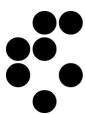
Modeliranje 1-D porazdelitve: razpadi Higgsovega bozona

1. naloga: Praktikum strojnega učenja v fiziki

predavatelj: prof. dr. Borut Paul Kerševan
asistent: Jan Gavranovič

Institut Jožef Stefan (F9)

13. oktober 2023



Institut
"Jožef Stefan"
Ljubljana, Slovenija

Univerza *v Ljubljani*
Fakulteta *za matematiko*
in fiziko

2. vaje

Pregled 2. vaje

1. Ocenjevanje parametrov (ponovitev predavanj):
   - Maximum likelihood estimation (MLE),
   - Maximum a posteriori estimation (MAP).
2. Različne metode (unbinned) fitanja in knjižnica `scikit-learn`:
   - Kernel Ridge Regression (KRR),
   - Gaussian Process Regression (GPR).
3. Podrobnejša navodila za reševanje naloge.
4. Zaključek 1. naloge.

Ocenjevanje parametrov

(*Parameter estimation*)

Maximum likelihood estimation - MLE

- Želimo poskati parametre $\boldsymbol{\theta}$, ki dajo največjo verjetnost podatkom $\mathcal{D}$.
- MLE definicija:

$$\hat{\boldsymbol{\theta}}_{\text{MLE}} \equiv \underset{\boldsymbol{\theta}}{\text{argmax}}\, p(\mathcal{D}|\boldsymbol{\theta}) \,.$$

- Predpostavimo, da so podatki *independent and identically distributed* (**iid**):

$$p(\mathcal{D}|\boldsymbol{\theta}) = \prod_{n=1}^{N} p(\mathbf{y}_n|\mathbf{x}_n, \boldsymbol{\theta}) \,, \quad \text{kjer je } p(\mathbf{y}_n|\mathbf{x}_n, \boldsymbol{\theta}) \text{ (pogojni) likelihood} \,.$$

- Ponavadi delamo z **log-likelihood**:

$$\mathcal{L}(\boldsymbol{\theta}) \equiv \log p(\mathcal{D}|\boldsymbol{\theta}) = \sum_{n=1}^{N} \log p(\mathbf{y}_n|\mathbf{x}_n, \boldsymbol{\theta}) \,.$$

- Glavna ideja strojnega učenja:

optimalni parametri: $\hat{\boldsymbol{\theta}} = \underset{\boldsymbol{\theta}}{\text{argmin}}\, \mathcal{L}(\boldsymbol{\theta})$, kjer je $\mathcal{L}(\boldsymbol{\theta})$ funkcija izgube/cene .

- MLE je tako podan z

$$\hat{\boldsymbol{\theta}}_{\text{MLE}} = \underset{\boldsymbol{\theta}}{\text{argmax}} \sum_{n=1}^{N} \log p(\mathbf{y}_n|\mathbf{x}_n, \boldsymbol{\theta}) \,.$$

- Optimizacijski algoritmi so narejeni za minimizacijo funkcij $\Rightarrow$ uporabimo **negative log-likelihood**:

$$\mathcal{L}(\boldsymbol{\theta}) = \text{NLL}(\boldsymbol{\theta}) = -\log p(\mathcal{D}|\boldsymbol{\theta}) = -\sum_{n=1}^{N} \log p(\mathbf{y}_n|\mathbf{x}_n, \boldsymbol{\theta}) \,.$$

- Za modele brez oznak $\mathbf{y}$ (*labels*) je MLE (*unsupervised*):

$$\hat{\boldsymbol{\theta}}_{\text{MLE}} = \underset{\boldsymbol{\theta}}{\text{argmax}} \left[-\sum_{n=1}^{N} \log p(\mathbf{x}_n|\boldsymbol{\theta}) \right]$$

ali zapisano s pričakovano vrednostjo:

$$\hat{\boldsymbol{\theta}}_{\text{MLE}} = \underset{\boldsymbol{\theta}}{\text{argmax}} \left[-\mathbb{E}_{\mathbf{x} \sim p_{\mathcal{D}}} \log p(\mathbf{x}|\boldsymbol{\theta}) \right] \,,$$

kjer je $p_{\mathcal{D}}$ empirična/podatkovna porazdelitev.

Maximum a posteriori estimation - MAP

- Ponovimo Bayesov izrek:

$$p(\boldsymbol{\theta}|\mathcal{D}) = \frac{p(\mathcal{D}|\boldsymbol{\theta})p(\boldsymbol{\theta})}{p(\mathcal{D})} \propto p(\mathcal{D}|\boldsymbol{\theta})p(\boldsymbol{\theta})\,.$$

- Količine zgoraj predstavljajo:
  1. $p(\boldsymbol{\theta}|\mathcal{D})$ - aposteriorna porazdelitev $\boldsymbol{\theta}$ (znanje o parametrih po opazovanju podatkov),
  2. $p(\mathcal{D}|\boldsymbol{\theta})$ - verjetje (likelihood) podatkov pri danih parametrih (kaj nam povejo podatki),
  3. $p(\boldsymbol{\theta})$ - prior (kaj vemo o parametrih pred opazovanjem podatkov),
  4. $p(\mathcal{D})$ - porazdelitev podatkov (normalizacijski faktor neodvisen od parametrov).
- V tem primeru iščemo najboljše parametre logaritma aposteriorne porazdelitve:

$$\hat{\boldsymbol{\theta}}_{\text{MAP}} = \underset{\boldsymbol{\theta}}{\text{argmax}}\, p(\boldsymbol{\theta}|\mathcal{D}) = \underset{\boldsymbol{\theta}}{\text{argmax}}\, [\log p(\mathcal{D}|\boldsymbol{\theta}) + \log p(\boldsymbol{\theta})]$$

$$= \underset{\boldsymbol{\theta}}{\text{argmax}} \left[\sum_i \log p(\mathcal{D}_i|\boldsymbol{\theta}) + \log p(\boldsymbol{\theta}) \right] .$$

- MAP je ekvivalenten MLE, če je prior enak 1 (enakomerna porazdelitev).

Kernel ridge regression (KRR)

Kernalizacija in ridge regression

- Poglejmo si enostaven primer linearne regresije: $y = \mathbf{w}^\top \mathbf{x}$, kjer je $\mathbf{x}, \mathbf{w} \in \mathbb{R}^D$ in $y \in \mathbb{R}$.
- Uvedemo nelinerano bazno funkcijo $\boldsymbol{\phi}(\mathbf{x}) : \mathbb{R}^D \to \mathbb{R}^M$, ki preslika vhodne podatke $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^D$ v prostor lastnosti (*feature space*) $\mathbb{R}^M$ in doda kompleksnost modelu: $y = \mathbf{w}^\top \boldsymbol{\phi}(\mathbf{x})$.
- Primer je polinomska regresija: $\mathbf{x} : \boldsymbol{\phi}(\mathbf{x}) = (1, \mathbf{x}, \mathbf{x}^2, \mathbf{x}^3, \ldots)^\top$, kjer so ϕ_i fiksne funkcije.
- Funkcija cene za ridge regression je MSE + regularizacijski člen:

$$\mathcal{L}(\mathbf{w}) = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}(y_i - \mathbf{w}^\top \boldsymbol{\phi}(x_i))^2 + \frac{\lambda}{2}\sum_{i=1}^{N} w_i^2 = \frac{1}{2}(\mathbf{y} - \boldsymbol{\Phi}\mathbf{w})^\top(\mathbf{y} - \boldsymbol{\Phi}\mathbf{w}) + \frac{\lambda}{2}\mathbf{w}^\top\mathbf{w}\,.$$

- Rešitev zapišemo s pomočjo gradienta $\nabla_{\mathbf{w}}\mathcal{L}(\mathbf{w})$ kot implicitno shemo:

$$\hat{\mathbf{w}} = \frac{1}{\lambda}\sum_{i=1}^{N}(y_i - \mathbf{w}^\top \boldsymbol{\phi}(\mathbf{x}_i))\boldsymbol{\phi}(\mathbf{x}_i) = \sum_{i=1}^{N}\boldsymbol{\alpha}_i\boldsymbol{\phi}(\mathbf{x}_i) = \boldsymbol{\Phi}^\top\boldsymbol{\alpha}\,.$$

- V $\mathcal{L}(\mathbf{w})$ vstavimo $\hat{\mathbf{w}}$ in dobimo:

$$\mathcal{L}(\boldsymbol{\alpha}) = \mathbf{y}^\top\mathbf{y} - \mathbf{y}^\top\boldsymbol{\Phi}\boldsymbol{\Phi}^\top\boldsymbol{\alpha} - \boldsymbol{\alpha}^\top\boldsymbol{\Phi}\boldsymbol{\Phi}^\top\mathbf{y} + \boldsymbol{\alpha}^\top\boldsymbol{\Phi}\boldsymbol{\Phi}^\top\boldsymbol{\Phi}\boldsymbol{\Phi}^\top\boldsymbol{\alpha} + \frac{\lambda}{2}\boldsymbol{\alpha}^\top\boldsymbol{\Phi}\boldsymbol{\Phi}^\top\boldsymbol{\alpha}\,.$$

Matrični zapis

- Vhodni podatki (linerno) in funkcije $\phi(\mathbf{x}_i)$ (nelinerano):

$$\mathbf{X}^\top = \begin{bmatrix} \mathbf{x}_1 \\ \mathbf{x}_2 \\ \vdots \\ \mathbf{x}_N \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_{11} & x_{12} & \cdots & x_{1D} \\ x_{21} & x_{22} & \cdots & x_{2D} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ x_{N1} & x_{N2} & \cdots & x_{ND} \end{bmatrix} \quad \text{in} \quad \Phi(\mathbf{X})^\top = \begin{bmatrix} \phi(\mathbf{x}_1) \\ \phi(\mathbf{x}_2) \\ \vdots \\ \phi(\mathbf{x}_N) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \phi_1(\mathbf{x}_1) & \phi_2(\mathbf{x}_1) & \cdots & \phi_M(\mathbf{x}_1) \\ \phi_1(\mathbf{x}_2) & \phi_2(\mathbf{x}_2) & \cdots & \phi_M(\mathbf{x}_2) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \phi_1(\mathbf{x}_N) & \phi_2(\mathbf{x}_N) & \cdots & \phi_M(\mathbf{x}_N) \end{bmatrix}$$

- Uvedemo kernel $K = \Phi\Phi^\top$, ki je *simetrična in pozitivno semi-definitna matrika skalarnih produktov vektorjev* $\mathbf{x}_i$:

$$K = \Phi\Phi^\top = \phi(\mathbf{x}_i)\phi(\mathbf{x}_j)^\top = \begin{bmatrix} \phi(\mathbf{x}_1)^\top\phi(\mathbf{x}_1) & \phi(\mathbf{x}_1)^\top\phi(\mathbf{x}_2) & \cdots & \phi(\mathbf{x}_1)^\top\phi(\mathbf{x}_N) \\ \phi(\mathbf{x}_2)^\top\phi(\mathbf{x}_1) & \phi(\mathbf{x}_2)^\top\phi(\mathbf{x}_2) & \cdots & \phi(\mathbf{x}_2)^\top\phi(\mathbf{x}_N) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \phi(\mathbf{x}_N)^\top\phi(\mathbf{x}_1) & \phi(\mathbf{x}_N)^\top\phi(\mathbf{x}_2) & \cdots & \phi(\mathbf{x}_N)^\top\phi(\mathbf{x}_N) \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{N\times N}$$

Nov zapis optimalnih uteži za ridge regression s pomočjo K

- S tem lahko zapišemo

$$\mathcal{L}(\boldsymbol{\alpha}) = \mathbf{y}^\top \mathbf{y} - \mathbf{y}^\top K\boldsymbol{\alpha} - \boldsymbol{\alpha}^\top K\mathbf{y} + \boldsymbol{\alpha}^\top K^2\boldsymbol{\alpha} + \frac{\lambda}{2}\boldsymbol{\alpha}^\top K\boldsymbol{\alpha}\,.$$

- Z minimizacijo $\nabla_{\boldsymbol{\alpha}}\mathcal{L}(\boldsymbol{\alpha}) = 0$ in nekaj premetavanja dobimo:

$$\hat{\boldsymbol{\alpha}} = (K + \lambda' \boldsymbol{I})^{-1}\mathbf{y}\,.$$

- Uteži lahko sedaj zapišemo kot (vstavimo $\hat{\boldsymbol{\alpha}}$):

$$\hat{\mathbf{w}} = \Phi^\top \hat{\boldsymbol{\alpha}} = \Phi^\top (K + \lambda' \boldsymbol{I})^{-1}\mathbf{y}\,.$$

- Prej smo imeli (normalna enačba):

$$\hat{\mathbf{w}} = (\Phi^\top \Phi + \lambda \boldsymbol{I})^{-1}\Phi^\top \mathbf{y}\,.$$

- Sedaj imamo z uvedbo matrike K:

$$\hat{\mathbf{w}} = \Phi^\top (\Phi\Phi^\top + \lambda' \boldsymbol{I})^{-1}\mathbf{y}\,.$$

Mercerjev teorem in kernel trik

- Za vsako pozitivno semi-definitno izbiro kernel matrike $K(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j)$ je mogoče najti preslikavo $\phi(\mathbf{x}) : \mathbb{R}^D \to \mathbb{R}^M$, da je $K(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = \phi(\mathbf{x}_i)\phi(\mathbf{x}_j)^\top$.
- Zapišemo lahko pozitivno-semi definitno matriko K kot:

$$K(\mathbf{X}, \mathbf{X}') = \begin{bmatrix} K(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_1) & K(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) & \cdots & K(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_N) \\ K(\mathbf{x}_2, \mathbf{x}_1) & K(\mathbf{x}_2, \mathbf{x}_2) & \cdots & K(\mathbf{x}_2, \mathbf{x}_N) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ K(\mathbf{x}_N, \mathbf{x}_1) & K(\mathbf{x}_N, \mathbf{x}_2) & \cdots & K(\mathbf{x}_N, \mathbf{x}_N) \end{bmatrix}$$

  za vhodne podatke $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^D$ (je funkcija samo teh in ne ϕ).
- Mercerjev teorem pove, da lahko iz pozitivno semi-definitnega jedra K pridemo do preslikave $\phi(\mathbf{x})$, ki je ustvarila ta kernel $\Rightarrow$ ne rabimo poznati oblike ϕ ampak samo matriko K.

Primer: polinomska regresija

- Zamislimo si polinomsko nelinerno bazno funkcijo za D (dimenzija podatkov), $M = 3$ (dimenzija prostora lastnosti) in 2 vhodna podatka ($N = 2$):

$$\phi : \mathbf{x}_n \to \phi(\mathbf{x}_n)^\top = \begin{bmatrix} x_{ni}^2 \\ \sqrt{2} x_{ni} x_{nj} \\ x_{nj}^2 \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{3\times 2}, \quad \text{kjer je} \quad \mathbf{x} = [\mathbf{x}_1\, \mathbf{x}_2]^\top \in \mathbb{R}^{2\times D}.$$

- Kernel matrika je za ta primer:

$$K(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \phi(\mathbf{x}_1)^\top \phi(\mathbf{x}_2) = \begin{bmatrix} x_{1i}^2 \\ \sqrt{2} x_{1i} x_{1j} \\ x_{2j}^2 \end{bmatrix}^\top \begin{bmatrix} x_{2i}^2 \\ \sqrt{2} x_{2i} x_{2j} \\ x_{2j}^2 \end{bmatrix} = x_{1i}^2 x_{2i}^2 + 2 x_{1i} x_{1j} x_{2i} x_{2j} + x_{1j}^2 x_{2j}^2 .$$

  oziroma:

$$k(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = (\mathbf{x}_1^\top \mathbf{x}_2)^2 = (x_{1i} x_{2i} + x_{1j} x_{2j})^2 .$$

- To je primer polinomskega jedra: $k(\mathbf{x}_l, \mathbf{x}_k) = (\mathbf{x}_l^\top \mathbf{x}_k + \boldsymbol{r})^d$.
- Izračunali smo elemente k matrike jedra K ne da bi poznali naravo ϕ.

Kako napovemo nove vrednosti?

- Napovedujemo vrednosti y za nove podatke $\mathbf{x}$.
- Uporabimo $y = \mathbf{w}^\top \phi(\mathbf{x})$ z optimalnimi utežmi $\hat{\mathbf{w}} = \Phi^\top (\Phi\Phi^\top + \lambda' \boldsymbol{I})^{-1}\mathbf{y}$, kar nam da

$$\mathbf{y}_{\text{predict}} = \hat{\mathbf{w}}^\top \Phi = \mathbf{y}(K + \lambda' \boldsymbol{I})^{-1}\Phi^\top \phi(\mathbf{x}) = \mathbf{y}(K + \lambda' \boldsymbol{I})^{-1}\boldsymbol{k}_{\mathbf{x}}\,,$$

kjer je $\boldsymbol{k}_{\mathbf{x}}$ (za napoved v točki $\mathbf{x}$):

$$\boldsymbol{k}_{\mathbf{x}} = \Phi^\top \phi(\mathbf{x}) = K(\mathbf{X}, \mathbf{X}_*) = \begin{bmatrix} K(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}) \\ K(\mathbf{x}_2, \mathbf{x}) \\ \vdots \\ K(\mathbf{x}_N, \mathbf{x}) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \phi(\mathbf{x}_1)^\top \phi(\mathbf{x}) \\ \phi(\mathbf{x}_2)^\top \phi(\mathbf{x}) \\ \vdots \\ \phi(\mathbf{x}_N)^\top \phi(\mathbf{x}) \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{N \times N'}$$

neodvisen od ϕ.

Gaussian process regression (GPR)

Gaussovski procesi

- Gaussian process is a collection of random variables, any finite number of which have a joint Gaussian distribution.
- Gaussovski proces $f(\mathbf{x}) \sim GP(m(\mathbf{x}), k(\mathbf{x}, \mathbf{x}'))$ je popolnoma določen z njegovim povprečnjem in kovariančno funkcijo:

$$m(\mathbf{x}) = \mathbb{E}[f(\mathbf{x})]\,, \quad k(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \mathbb{E}[(f(\mathbf{x}) - m(\mathbf{x}))(f(\mathbf{x}') - m(\mathbf{x}'))]\,.$$

- Bayesovksa linerna regresija $f(\mathbf{x}) = \boldsymbol{\phi}(\mathbf{x})^\top \mathbf{w} + \varepsilon$ z apriorno porazdelitvijo $\mathbf{w} \sim \mathcal{N}(0, \Sigma)$:

$$\mathbb{E}[f(\mathbf{x})] = 0 \quad \text{in} \quad \text{cov}(f(\mathbf{x}), f(\mathbf{x}')) = k(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \mathbb{E}[f(\mathbf{x}) f(\mathbf{x}')] = \boldsymbol{\phi}(\mathbf{x})^\top \Sigma \boldsymbol{\phi}(\mathbf{x}')\,.$$

- Primer jedra je Radial Basis Function (RBF) in je kvadrat eksponenta:

$$k(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \exp\left(-\frac{1}{2}|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|^2\right)\,,$$

ki je funkcija vhodnih in izhodnih (napovedanih) podatkovnih točk.

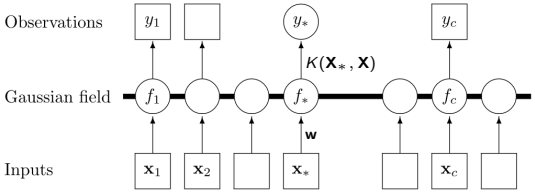
Kako napovemo nove vrednosti?

- Napovedana porazdelitev je v $\mathbf{x}_*$:

$$\mathbf{y}_* \sim \mathcal{N}(K(\mathbf{X}_*, \mathbf{X})[K(\mathbf{X}, \mathbf{X}) + \sigma^2 \boldsymbol{I}]^{-1}\mathbf{y},$$
$$K(\mathbf{X}_*, \mathbf{X}_*) - K(\mathbf{X}_*, \mathbf{X})[K(\mathbf{X}, \mathbf{X}) + \sigma^2 \boldsymbol{I}]^{-1}K(\mathbf{X}, \mathbf{X}_*)) .$$

- Napoved je tako enaka

$$\boldsymbol{f}_* = K(\mathbf{X}_*, \mathbf{X})[K(\mathbf{X}, \mathbf{X}) + \sigma^2 \boldsymbol{I}]^{-1}\mathbf{y} ,$$



s pripadajočo napako

$$\mathrm{cov}(\boldsymbol{f}_*) = K(\mathbf{X}_*, \mathbf{X}_*) - K(\mathbf{X}_*, \mathbf{X})[K(\mathbf{X}, \mathbf{X}) + \sigma^2 \boldsymbol{I}]^{-1}K(\mathbf{X}, \mathbf{X}_*).$$

- Za kovariančno funkcijo (kernel) vzamemo RBF s hiperparametri:

$$k(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \sigma_f^2 \exp\left(-\frac{1}{2}\frac{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|^2}{\ell^2}\right) + \sigma^2 \boldsymbol{I} .$$

Knjižnica scikit-learn

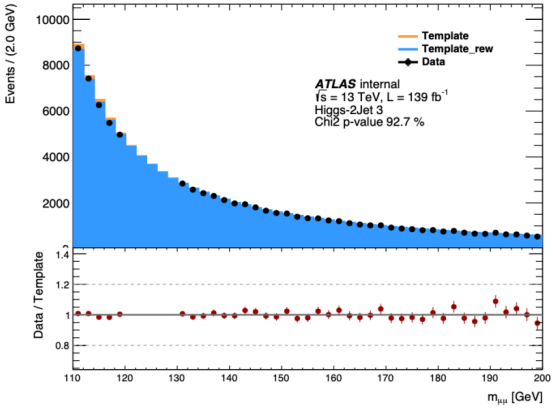
Reševanje naloge

Blinding

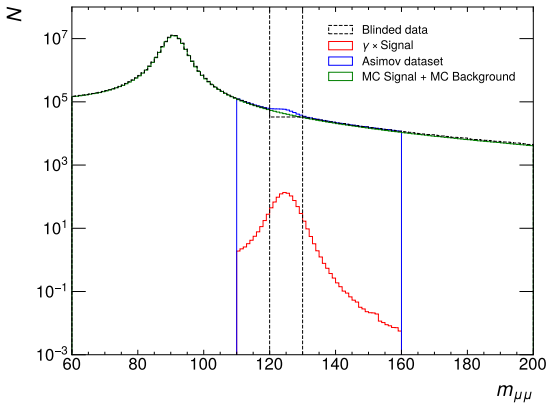
- Simulacija ozadja ni vedno najboljša.
- Za oceno ozadja vzamemo izmerjene podatke, pri tem je potrebno izključiti območje, kjer pričakujemo signal $\Rightarrow$ blinding.
- Izključimo npr. interval $[120, 130]$ GeV, kjer pričakujemo signal.
- Naredimo Numpy masko:

```
mask = (bin_centers < 119) | (bin_centers > 131)
bin_centers_masked = bin_centers[mask]
bin_values_masked = bin_values[mask]
bin_errors_masked = bin_errors[mask]

```

- Na tem ozadju ("background from data") naredimo fit in dobimo $b(x_k)$.



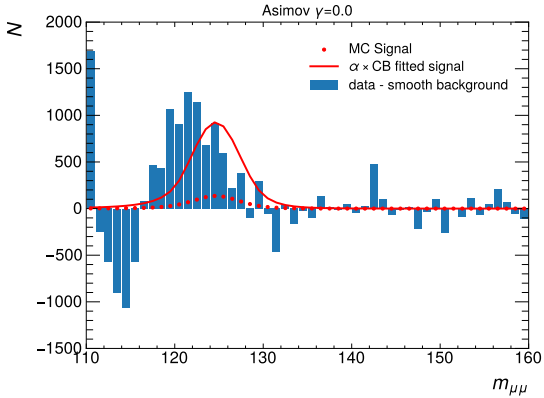
Asimov podatkovni set

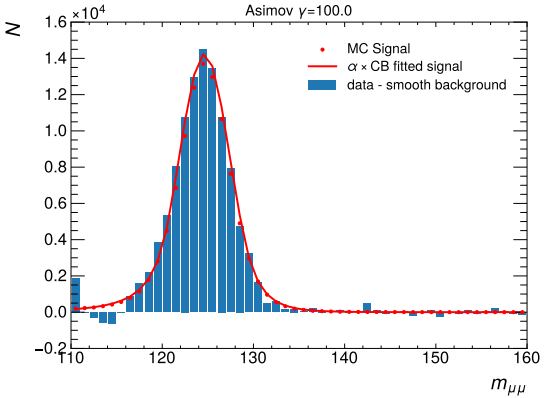


- Da dobimo signal $y(x_k)$, odštejemo podatke od fitanega ozadja: $y(x_k) = d(x_k) - b(x_k)$.
- Na ta signal $y(x_k)$ prilagodimo funkcijo α·CB (proste parametre smo dobili že na simulaciji signala $s(x_k)$).
- Izmerjenega signala je v podatkih zelo malo $\Rightarrow$ postopek preizkusimo z napihnjenim signalom $\Rightarrow$ Asimov dataset.
- Podatkom prištejemo MC signal:

$$d_A(x_k) = d(x_k) + \gamma \cdot s(x_k)\,.$$

Fitanje na odšteto ozadje





Predprocesiranje podatkov za ML algoritme

- ML algoritmi ne delujejo dobro, če so vhodne številske vrednosti na različnih skalah.
- Pred učenjem algoritmov vedno naredimo normalizacijo podatkov (*feature scaling*).
- Najbolj pogosti sta:
  1. min-max normalziacija:

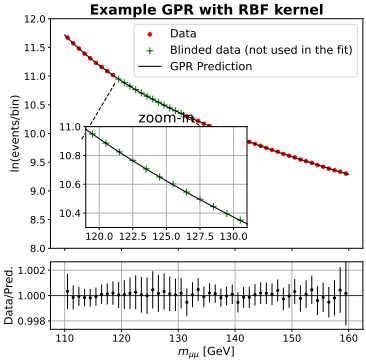
$$x_{\text{norm}} = \frac{x - x_{\text{min}}}{x_{\text{max}} - x_{\text{min}}} ,$$

  2. standardizacija:

$$x_{\text{norm}} = \frac{x - \mu}{\sigma} .$$

- Transfomacije morajo imeti tudi inverz!

- Več primerov v `scikit-learn`.
- Razmisli kaj je z napakami, pomagaš si lahko s knjižnico `uncertainties`.



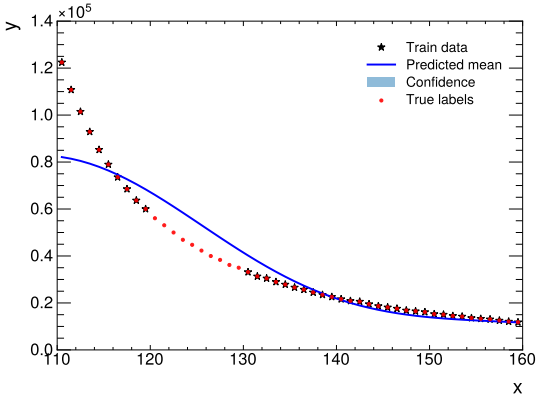
Uporaba GPR

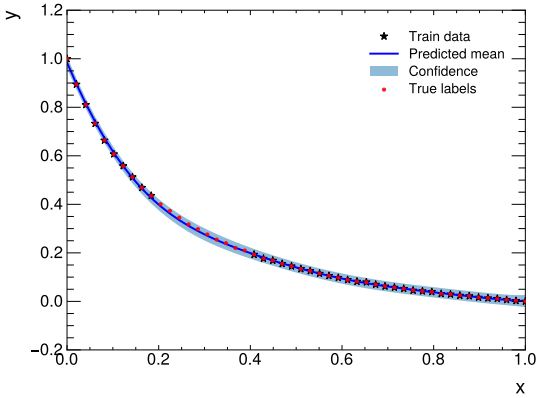
- Uvoziti je potrebno relevantne knjižnice in izbrati poljubna jedra - kernele.
- Na voljo je več različnih jedrnih funkcij - lahko uporabiš predpripravljene (npr. Gibbs), lahko pa jih tudi kombiniraš.
- Vsako jedro ima svoj specifičen parameter ter spodnjo in zgornjo mejo.
- Primer:

```
# define kernel: ConstantKernel * RBF:
const_kernel = ConstantKernel(const0, constant_value_bounds=(const_low, const_hi))
rbf_kernel = RBF(RBF0, length_scale_bounds=(RBF_low, RBF_high))
kernel = const_kernel * rbf_kernel

# transform x data into 2d vector
X = np.atleast_2d(bin_centers_masked).T  # true datapoints
X_to_predict = np.atleast_2d(np.linspace(110, 160, 1000)).T  # what to predict
y = bin_values_masked # labels / targets

# define Regressor and add errors as alpha
gp = GaussianProcessRegressor(kernel=kernel, alpha=bin_errors_masked**2)

# fit on X with values y
gp.fit(X, y)

# predict
y_pred, sigma = gp.predict(X_to_predict, return_std=True)

```

Fitanje na blinded podatke

- Enostaven primer z uporabo RBF jedra (pazi skaliranje količin!).





GPR: pripravljena (CERN) koda

- Cilj: preizkusi `GaussianProcessRegressor` za glajenje ozadja iz podatkov.
- Preberi dokumentacijo in preizkusi kodo, poskusi razumeti posamezne dele.
- Prepričaj se, da je dodajanje svojih kernelov v sklearn preprosto (RBF, Matern, ...).
- Uporabiš lahko tudi *Gibbsov kernel*, ki ga ni v sklearn knjižnici.
- Gibbsov kernel je v svojem bistvu RBF kernel, le da se `length_scale` lahko spreminja z linearno funkcijo:

$$L(x) = L_{\text{slope}} x + c \,.$$

- Pazi kako pripraviš podatke (logaritem, minmax, ...) in kako se pri tem spremenijo napake.
- Kernel ima določene hiperparametre, ki jih je potrebno nastaviti $\rightarrow$ pomagaš si lahko s skeniranjem čez mrežo možnih vrednosti: `GridSearchCV`.
- **Dodatno** si lahko pogledaš še knjižnico `GPyTorch` ter RBF jedro z učljivimi (*learnable*) hiperparametri ℓ in σ^2.

Uporaba KRR

- Cilj: prilagodi algoritem za naše namene fitanja ozadja.

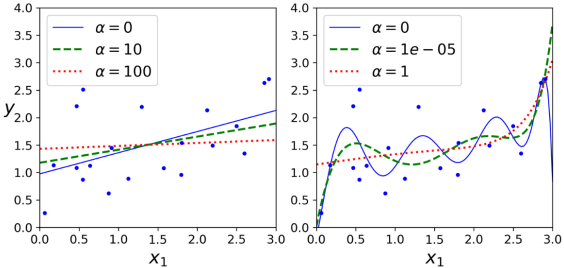


Figure 4-17. A linear model (left) and a polynomial model (right), both with various levels of Ridge regularization

- Kako se tukaj upoštevajo napake meritev? `fit` metoda dodatno sprejme argument `sample_weight` (velika napaka pomeni majhno utež).

- Uporaba ridge regresije je enostavna (glej poglavje 4):

As with Linear Regression, we can perform Ridge Regression either by computing a closed-form equation or by performing Gradient Descent. The pros and cons are the same. Equation 4-9 shows the closed-form solution, where $\mathbf{A}$ is the $(n + 1) \times (n + 1)$ *identity matrix*,[11] except with a 0 in the top-left cell, corresponding to the bias term.

Equation 4-9. Ridge Regression closed-form solution

$$\hat{\theta} = (\mathrm{X}^\intercal \mathrm{X} + \alpha \mathrm{A})^{-1} \mathrm{X}^\intercal \mathrm{y}$$

Here is how to perform Ridge Regression with Scikit-Learn using a closed-form solution (a variant of Equation 4-9 that uses a matrix factorization technique by André-Louis Cholesky):

```
>>> from sklearn.linear_model import Ridge
>>> ridge_reg = Ridge(alpha=1, solver="cholesky")
>>> ridge_reg.fit(X, y)
>>> ridge_reg.predict([[1.5]])
array([[1.55071465]])
```

- Kernel je dodan v razredu `KernelRidge`.

Zaključek 1. naloge

Povzetek 2. dela 1. naloge

- Prejšnji teden ste fitali s preprostim `curve_fit`, ta teden je cilj uporabiti metode strojnega učenja, predvsem GPR.
- Poskusi tudi z uporabo KRR in še kakšne podobne metode (npr. SVM o kateri ste govorili na predavanjih).
- GPR najprej poizkusite na preprosti način $\rightarrow$ spoznaj se s knjižnico `scikit-learn`.
- GPR - CERN skripta $\rightarrow$ preberi kodo, uporabi Gibbsov kernel, pazi na napake.
- KRR preberi dokumentacijo $\rightarrow$ poskusi sam zgladiti ozadje.
- Preveri različna jedra, kaj je prednost GPR?
- **Dodatno** si lahko pogledaš functional decomposition (FD) in še kakšno drugo metodo.
- Dokončaj nalogo $\rightarrow$ spoznal si različne metode fitanja, najdi Higgsa!

Še enkrat po korakih

1. Pofitaj histogram simulacije signala (simulated Higgs signal):
   - Uporabi nastavek za CB funkcijo.
   - Dobiš funkcijo $s(x_k)$ s parametri za MC signal.
2. Pofitaj histogram simulacije ozadja (simulated background):
   - Uporabi različne možnosti in intervale, ni ti treba izključiti območja signala (ker ga tu ni).
   - Dobiš funkcijo $m(x_k)$.
3. Pofitaj histogram podatkov, da dobiš dobro oceno za ozadje (background from data):
   - Moraš pa izključiti interval, kjer je v podatkih signal $\Rightarrow$ okno okrog $[120, 130]$ GeV.
   - Uporabi različne možnosti, podobno kot na simulaciji ozadja $\Rightarrow$ razni funkcijski nastavki in ML metode.
   - Lahko vzameš tudi nastavek $q(x_k)m(x_k)$, kjer je $q(x_k)$ preprosta funkcija za fit in $m(x_k)$ pofitana na simulaciji ozadja.
   - Dobiš funkcijo $b(x_k)$.
4. Odštej od podatkov čim bolje zglajeno ozadje.
   - Če so podatki v binih $d_k(x)$, potem narediš $y(x_k) = d(x_k) - b(x_k)$.
5. Na kar ostane (torej $y(x_k)$) nalepi parametrizacijo signala.
   - Na funkcijo $s(x_k)$ dodaj parameter normalizacije/skaliranja α, da dobiš $\alpha \cdot s(x_k)$.
   - Naredi fit na $y(x_k)$, da dobiš najboljšo oceno $\hat{\alpha}$ in njeno napako $\sigma_{\hat{\alpha}}$.
6. Ponovi postopek za različne vrednosti napihnjenega signala γ: $d_A(x_k) = d(x_k) + \gamma \cdot s(x_k)$.

Extra

GPR: Bayesovska linerna regresija

- Imamo podatkovno množico (set) $\mathcal{D} = \{(\mathbf{x}_i, y_i)\}_{i=1}^{N}$, kjer je $\mathbf{x}_i \in \mathbb{R}^D$ in $y_i \in \mathbb{R}$.
- Linearna regresija z Gaussovskim šumom:

$$f(\mathbf{x}) = \mathbf{x}^\top \mathbf{w}, \quad y = f(\mathbf{x}) + \varepsilon \quad \text{kjer je} \quad \varepsilon \sim \mathcal{N}(0, \sigma^2)\,.$$

- Izmerjene vrednosti $f(\mathbf{x})$ se razlikujejo od pravih vrednosti y zaradi šuma ε.
- Uvedemo bazne funkcije $\boldsymbol{\phi}(\mathbf{x}) : \mathbb{R}^D \to \mathbb{R}^M$, da dobimo bolj ekspresiven model:

$$f(\mathbf{x}) = \boldsymbol{\phi}(\mathbf{x})^\top \boldsymbol{w} + \boldsymbol{\epsilon} \quad \text{kompaktni matrični zapis}\,.$$

- $\Rightarrow$ uporabimo Bayesovsko linearno regresijo.

GPR: Gaussovski prior

- Kako pridemo do parametrov $\boldsymbol{\theta}$ (oziroma uteži $\mathbf{w}$)?
- Za primer GPR:

$$p(\mathbf{w}|\Phi,\mathbf{y}) = \frac{p(\mathbf{y}|\Phi,\mathbf{w})p(\mathbf{w})}{p(\mathbf{y}|\Phi)} \propto p(\mathbf{y}|\Phi,\mathbf{w})p(\mathbf{w})\,.$$

- Prior je Gaussovka (opiše naše neznanje o optimalnih utežeh):

$$\mathbf{w} \sim \mathcal{N}(0,\Sigma)\,,$$

  kjer je Σ kovariančna matrika.
- Likelihood za meritve pri danih parametrih je Gaussovski:

$$p(\mathbf{y}|\Phi,\mathbf{w}) = \prod_{i=1}^{N} p(y_i|\phi(\mathbf{x}_i),\mathbf{w}) = \prod_{i=1}^{N} \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left(-\frac{(y_i - \phi(\mathbf{x}_i)^\top \mathbf{w})^2}{2\sigma^2}\right)$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^{N/2}\sigma^N} \exp\left(-\frac{1}{2\sigma^2}\sum_{i=1}^{N}(y_i - \phi(\mathbf{x}_i)^\top \mathbf{w})^2\right) = \mathcal{N}(\Phi^\top \mathbf{w}, \sigma\mathbf{I})\,.$$

GPR: Ocenjevanje uteži $\mathbf{w}$ z MAP

- Zapišemo samo člene, ki so odvisni od parametrov (uteži $\mathbf{w}$):

$$p(\mathbf{w}|\Phi,\mathbf{y}) \propto p(\mathbf{y}|\Phi,\mathbf{w})p(\mathbf{w}) \propto \exp\left(-\frac{1}{2\sigma^2}(\mathbf{y}-\Phi^\top\mathbf{w})^\top(\mathbf{y}-\Phi^\top\mathbf{w})\right)\exp\left(-\frac{1}{2}\mathbf{w}^\top\Sigma^{-1}\mathbf{w}\right)$$

$$\propto \exp\left(-\frac{1}{2}(\mathbf{w}-\mathbf{w}')^\top\left(\frac{1}{\sigma^2}\Phi\Phi^\top+\Sigma^{-1}\right)(\mathbf{w}-\mathbf{w}')\right) \sim \mathcal{N}(\mathbf{w}',\mathbf{A}^{-1})\,,$$

$$\text{kjer uvedemo} \quad \mathbf{w}' = \frac{1}{\sigma^2}\mathbf{A}^{-1}\Phi\mathbf{y} \quad \text{in} \quad \mathbf{A} = \frac{1}{\sigma^2}\Phi\Phi^\top+\Sigma^{-1}\,.$$

- Povprečje $\mathbf{w}'$ aposteriorne porazdelitve je enako njenemu maksimumu (MAP ocena za $\mathbf{w}$).

GPR: Fitanje modela

- Uporabimo MAP metodo, kar pomeni uporabo aposteriorne porazdelitve za določitev naše ocene parametrov $\mathbf{w}$.
- Zapišemo (vzamemo negtiven logaritem):

$$\hat{\mathbf{w}}_{\text{MAP}} = \underset{\mathbf{w}}{\text{argmax}} \left[-\log p(\mathbf{w}|\Phi, \mathbf{y}) \right] = \underset{\mathbf{w}}{\text{argmax}} \left[-\log p(\mathbf{y}|\Phi, \mathbf{w}) - \log p(\mathbf{w}) \right]$$

  $\Rightarrow$ v optimalni oceni smo dobili še dodaten člen $\log p(\mathbf{w})$ (likelihood je utežen).
- Za GPR dobimo:

$$\hat{\mathbf{w}}_{\text{MAP}} = \underset{\mathbf{w}}{\text{argmax}} \left[-\log(2\pi)^{N/2} - \log \sqrt{\det(\mathbf{A}^{-1})} + \frac{1}{2}(\mathbf{w} - \mathbf{w}')^{\top} \mathbf{A} (\mathbf{w} - \mathbf{w}') \right] .$$

- Problem fitanja se prevede na maksimizacijo zgornje funkcije (aposterior).
- Izračunati moramo $\nabla_{\mathbf{w}} \mathcal{L}(\mathbf{w}) \Rightarrow$ za MAP in Gaussovko je to kar $\mathbf{w}'$ (analitična rešitev).

GPR: Kako napovemo nove vrednosti?

- Povprečimo po vseh možnih vrednostih parametrov uteženih z njihovimi aposteriornimi verjetnostmi.
- Napovedano porazdelitev za $\mathbf{y}_*$ v točki $\mathbf{x}_*$ dobimo s povprečenjem:

$$p(f_*|\phi_*, \Phi, \mathbf{y}) = \int p(f_*|\phi_*, \mathbf{w}) p(\mathbf{w}|\Phi, \mathbf{y})\, d\mathbf{w} = \mathcal{N}(\frac{1}{\sigma^2}\phi_*^\top \mathbf{A}^{-1}\Phi\mathbf{y}, \phi_*^\top \mathbf{A}^{-1}\phi_*)\,.$$

- Napovedna porazdelitev je spet Gaussovka s povprečjem aposteriorne porazdelitve pomnoženim z vhodnimi podatki.
- Napovedana varianca ima kvadratično obliko, ki je odvisna od vhodnih podatkov.
- Zgornje lahko zapišemo na naslednji način:

$$p(f_*|\phi_*, \Phi, \mathbf{y}) = \mathcal{N}(\phi_*^\top \Sigma\Phi(K + \sigma^2 \boldsymbol{I})^{-1}\mathbf{y}, \phi_*^\top \Sigma\phi_* - \phi_*^\top \Sigma\Phi(K + \sigma^2 \boldsymbol{I})^{-1}\Phi^\top \Sigma\phi_*)\,,$$

kjer smo definirali $K = \Phi^\top \Sigma\Phi$.

GPR: Kaj pa bazne funkcije ϕ?

- Brez ϕ imamo linearni model $\rightarrow$ s pomočjo baznih funkcij ϕ projeciramo vhodne podatke $\mathbf{x}$ v višje dimenzionalni prostor lastnosti (*feature space*) in uporabimo linearni model tam.
- Polinomska regresija: $\mathbf{x} : \phi(\mathbf{x}) = (1, \mathbf{x}, \mathbf{x}^2, \mathbf{x}^3, \ldots)^\top$, kjer so ϕ_i fiksne funkcije.
- Prostor lasnosti je vedno v obliki: $\phi_*^\top \Sigma \phi_*$, $\phi_*^\top \Sigma \Phi$ ali $\Phi^\top \Sigma \phi_*$.
- Zapišemo v obliki:

$$k(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \phi(\mathbf{x})^\top \Sigma \phi(\mathbf{x}') \quad \text{(kovariančna funkcija ali kernel)}\,,$$

  kjer je $\mathbf{x}$ vhodni podatek, $\mathbf{x}'$ pa podatek, ki ga napovedujemo.
- Σ je pozitivno definitna matrika in jo lahko zapišemo kot $(\Sigma^{1/2})^2$.
- SVD razcep te matrike je $\Sigma = UDU^\top$, oziroma $\Sigma^{1/2} = UD^{1/2}U^\top$.
- S tem dobimo zapis s skalarnim produktom:

$$\psi(\mathbf{x}) = \Sigma^{1/2}\phi(\mathbf{x}) \Rightarrow k(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \psi(\mathbf{x}) \cdot \psi(\mathbf{x}')\,.$$

GPR: Gaussovski procesi

- Gaussian process is a collection of random variables, any finite number of which have a joint Gaussian distribution.
- Gaussovski proces $f(\mathbf{x}) \sim GP(m(\mathbf{x}), k(\mathbf{x}, \mathbf{x}'))$ je popolnoma določen z njegovim povprečnjem in kovariančno funkcijo:

$$m(\mathbf{x}) = \mathbb{E}[f(\mathbf{x})]\,, \quad k(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \mathbb{E}[(f(\mathbf{x}) - m(\mathbf{x}))(f(\mathbf{x}') - m(\mathbf{x}'))]\,.$$

- Bayesovksa linerna regresija $f(\mathbf{x}) = \boldsymbol{\phi}(\mathbf{x})^\top \mathbf{w}$ z apriorno porazdelitvijo $\mathbf{w} \sim \mathcal{N}(0, \Sigma)$:

$$\mathbb{E}[f(\mathbf{x})] = 0 \quad \text{in} \quad \text{cov}(f(\mathbf{x}), f(\mathbf{x}')) = k(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \mathbb{E}[f(\mathbf{x}) f(\mathbf{x}')] = \boldsymbol{\phi}(\mathbf{x})^\top \Sigma \boldsymbol{\phi}(\mathbf{x}')\,.$$

- Primer jedra je Radial Basis Function (RBF) in je kvadrat eksponenta:

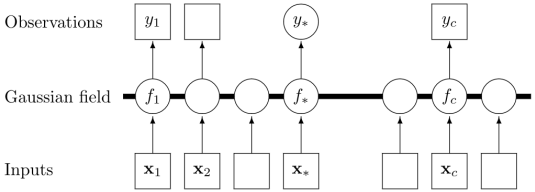
$$k(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \exp\left(-\frac{1}{2}|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|^2\right)\,,$$

ki je funkcija vhodnih in izhodnih (napovedanih) podatkovnih točk.

GPR: Kako napovemo nove vrednosti?

- Napovedana porazdelitev je v $\mathbf{x}_*$:

$$\mathbf{y}_* \sim \mathcal{N}(K(\mathbf{X}_*, \mathbf{X})[K(\mathbf{X}, \mathbf{X}) + \sigma^2 \boldsymbol{I}]^{-1}\mathbf{y},$$
$$K(\mathbf{X}_*, \mathbf{X}_*) - K(\mathbf{X}_*, \mathbf{X})[K(\mathbf{X}, \mathbf{X}) + \sigma^2 \boldsymbol{I}]^{-1}K(\mathbf{X}, \mathbf{X}_*)) \,.$$



- Napoved je tako enaka

$$\boldsymbol{f}_* = K(\mathbf{X}_*, \mathbf{X})[K(\mathbf{X}, \mathbf{X}) + \sigma^2 \boldsymbol{I}]^{-1}\mathbf{y} \,,$$

s pripadajočo napako

$$\mathrm{cov}(\boldsymbol{f}_*) = K(\mathbf{X}_*, \mathbf{X}_*) - K(\mathbf{X}_*, \mathbf{X})[K(\mathbf{X}, \mathbf{X}) + \sigma^2 \boldsymbol{I}]^{-1}K(\mathbf{X}, \mathbf{X}_*).$$

- Za kovariančno funkcijo (kernel) vzamemo RBF s hiperparametri:

$$k(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \sigma_f^2 \exp\left(-\frac{1}{2}\frac{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|^2}{\ell^2}\right) + \sigma^2 \boldsymbol{I} \,.$$