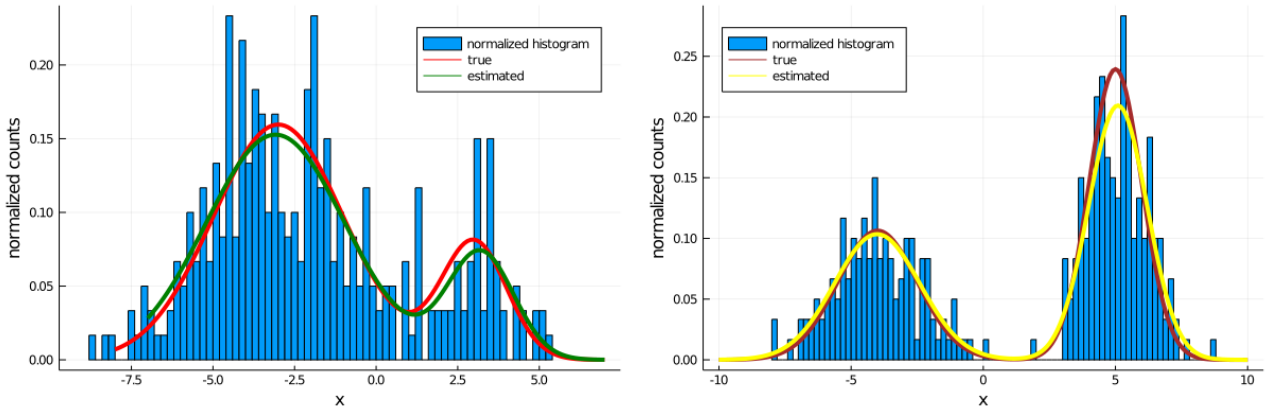
Pro Poissonovo rozdělení existuje však analytické řešení

$$\hat{\lambda} = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^{n} x_j, \tag{3.15}$$

čímž je výběrový průměr hodnot. Není tedy potřeba maximalizovat věrohodnostní funkci Poissonova rozdělení numericky. Nutno podotknout, že složitější gaussovskou směs bychom pomocí MLE odhadovat nemohli. Pro odhad parametrů gaussovské směsi se běžně používá robustnější metoda, tzv. EM algoritmus [1] *(Expectation Maximization)*, který je iterativní a navíc využívá latentních proměnných. K odhadu tedy potřebujeme nějakou dodatečnou informaci, typicky informaci o tom, do kterého shluku (*clusteru*) daný bod patří. Nicméně, že zde funguje i MLE, se můžeme přesvědčit na obrázku 3.3.

V této chvíli bychom chtěli rozhodnout, do které třídy klient patří. Sestavíme následující distribuce

$$\begin{aligned} p(\mathbf{x}, N_x|y = 1) &= \left(\prod_{i=1}^{N_x} p(x_i|y = 1)\right) \cdot p\left(N_x|y = 1\right), \\ p(\mathbf{x}, N_x|y = 0) &= \left(\prod_{i=1}^{N_x} p(x_i|y = 0)\right) \cdot p\left(N_x|y = 0\right) \end{aligned} \tag{3.16}$$



(a) Distribuce $p(x|y = 1)$

(b) Distribuce $p(x|y = 0)$

Obrázek 3.3: Dvě gaussovské směsi, kde červenou a hnědou barvou jsou nakresleny skutečné distribuce, zeleně a žlutě jsou jejich MLE odhady.

a s jejich pomocí provedeme test poměrem věrohodností [7] *(Likelihood Ratio Test, LRT)*

$$\begin{aligned} \Lambda_0(\mathbf{x}) &= \frac{p(\mathbf{x}, N_x|y=0)}{p(\mathbf{x}, N_x|y=1) + p(\mathbf{x}, N_x|y=0)}, \\ \Lambda_1(\mathbf{x}) &= \frac{p(\mathbf{x}, N_x|y=1)}{p(\mathbf{x}, N_x|y=1) + p(\mathbf{x}, N_x|y=0)}. \end{aligned} \tag{3.17}$$

První test udává pravděpodobnost s jakou jsou data vybraná s distribuce $p(x, N_x|y = 1)$ a u druhý test. Pokud tedy budeme mít N_x pozorování z neznámé distribuce $p^*(x, N_x)$, jsme schopni rozhodnout do jaké třídy patří. V kontextu finančního modelu nás klient žádá o půjčku a my na základě počtu a hodnoty jeho transakcí na jeho účtu chceme rozhodnout, zdali se jedná o člověka, který je schopen splatit potenciálně půjčené peníze, nebo nejedná. Stanovíme konstanty K_0 a K_1 takové, že

$$\begin{aligned} \Lambda_0(\mathbf{x}) &\leq K_0, \\ \Lambda_1(\mathbf{x}) &\leq K_1, \end{aligned} \tag{3.18}$$

které budou udávat pravděpodobnost, s jakou jsme ještě schopni přijmout hypotézu, jsou-li daná data vybraná z jednotlivých distribucí $p(x, N_x|y = 0)$, $p(x, N_x|y = 1)$ nebo nejsou. Při malém počtu transakcí N_x nebude samozřejmě test přesný.

Vylepšení

Položme si otázku, zdalipak nelze klasifikace do třídy *schopen splácet* nebo *není schopen splácet*, nějakým způsobem vylepšit. Může nastat situace, že klient nám nezapadne ani do jednoho modelu. Pro tento případ stanovíme hustotu

$$p(\mathbf{x}, N_x|y = 2) = \mathcal{N}\left(0, 10^5\right), \tag{3.19}$$

kde $y = 2$ bude indikátorem, že je něco s klientem v nepořádku. Test poměrem věrohodností potom nabude tvaru

$$\Lambda_2(\mathbf{x}) = \frac{p(\mathbf{x}, N_x|y = 2)}{p(\mathbf{x}, N_x|y = 2) + p(\mathbf{x}, N_x|y = 1) + p(\mathbf{x}, N_x|y = 0)}. \tag{3.20}$$

Můžeme ho nazvat jako test podivnosti klienta.

Závěr

[13] [9] [11] [12], [14], [3] , [4] [7] [6] [8] [2]
Text závěru.... nnbf

Literatura

[1] Christopher M Bishop. *Pattern recognition and machine learning*. springer, 2006.

[2] Robert M Gray. *Entropy and information theory*. Springer Science & Business Media, 2011.

[3] E Jang. A beginner's guide to variational methods: Mean-field approximation, 2016. *URL https://blog. evjang. com/2016/08/variational-bayes. html. Accessed*, 1(02), 2018.

[4] L. Jirovský. *Teorie grafů ve výuce na střední škole*. Praha, 2008. Diplomová práce. Univerzita Karlova, Matematicko–fyzikální fakulta.

[5] Diederik P Kingma and Max Welling. Auto-encoding variational bayes. *arXiv preprint arXiv:1312.6114*, 2013.

[6] J. Kovář and N. Van de Meer. *Zápisky z míry a pravděpodobnosti*. Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská ČVUT v Praze, 2020.

[7] V. Kůs and M. Kovanda. *Matematická statistika*. Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská ČVUT v Praze, 2020.

[8] Eric Learned-Miller. Vector, matrix, and tensor derivatives.

[9] Tomas Pevny and Petr Somol. Discriminative models for multi-instance problems with tree structure. In *Proceedings of the 2016 ACM Workshop on Artificial Intelligence and Security*, pages 83–91, 2016.

[10] Sebastian Ruder. An overview of gradient descent optimization algorithms. *arXiv preprint arXiv:1609.04747*, 2016.

[11] Irhum Shafkat. Intuitively understanding variational autoencoders. *URL: https://towardsdatascience. com/intuitivelyunderstanding-variational-autoencoders-1bfe67eb5daf*, 2018.

[12] Rui Shu. Density estimation: Variational autoencoders, 2018.

[13] Mandlík Šimon. Mapování internetu—modelování interakcí entit v komplexních heterogenních sítích. Master's thesis, České vysoké učení technické v Praze. Výpočetní a informační centrum, 2020.

[14] Xitong Yang. Understanding the variational lower bound, 2017.