

# Přednáška 8: Bilineární model a bayesovský přístup k maticové dekompozici, odhad počtu komponent, ukázka aplikací

Ondřej Tichý

Bayesovské metody v machine learningu (BML)

April 16, 2018

# Obsah přednášky

- ▶ opakování
- ▶ bayesovská formulace maticové dekompozice
  - ▶ odhad počtu komponent
- ▶ další předpoklady a přístupy
- ▶ praktické aplikace
  - ▶ vyhodnocení dat ze scintigrafie ledvin
  - ▶ pozitronová emisní tomografie (PET)
  - ▶ hyperspektrální zobrazování

# Formulace modelu

## Maticová formulace

- ▶ každý obrázek (sloupec matic  $D$ )  $\mathbf{d}_t$  je lineární kombinace jednotlivých zdrojových obrázků:

$$\mathbf{d}_t = \mathbf{a}_1 x_{1,t} + \mathbf{a}_2 x_{2,t} + \cdots + \mathbf{a}_r x_{r,t} \quad (1)$$

- ▶ měřená data:  $D = [\mathbf{d}_1, \dots, \mathbf{d}_t, \dots, \mathbf{d}_n]$
  - ▶ zdrojové obrázky:  $A = [\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_r]$
  - ▶ váhy zdrojových obrázků:  $X = [\mathbf{x}_1^T, \dots, \mathbf{x}_t^T, \dots, \mathbf{x}_n^T]^T$
- ▶ maticový zápis:

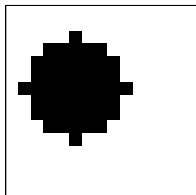
$$D = AX^T. \quad (2)$$

pozn.:  $D_{i,j} = \sum_{k=1}^r A_{i,k} X_{k,j}$

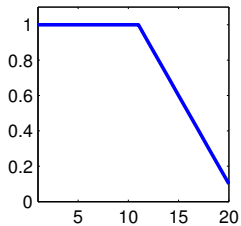
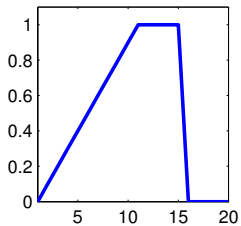
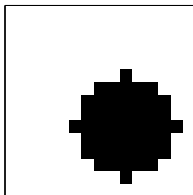
# Cvičná data

Simulované hodnoty

Zdroj 1



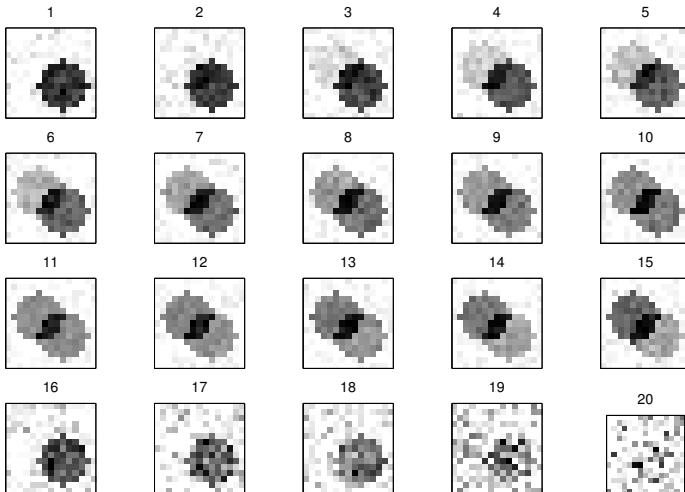
Zdroj 2



# Cvičná data

## Data

- vynásobíme  $AX^T$  a přidáme šum:



# Opakování

- ▶ PCA a SVD
- ▶ NMF
- ▶ Variační PCA
- ▶ Variační PCA s pozitivitou

► Variační PCA

$$f(D|A, X, \omega) = \mathcal{N}\left(AX^T, \omega^{-1}I_p \otimes I_n\right), \quad (3)$$

$$f(\omega) = \mathcal{G}(\vartheta_0, \rho_0), \quad (4)$$

$$f(A) = \mathcal{N}(\mathbf{0}, I_p \otimes I_r), \quad (5)$$

$$f(X) = \mathcal{N}(\mathbf{0}, I_n \otimes I_r). \quad (6)$$

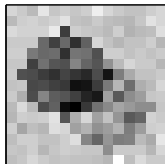
► odhad matice  $A$ :  $\tilde{f}(A|D, r) = \mathcal{N}_A(\mu_A, I_p \otimes \Sigma_A)$ , kde

$$\Sigma_A = \left(\widehat{\omega} \widehat{X^T X} + I_r\right)^{-1}, \quad \mu_A = \widehat{\omega} D \widehat{X} \Sigma_A. \quad (7)$$

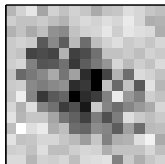
# Opakování

## Variační PCA

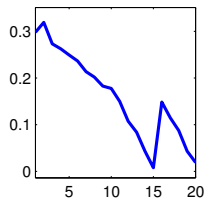
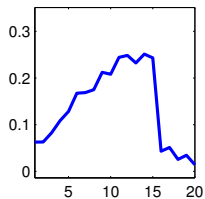
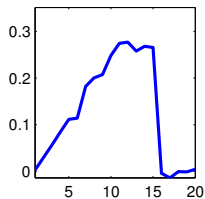
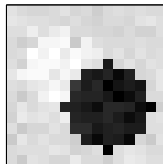
Zdroj 1



Zdroj 2



Zdroj 3

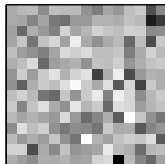




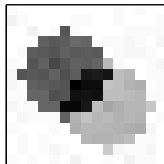
# Opakování

## Variační PCA s pozitivitou

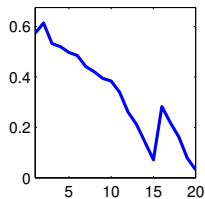
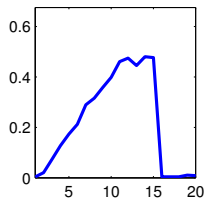
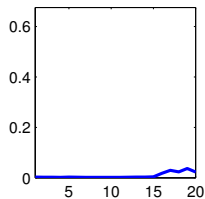
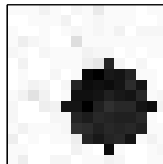
Zdroj 1



Zdroj 2



Zdroj 3



# Variační PCA s odhadem počtu komponent

## Formulace

- ▶ model pozorování

$$D = AX^T + E, \quad (8)$$

kde  $E_{i,j} = \mathcal{N}(0, \omega^{-1})$ ,  $\forall i, \forall j$ .

- ▶ model dat

$$f(D|A, X, \omega) = \mathcal{N}\left(AX^T, \omega^{-1}I_p \otimes I_n\right), \quad (9)$$

kde  $\omega$  je (neznámá) variance šumu s apriorním modelem

$$f(\omega) = \mathcal{G}(\vartheta_0, \rho_0). \quad (10)$$

- ▶ pozn.:

$$\begin{aligned} \mathcal{N}_A(\mu_A, \Sigma_p \otimes \Phi_r) &= \frac{1}{(2\pi)^{\frac{pr}{2}} |\Sigma_p|^{\frac{r}{2}} |\Phi_r|^{\frac{p}{2}}} \times \\ &\times \exp\left(-\frac{1}{2} \text{tr}\left[\Sigma_p^{-1}(A - \mu_A)(\Phi_r^{-1})^T(A - \mu_A)^T\right]\right), \quad (11) \end{aligned}$$

# Variační PCA s odhadem počtu komponent

## Formulace

- ▶ předpokládejme známé (zvolené, nadsazené)  $r$
- ▶ apriorní modely pro  $A$  jsou voleny jako

$$f(A) = \mathcal{N}(\mathbf{0}, I_p \otimes V^{-1}), \quad V = \text{diag}(\mathbf{v}), \quad \mathbf{v} = [v_1, \dots, v_r], \quad (12)$$

a apriorní model pro prvky vektoru  $\mathbf{v}$  volíme jako

$$f(v_k) = \mathcal{G}(\alpha_0, \beta_0), \quad \forall k \quad (13)$$

- ▶ model pro  $X$  necháme

$$f(X) = \mathcal{N}(\mathbf{0}, I_n \otimes I_r). \quad (14)$$

# Opakování

## Variační Bayesova aproximace

- ▶ máme model dat  $f(\mathbf{y}|\theta)$ ,
- ▶ máme  $q$  podmíněně nezávislých proměnných, tzn. pro jejich arpiorna platí

$$f(\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_q) = \prod_{i=1}^q f(\theta_i), \quad (15)$$

- ▶ pak aposteriorní rozdělení  $\tilde{f}(\theta_i|\mathbf{y})$  pro  $i$ tý parametr získáme VB aproximací jako

$$\tilde{f}(\theta_i|\mathbf{y}) \propto \exp \left[ E_{\tilde{f}(\theta_{\setminus i}|\mathbf{y})} (\ln f(\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_q, \mathbf{y})) \right], \quad \forall i. \quad (16)$$

# Variační PCA s odhadem počtu komponent

## Řešení

- ▶ odhad variance šumu:  $\tilde{f}(\omega|D, r) = \mathcal{G}_\omega(\vartheta, \rho)$ , kde

$$\vartheta = \vartheta_0 + \frac{np}{2}, \quad (17)$$

$$\rho = \rho_0 + \frac{1}{2} \text{tr} \left( DD^T - \widehat{A} \widehat{X}^T D^T - D \widehat{X} \widehat{A}^T \right) + \frac{1}{2} \text{tr} \left( \widehat{A}^T \widehat{A} \widehat{X}^T \widehat{X} \right) \quad (18)$$

s momentem  $\widehat{\omega} = \frac{\vartheta}{\rho}$ .

- ▶ odhad matice  $X$ :  $\tilde{f}(X|D, r) = \mathcal{N}_X(\mu_X, I_n \otimes \Sigma_X)$ , kde

$$\Sigma_X = \left( \widehat{\omega} \widehat{A}^T \widehat{A} + I_r \right)^{-1}, \quad \mu_X = \widehat{\omega} D^T \widehat{A} \Sigma_X. \quad (19)$$

# Variační PCA s odhadem počtu komponent

## Řešení

- ▶ odhad matice  $A$ :  $\tilde{f}(A|D, r) = \mathcal{N}_A(\mu_A, I_p \otimes \Sigma_A)$ , kde

$$\Sigma_A = \left( \widehat{\omega} \widehat{X^T X} + \widehat{V} \right)^{-1}, \quad \mu_A = \widehat{\omega} D \widehat{X} \Sigma_A. \quad (20)$$

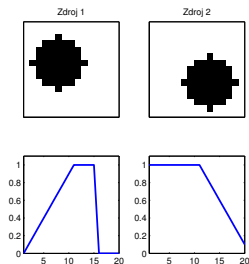
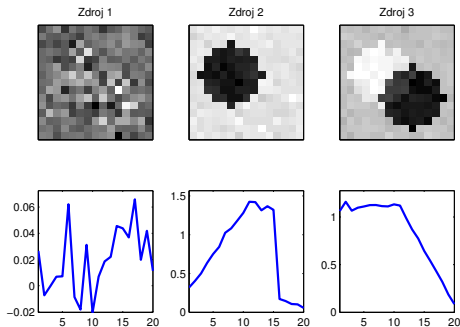
- ▶ odhad vektoru  $\mathbf{v}$ :  $\tilde{f}(v_k|D, r) = \mathcal{G}_{v_k}(\alpha_k, \beta_k)$ , kde

$$\alpha_k = \alpha_0 + \frac{p}{2}, \quad \beta_k = \beta_0 + \frac{1}{2} \left( \widehat{A^T A} \right)_{k,k}, \quad (21)$$

# Variační PCA s odhadem počtu komponent

## Cvičný příklad

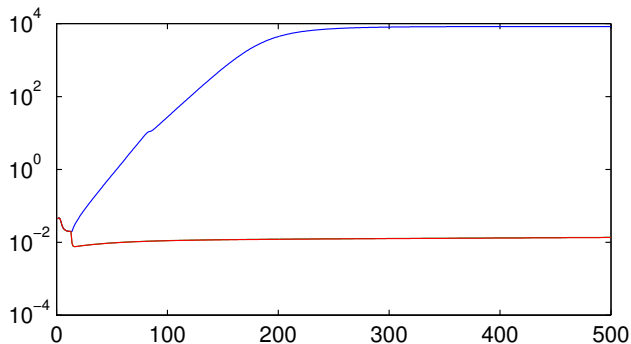
- ukážeme si případ pro  $r = 3$  a  $r = 6$ :



# Variační PCA s odhadem počtu komponent

## Cvičný příklad

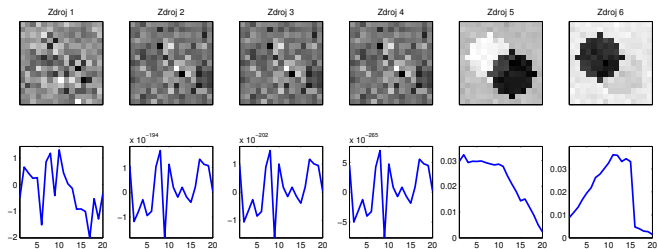
- vektor  $\mathbf{v}$  v průběhu iterací





# Variační PCA s odhadem počtu komponent

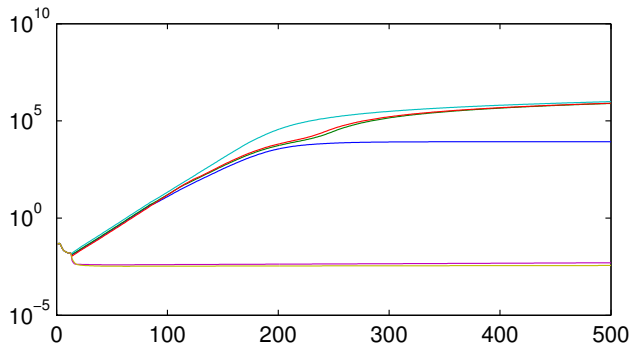
## Cvičný příklad



# Variační PCA s odhadem počtu komponent

## Cvičný příklad

- vektor  $\mathbf{v}$  v průběhu iterací



# Další možnosti

Jen zmínka...

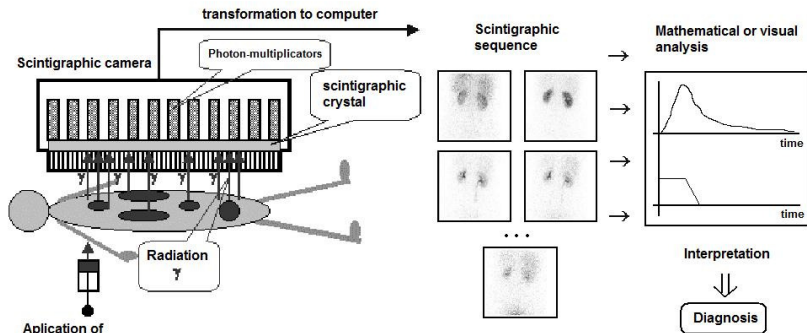
- ▶ řidkost na  $A$
- ▶ řidkost na  $X$
- ▶ modely šumu
- ▶ fyzikální modely křivek

# Praktické ukázky

- ▶ vyhodnocení dat ze scintigrafie ledvin
- ▶ pozitronová emisní tomografie (PET)
- ▶ hyperspektrální obrázky

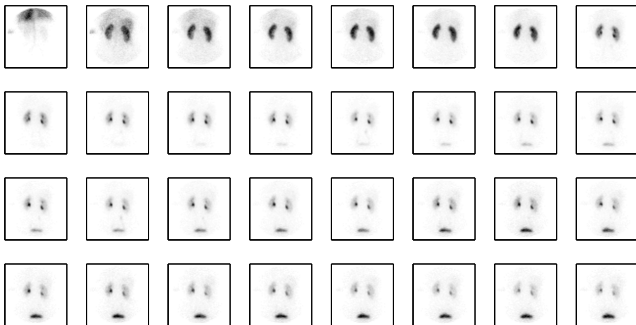
# Scintigrafie ledvin

## Vznik obrazu



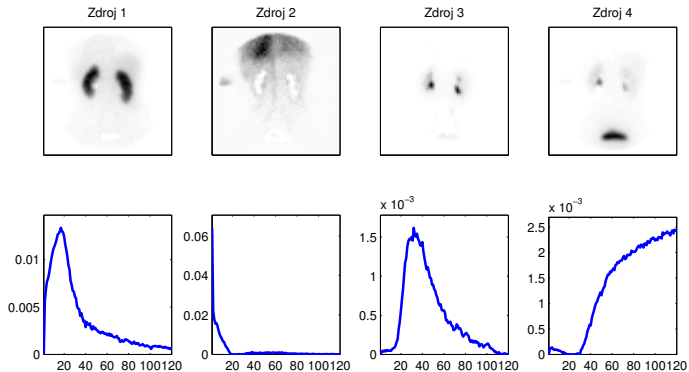
# Scintigrafie ledvin

## Obrazová sekvence



# Scintigrafie ledvin

## Separace



# Scintigrafie ledvin

## Případy

filename: drsprg\_011

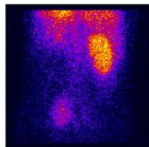
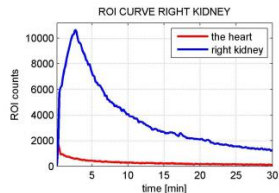
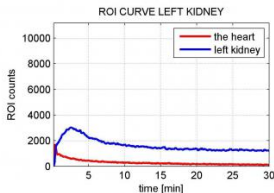
gender = M, age = 51 yrs

CKD stage = 1, LK = 18 %

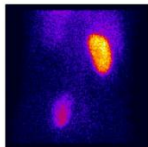
serum Cr - 0, Cr clearance - 0

99mTc-MAG3 - 0, 51Cr-EDTA - 0

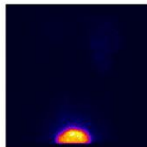
57Co-FLOOD - 1



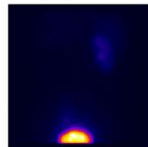
0 - 1 min



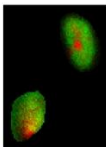
1 - 2 min



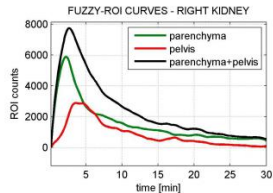
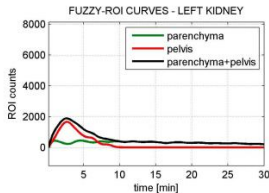
29 - 30 min



MEAN IMAGE



FUZZY ROIS





# Scintigrafie ledvin

## Případy

filename: drsprg\_020

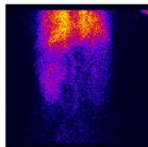
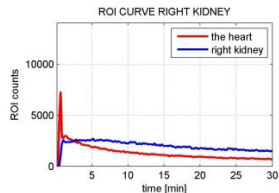
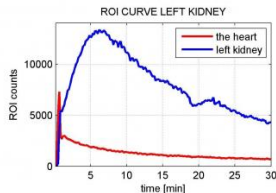
gender = F, age = 29 yrs

CKD stage = 2, LK = 91 %

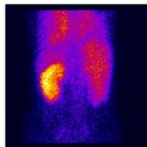
serum Cr - 1, Cr clearance - 1

99mTc-MAG3 - 1, 51Cr-EDTA - 1

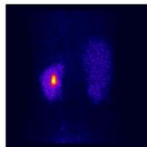
57Co-FLOOD - 0



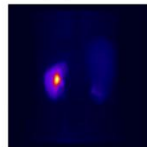
0 - 1 min



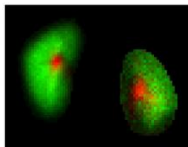
1 - 2 min



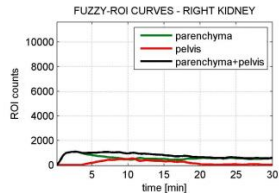
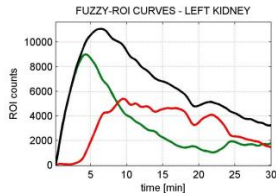
29 - 30 min



MEAN IMAGE



FUZZY ROIS



# Scintigrafie ledvin

## Případy

filename: drsprg\_026

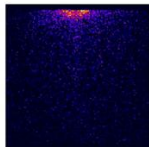
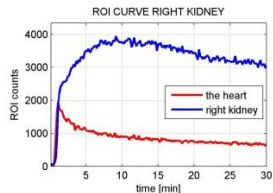
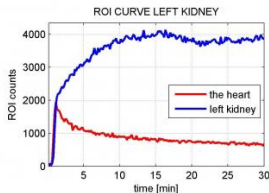
gender = F, age = 29 yrs

CKD stage = 4, LK = 51 %

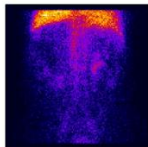
serum Cr - 1, Cr clearance - 1

99mTc-MAG3 - 1, 51Cr-EDTA - 1

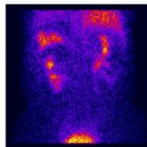
57Co-FLOOD - 0



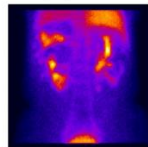
0 - 1 min



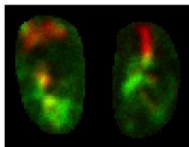
1 - 2 min



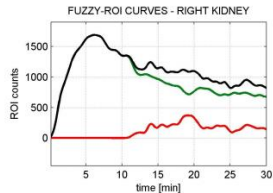
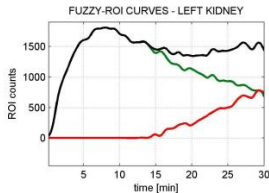
29 - 30 min



MEAN IMAGE

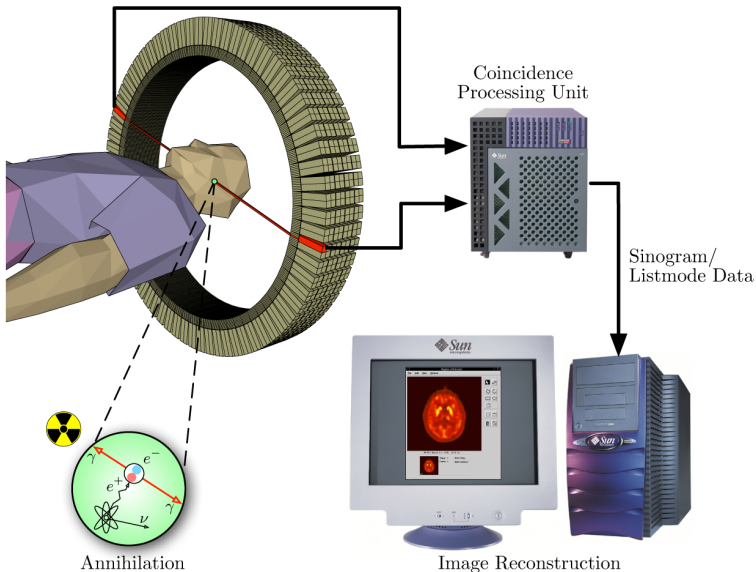


FUZZY ROIS



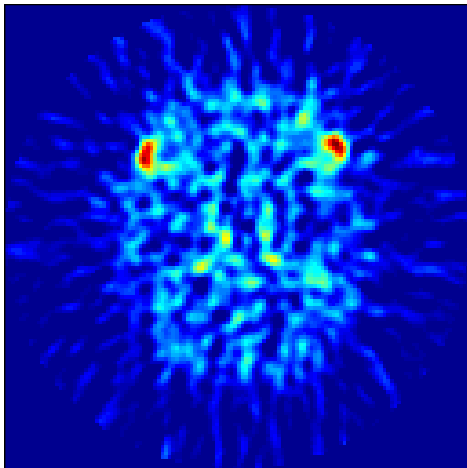
# Pozitronová emisní tomografie

## Vznik obrazu



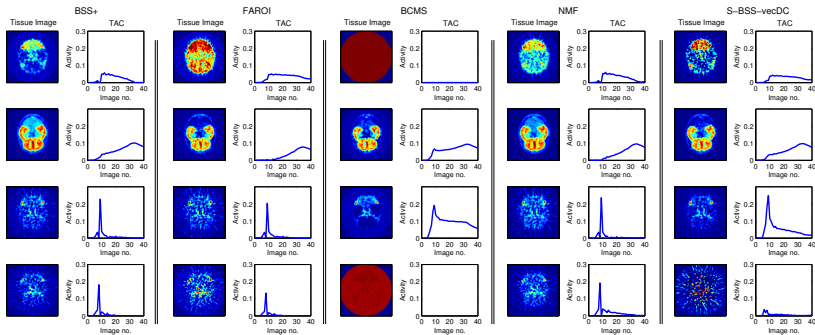
# Pozitronová emisní tomografie

1 řez



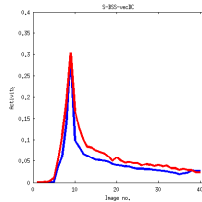
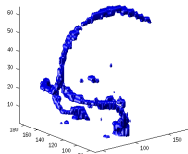
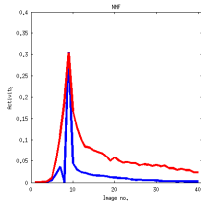
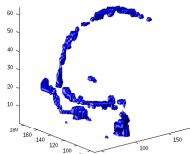
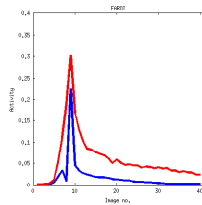
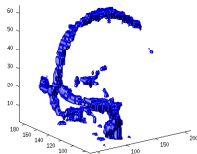
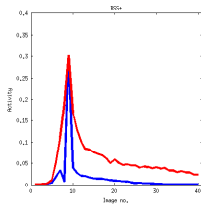
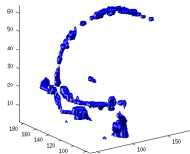
# Pozitronová emisní tomografie

## Separace 1 řezu



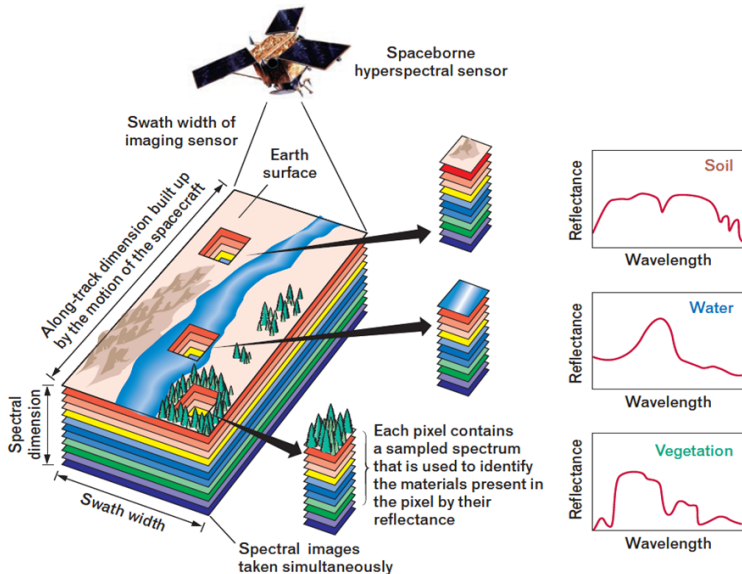
# Pozitronová emisní tomografie

## Separace objemu



# Hyper-spektrální snímkování

## Princip



# Hyper-spektrální snímkování

## Separace

