

Deep Learning 과 불확실성

Sep 14, 2023

국가통계방법론 심포지
엄

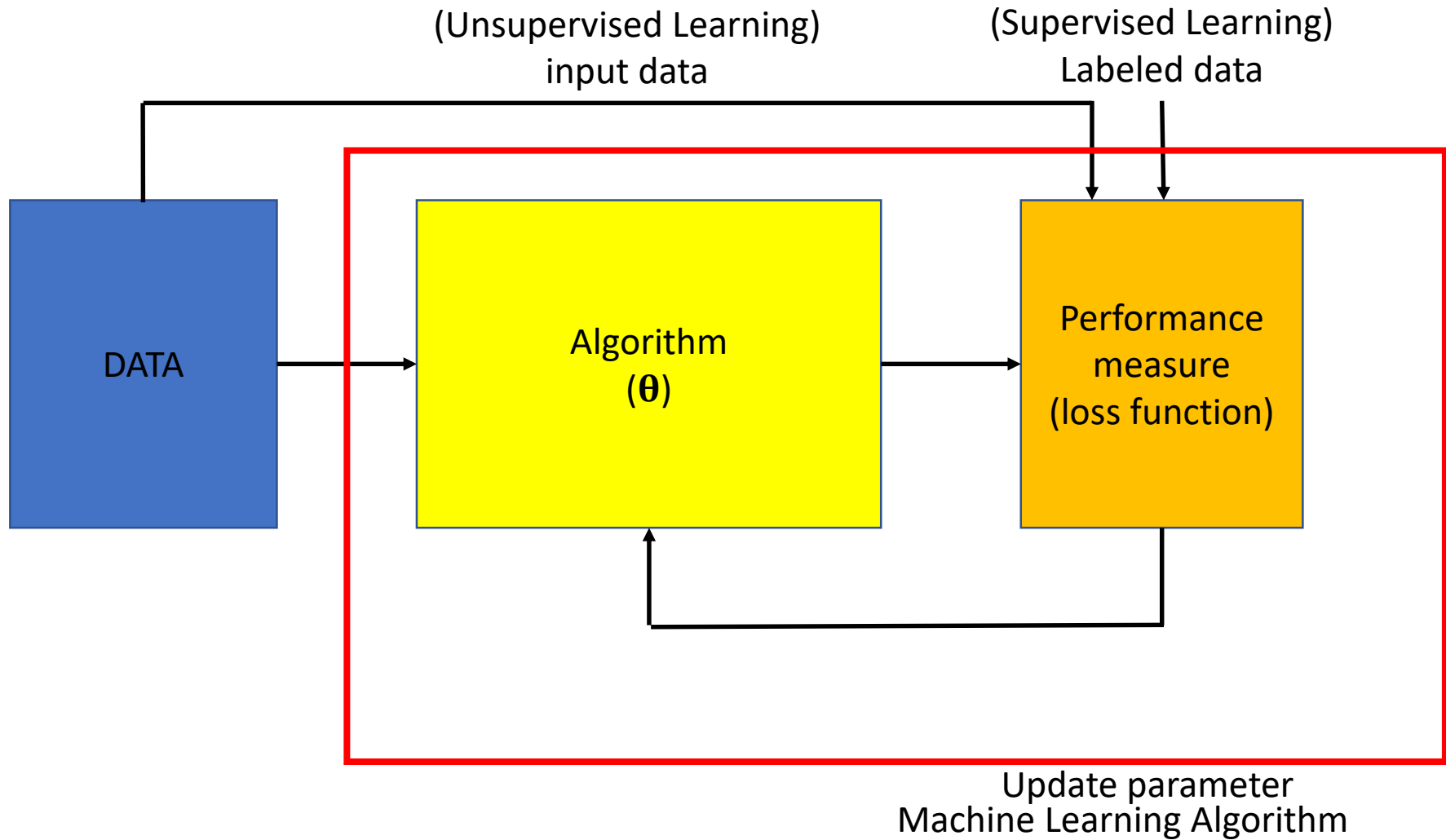
1. [Deep Learning](#)
2. [Uncertainty](#)
3. [Softmax & Calibration](#)
4. [Bayesian Neural Networks](#)
5. [Neural Process](#)
6. [Conclusion](#)

Deep Learning

Deep Learning

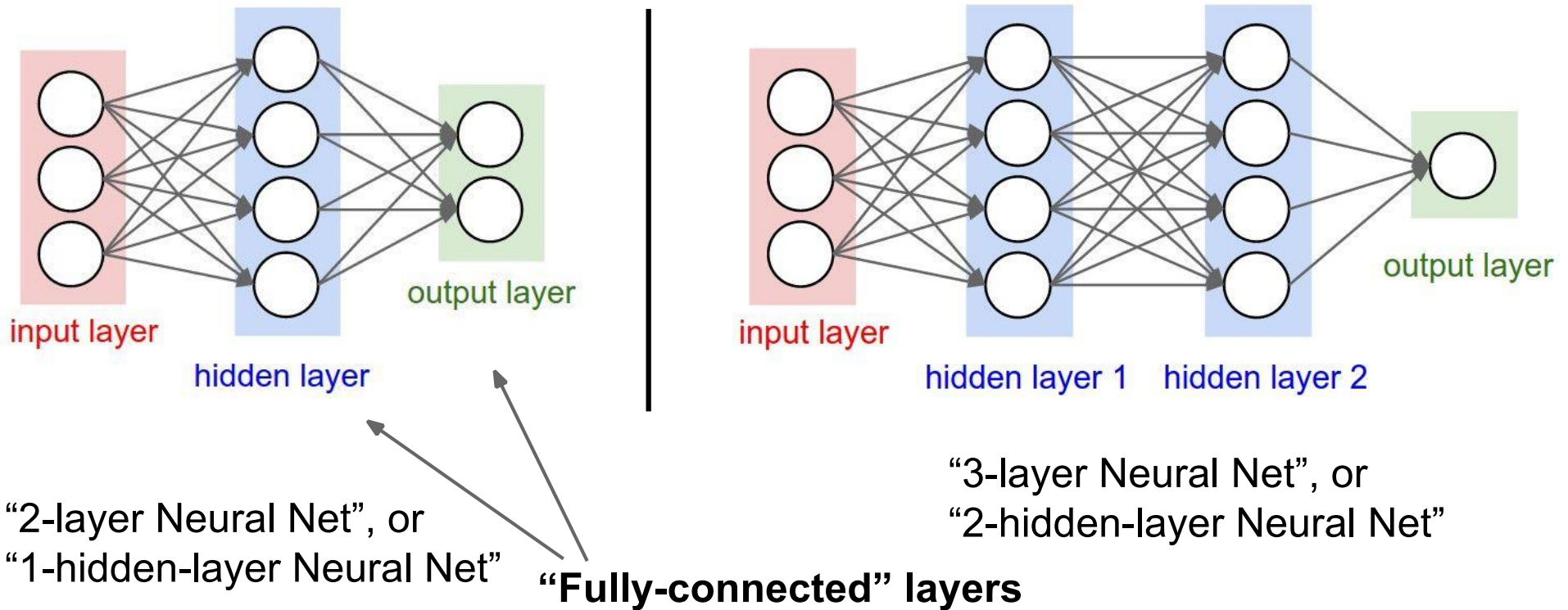
- 최근 10년동안 굉장한 성과를 얻은 기계학습 방법
- 2012년 ImageNet challenge에서 매우 뛰어난 이미지 분류 정확도 달성
- 2016년 AlphaGo 가 이세돌을 이기는 결과로 세상을 놀라게 함
- GAN, Diffusion model 등의 등장으로 생성형 AI의 시대가 열림
- 2022년 ChatGPT의 등장으로 다시 한번 AI가 세상에 충격을 줌





Neural Networks

- 원과 선으로 구성된 계층적 구조를 가진 형태의 함수 표현 방법
- 유연하며 다양한 형태의 함수를 표현 가능

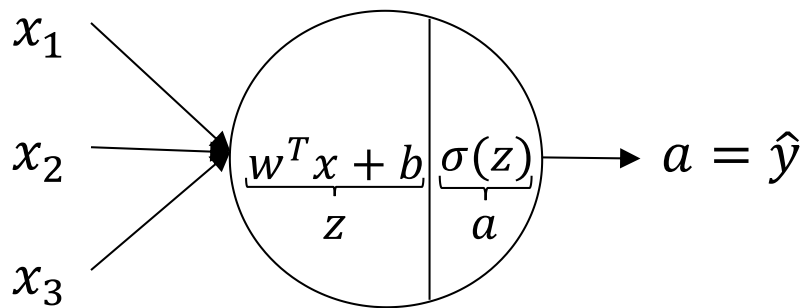


선: edge, arrow, ..

- 각 선은 각각의 값을 가지고 있으며 화살표 방향으로 흘러오는 정보에 해당 값을 곱함

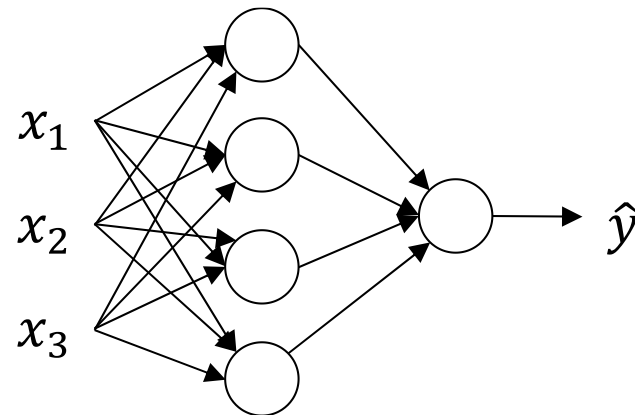
원: Neuron

- 흘러 들어오는 정보를 모두 더한 후 non-linear activation function에 통과시킴



$$z = w^T x + b$$

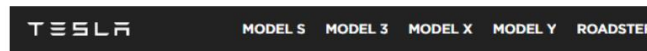
$$a = \sigma(z)$$



Uncertainty

Self-driving car를 만든다고 생각합시다

- 100% 신뢰 할 수 있는 판단을 할까요?
- 애매한 상황이 없을까요?
- 애매하다는 것은 어떻게 측정할 수 있을까요?



Blog Videos

A Tragic Loss

The Tesla Team • 30 June 2016

We learned yesterday evening that NHTSA is opening a preliminary evaluation into the performance of Autopilot during a recent fatal crash that occurred in a Model S. This is the first known fatality in just over 130 million miles where Autopilot was activated. Among all vehicles in the US, there is a fatality every 94 million miles. Worldwide, there is a fatality approximately every 60 million miles. It is important to emphasize that the NHTSA action is simply a preliminary evaluation to determine whether the system worked according to expectations.

Following our standard practice, Tesla informed NHTSA about the incident immediately after it occurred. What we know is that the vehicle was on a divided highway with Autopilot engaged when a tractor trailer drove across the highway perpendicular to the Model S. Neither Autopilot nor the driver noticed the white side of the tractor trailer against a brightly lit sky, so the brake was not applied. The high ride height of the trailer combined with its positioning across the road and the extremely rare circumstances of the impact caused the Model S to pass under the trailer, with the bottom of the trailer



WIRED

TESLA'S AUTOPILOT WAS INVOLVED IN ANOTHER DEADLY CAR CRASH



TESLA



WIRED

SUBSCRIBE

TESLA'S LATEST AUTOPILOT DEATH LOOKS JUST LIKE A PRIOR CRASH



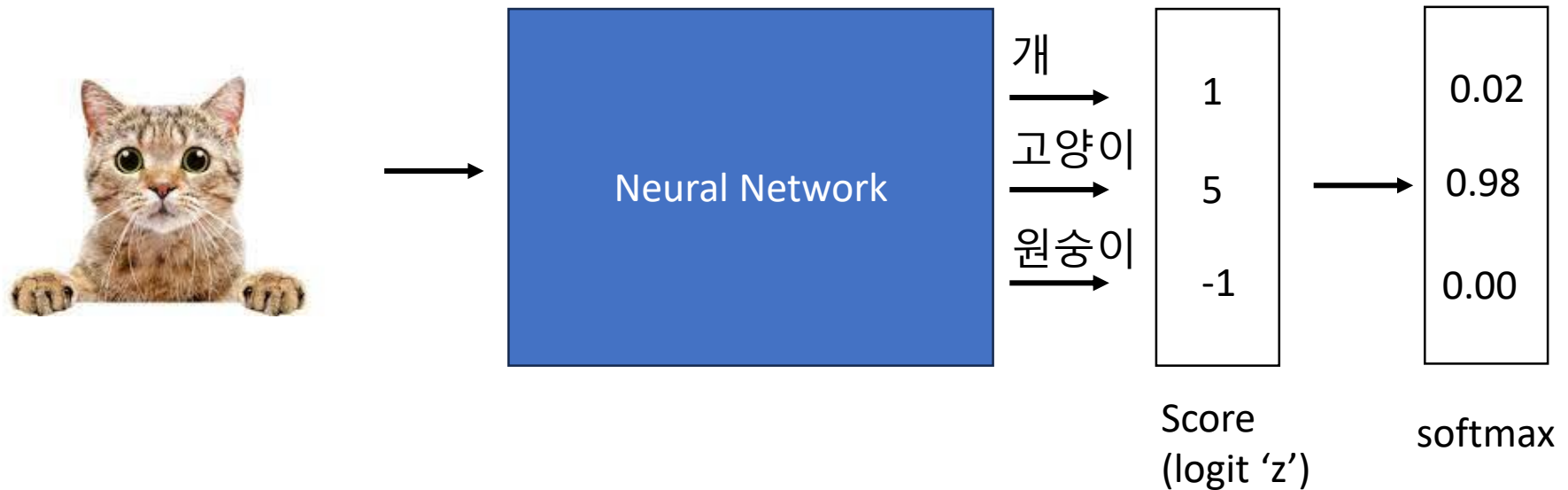
의료 AI 의 판단

- 100% 신뢰 할 수 있는 판단을 할까요?
- 애매한 상황이 없을까요?
- 애매하다는 것은 어떻게 측정할 수 있을까요?



Softmax & Calibration

이미지 분류 문제



Softmax

- Classification 문제에서 우리는 흔히 softmax를 활용하여 구현
- softmax는 확률적인 output을 만든다고 생각됨

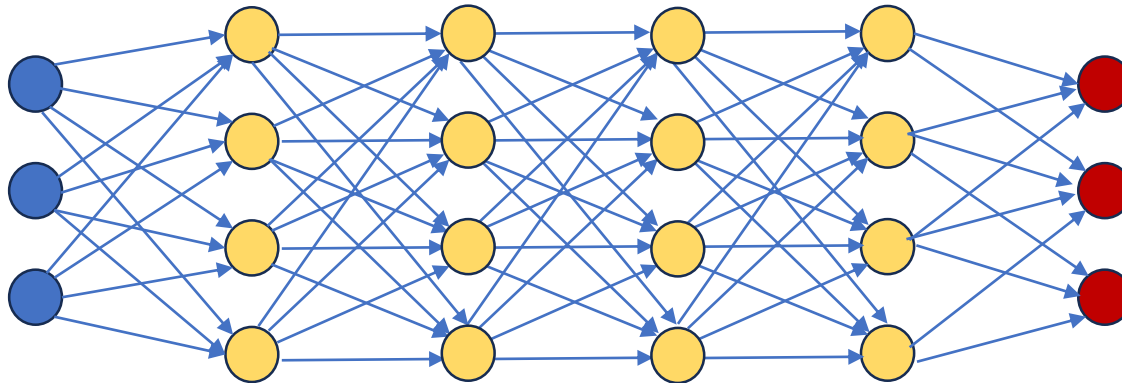
$$\mathbb{P}(Y = \text{"cat"}) = \frac{e^{z_{cat}}}{e^{z_{dog}} + e^{z_{cat}} + e^{z_{monkey}}}$$

Data (x_i, y_i) 를 바탕으로 Parameter (θ) 를 학습시키면,

1. Loss function 을 정의한다. (negative log-likelihood)

$$-\sum_i \log \mathbb{P}(y_i | x_i, \theta)$$

2. Loss function 을 최적화한다. (maximum likelihood)



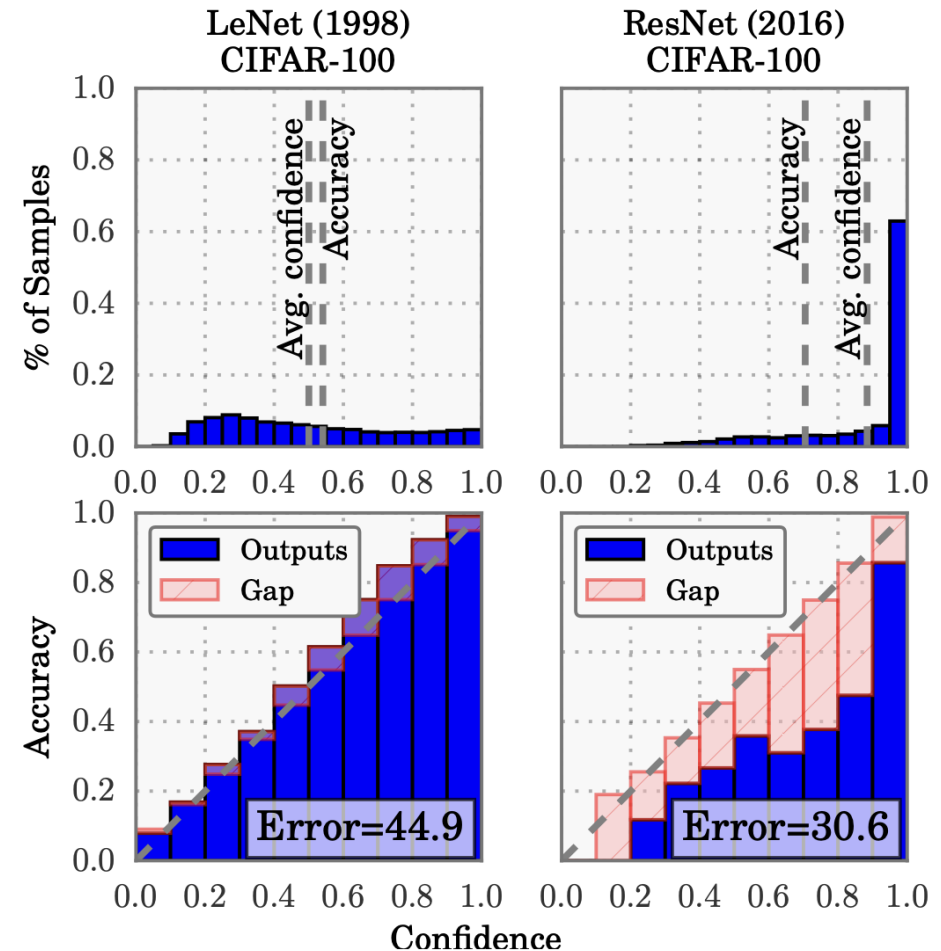
고정된 parameter 학습

Softmax 를 믿는가?

- Overconfidence한 특징
- Confidence 조정이 필요

Calibration 개선 방법?

- Logit scaling (temperature)
- Model Ensemble
- Data augmentation

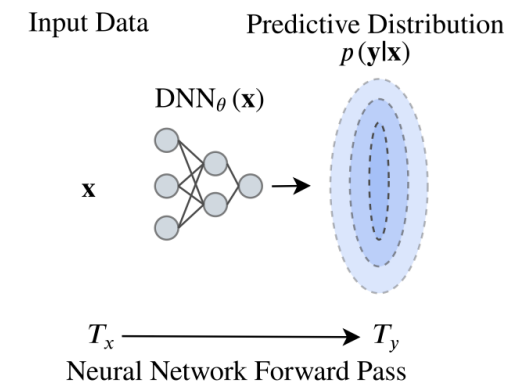
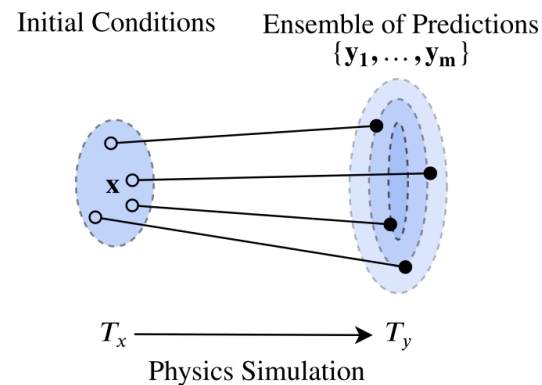
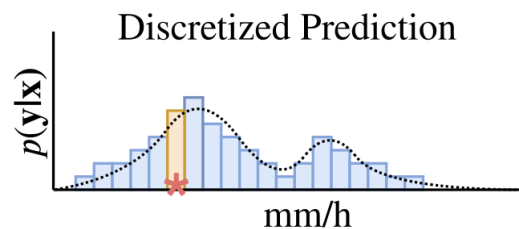
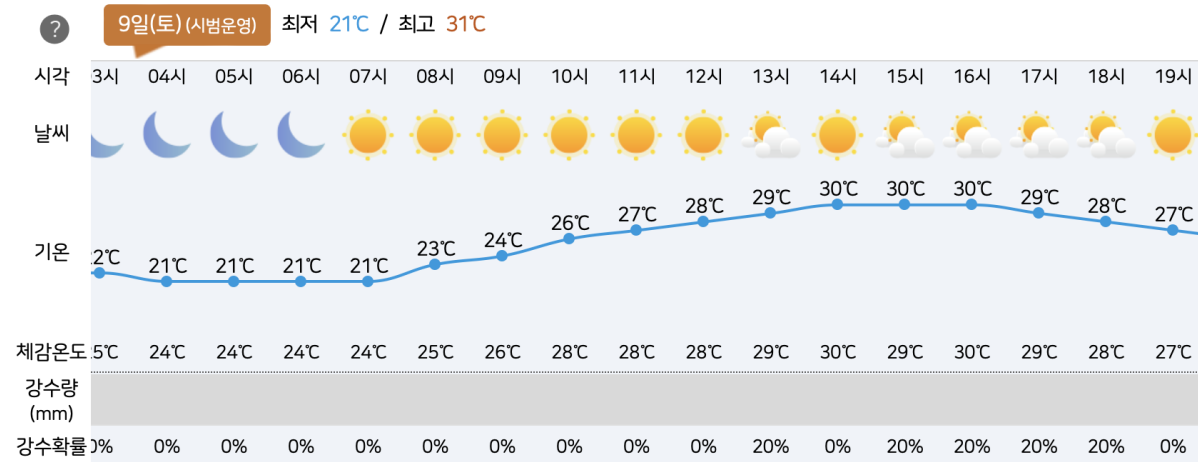


각 지역의 강수 예측을 표현하는

- 예상되는 강수량
- 강수 확률

딥러닝을 활용한 강수 예측

- Softmax를 바탕으로 강수 확률 예측
- 기존 수치 모델과 다른 형태의 확률 표현



Bayesian Neural Network

Neural Net의 weight들을 확률적인 분포로 표현

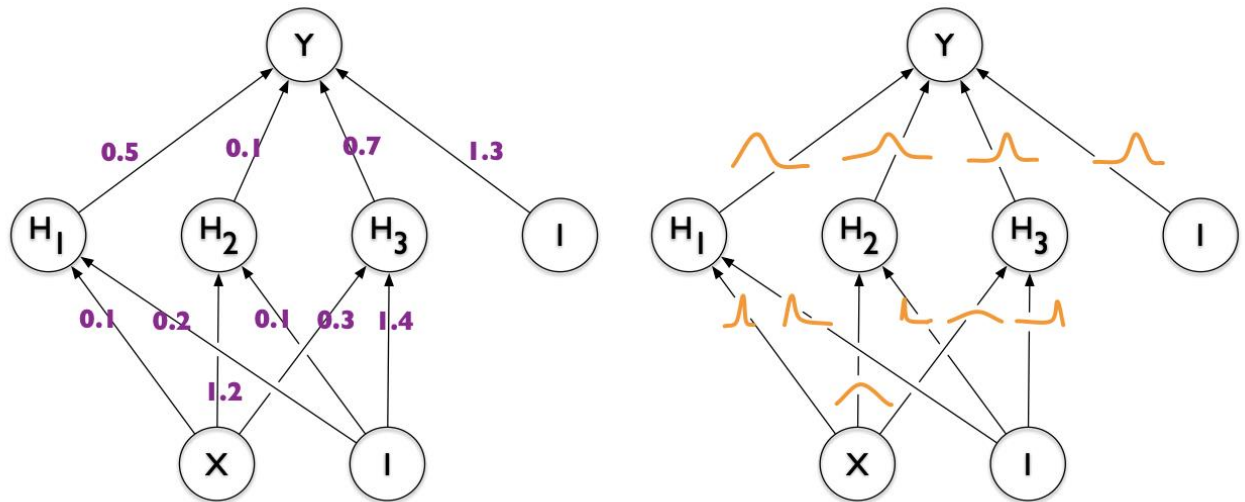
- Posterior 구하는 것이 매우 어려움
- Variational Inference, Monte-Carlo 와 reparameterization trick을 활용

학습 방법

- 모든 parameter는 독립적인 gaussian 분포를 따른다고 가정
- Monte-Carlo Sampling과 reparameterization trick을 활용하여 mean variance 학습

활용

- MC sampling을 통하여 output 분포 확인



Ensembles

- 다수의 Neural Net을 학습하여 해당 결과들을 활용
- 다수의 Neural Net이 같은 예측을 하도록 학습이 되면 이득이 없음
- 기존 ML에서는 bagging (bootstrapping) 을 활용하여 각 학습의 독립성 확보
- NN은 random initialization과 data shuffling으로 독립성 확보 가능

Deep Ensemble

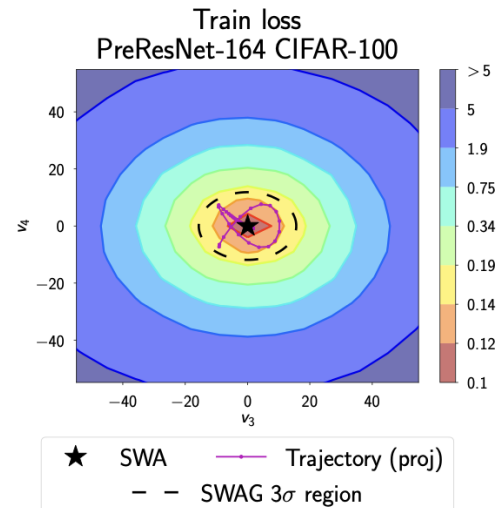
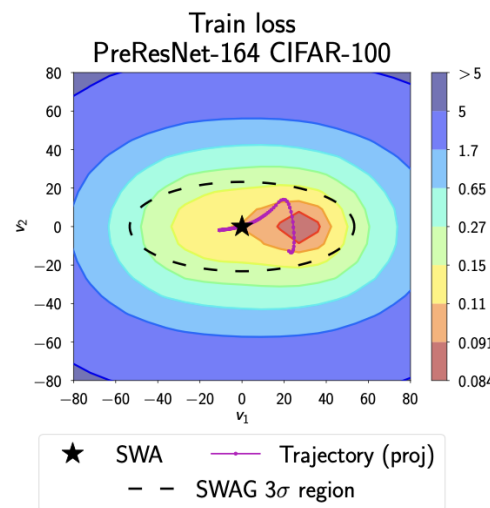
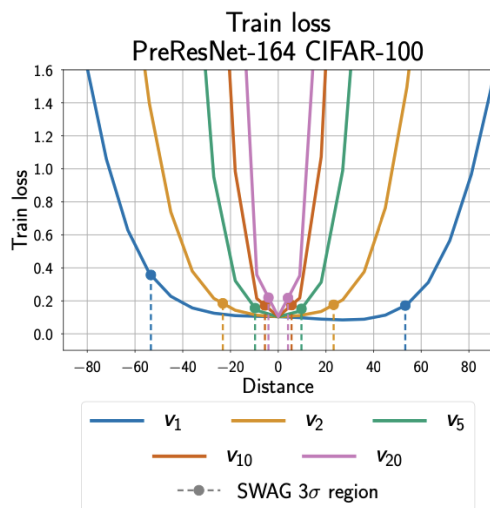
- 여러 NN을 다른 random initialization과 shuffling으로 학습한 후 해당 결과를 바탕으로 output의 uncertainty 를 측정
- Random initialization과 shuffling만으로 충분한가?
 - 성능을 높이기 위한 다른 시도들이 가능
 - Adversarial training, SVGD 등이 시도됨

Stochastic Weight Averaging

- Stochastic Gradient의 학습 방법의 random 성을 활용
- 사전 학습된 네트워크로 추가 SGD 수행
- 특정 Epoch 후 파라미터를 저장 x 'T' 반복 → 복수 파라미터 샘플 획득

Inference

- 얻어진 평균/분산을 활용하여 파라미터를 샘플링 이후 $p(y|Data) = \sum_i p(y|\theta_i) = \sum p(y|\theta, Data)p(\theta|Data)$ 로 Predictive distribution 얻음



Dropout

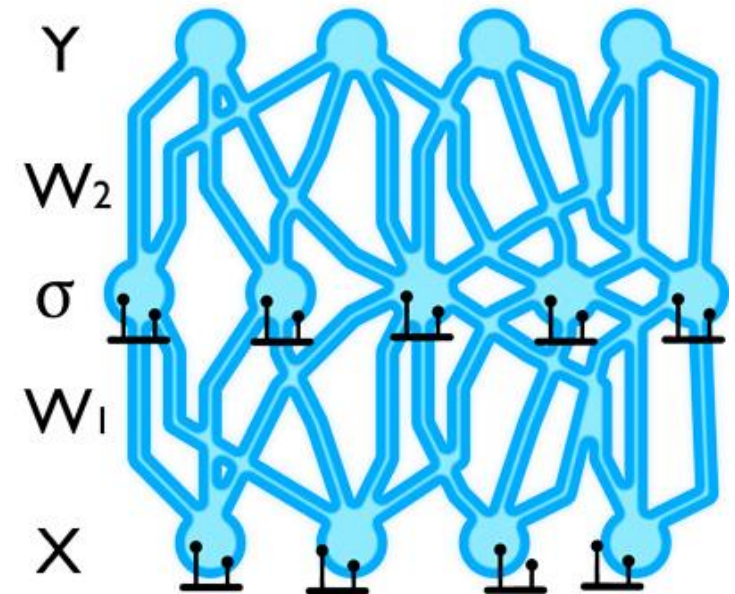
- Overfitting을 방지하기 위하여 neuron들을 random하게 지우는 학습 방법

Variational Inference with dropout

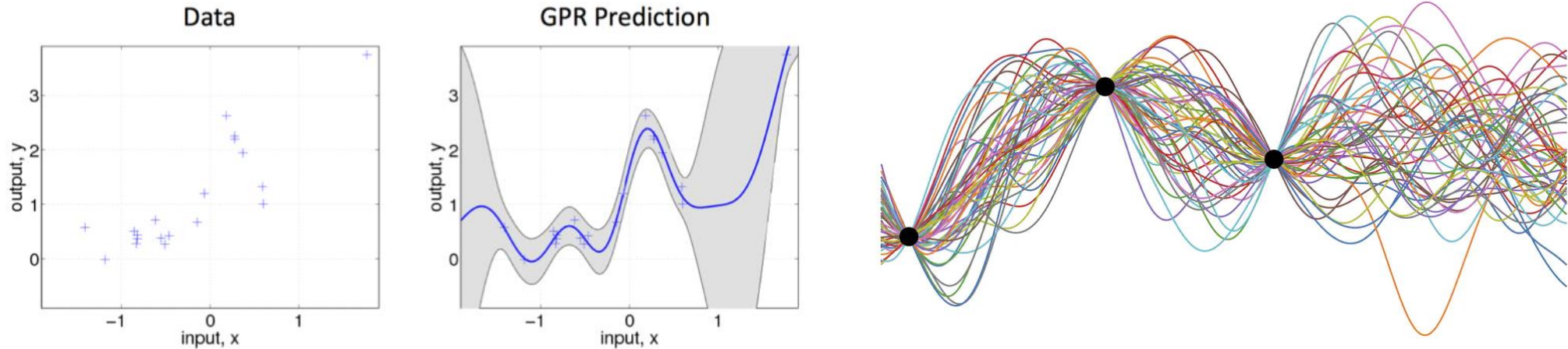
- Parameter들의 posterior 분포는 dropout과 마찬가지로 random하게 0이 되는 분포를 따른다고 가정
- 일반적인 dropout 학습 방법과 일치

MC dropout

- Inference시 학습과 같은 dropout을 통하여 확률적인 Output 표현 가능



Neural Process



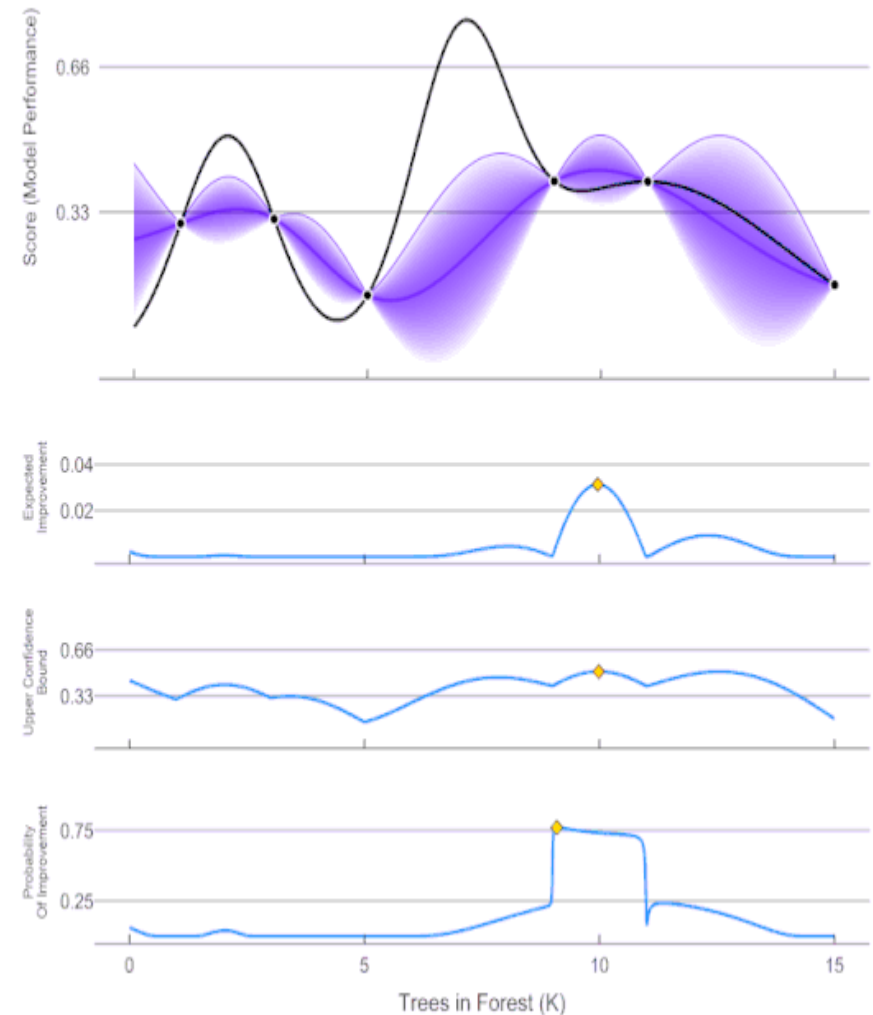
Gaussian Process

- 함수를 확률적으로 표현 할 수 있는 좋은 방법
- 관측 data를 바탕으로 kernel 기반의 확률 모형으로 모든 공간의 uncertainty 와 평균값을 표현 가능
- 관측 data의 수가 늘어나면 연산 복잡도가 매우 증가

Gaussian Process는 다양한 활용 예시가 존재

- Uncertainty 와 expectation 값을 data point의 수에 상관 없이 계산 가능하며, data point의 수가 늘어나면 expectation은 더 정교해지고 uncertainty는 줄어듦
- GP를 활용하면 sample efficient한 Bayesian optimization 구현 가능

ParBayesianOptimization in Action (Round 1)



Neural Processes

- Gaussian Process는 훌륭한 uncertainty를 계산할 수 있는 방법이지만 연산 복잡도가 큰 단점임
- Neural Net을 활용하여 Gaussian Process를 근사하는 방법

Main questions :

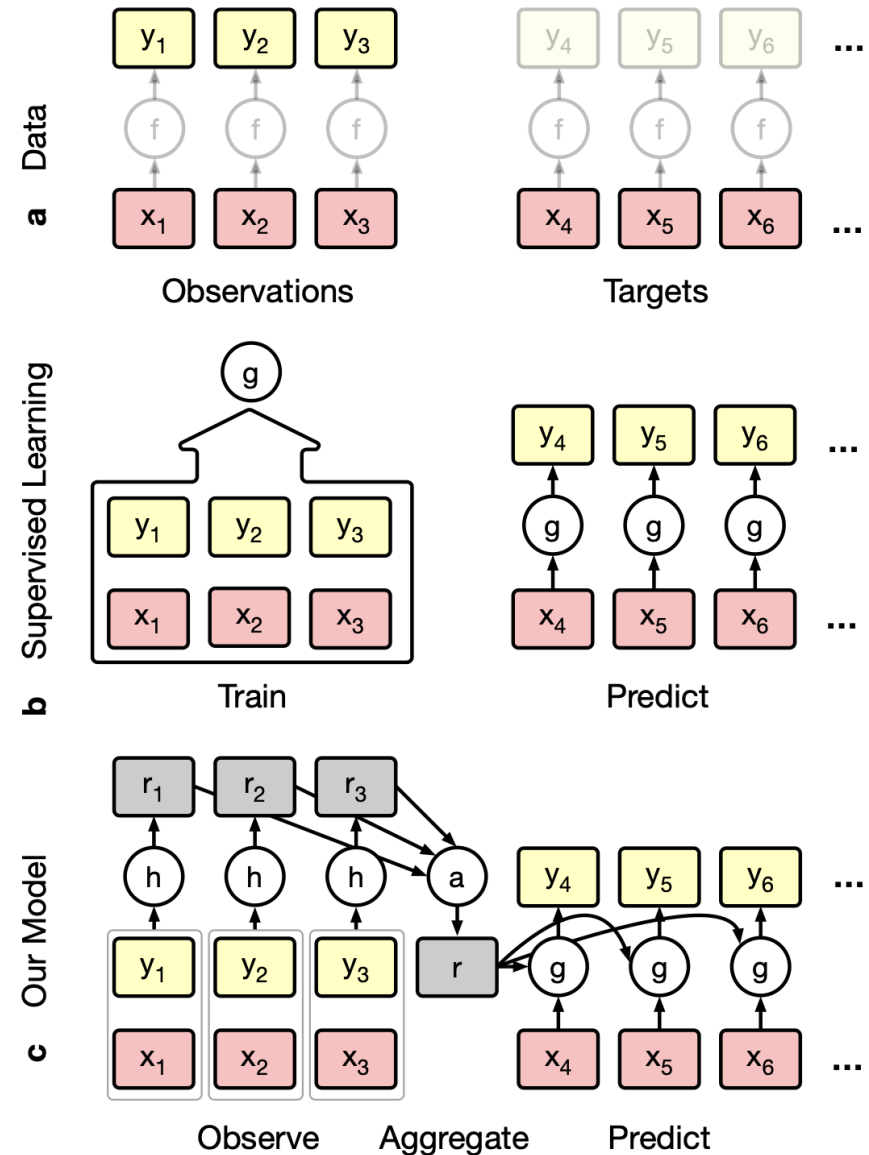
- Gaussian Process의 핵심 idea인 kernel과 이를 활용한 data 상관성 표현을 어떻게 Neural Net으로 구현할까?
- 연산의 복잡성을 어떻게 낮출 수 있을까?
- Uncertainty를 어떻게 표현 할 수 있을까?

Data set의 정보를 취합하여 이것을 inference에 활용

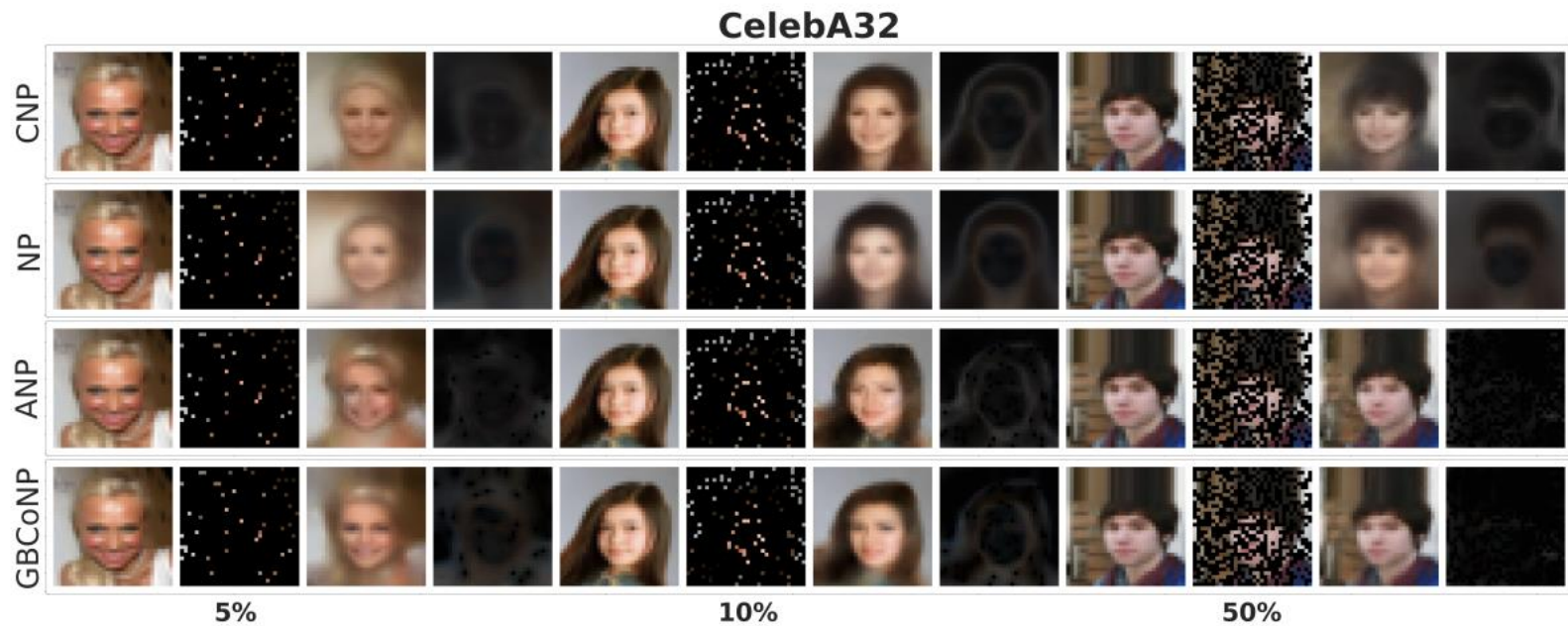
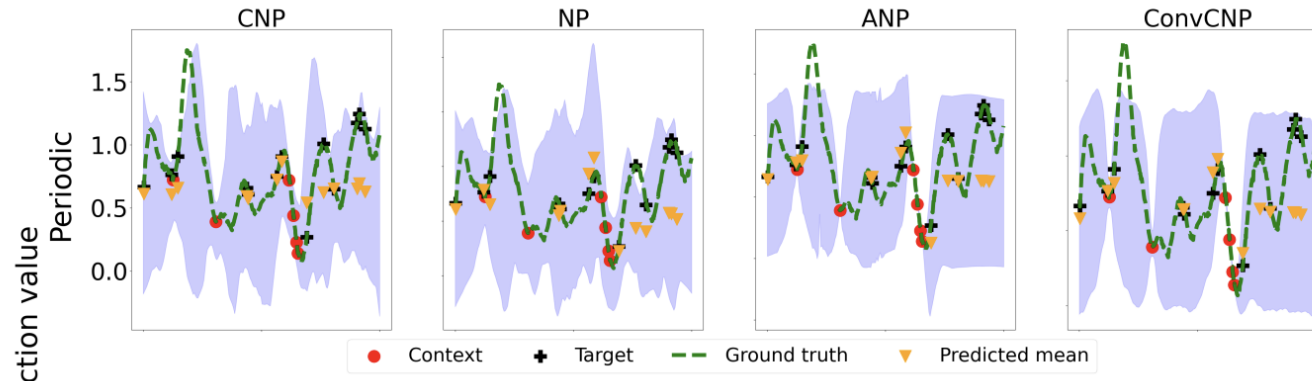
Output을 표현하는 mean, variance를 neural network로 표현

Meta learning과 같은 방법으로 가장 정확하게 새로운 input에 대한 inference를 할 수 있는 parameter 학습

ANP (Kim et al 2019), NP with Stochastic Attention (Kim et al 2021) 등의 후속 논문에서 더욱 더 GP와 같이 비슷한 혹은 근처의 x 의 영향을 받도록 설계



비 관측지역 예측 및 불확실성 측정



Conclusion

Deep Learning

- 놀라운 성능으로 큰 주목을 받고 있음
- Neural Network들이 만들어 내는 결과의 불확실성을 이해하려는 노력이 많음

Softmax Calibration

- 분류 문제에서 Neural Network들은 softmax 를 활용하여 확률 형태로 표현
- Softmax의 표현이 실제 확률과 거리가 있으며 이를 조절하기 위한 추가 장치 필요

Bayesian Neural Network

- Neural Network를 확률적으로 이해하기 위하여 random한 ensemble 모형 설계
- Ensemble 결과를 바탕으로 결과물에 대한 확률적 이해

Neural Process

- Gaussian Process와 비슷한 방법으로 확률적인 표현

통계와 딥러닝

- 딥러닝 알고리즘의 결과 및 데이터 해석을 위한 통계적 접근의 중요성이 높아짐
- 딥러닝 사용자에게 대한 통계 교육과 통계학자들의 딥러닝 이해가 모두 중요

해석 가능한 인공지능

- 복잡한 딥러닝의 판단을 해석하는 방법의 중요성
- 통계적인 불확실성을 정확하게 표현하고 신뢰 가능성을 표시 하는 방법 필요

데이터 오염 및 편향성

- 학습 데이터의 신뢰도 및 편향성 문제
- 데이터 오염 및 편향성을 측정 하는 방법 연구 필요
- 알고리즘의 편향성을 측정하고 보정하는 방법 연구 필요

Thank you



Optimization and Statistical Inference LAB

yunseyoung@kaist.ac.kr

Daehak-Ro 291, KAIST, YuSeong, Daejeon, Republic of Korea

www.osi.kaist.ac.kr