Hierarchical Bayesian Method with MCMC Integration on GPUs

5th GPU Workshop - The Future of Many-Core Computing in Science Wigner Research Centre for Physics (Budapest), 20-21 May 2015

János Márk Szalai-Gindl¹ (szalai@complex.elte.hu) István Csabai¹, László Dobos¹, Támás Budavári², Thomas J. Loredo³, Brandon C. Kelly⁴

> ¹Department of Physics of Complex Systems, ELTE ²The Johns Hopkins University, U.S. ³Cornell University, U.S. ⁴University of California, U.S.

・ 同 ト ・ ヨ ト ・ ヨ ト

Brightness distribution of galaxies

- We can measure: flux, distance
- Use formula: $L = 4\pi r^2 F$
- Luminosity function:

$$\phi(L;\beta,u,l) := \phi_0 \cdot \left(1 - \exp\left(-\frac{L}{l}\right)\right) \cdot \left(\frac{L}{u}\right)^{\beta} \cdot \exp\left(-\frac{L}{u}\right)$$

• β : shape p., l: lower scale p., u: upper scale p., ϕ_0 : norm. const.

< 回 > < 回 > < 回 >

Motivation

Method Use case: luminosity function Future works Summary

Luminosity function





æ

Brightness distribution of galaxies

- We can measure: flux, distance
- Use formula: $L = 4\pi r^2 F$
- Luminosity function:

$$\phi(L;\beta,u,l) := \phi_0 \cdot \left(1 - \exp\left(-\frac{L}{l}\right)\right) \cdot \left(\frac{L}{u}\right)^{\beta} \cdot \exp\left(-\frac{L}{u}\right)$$

- β : shape p., l: lower scale p., u: upper scale p., ϕ_0 : norm. const.
- Main goal: estimate full probability distribution of β , l and u and refine luminosity measurements



- Method: hierarchical Bayesian model
- Input: data + model
- Output: p(parameters) and $\phi(L; \beta, u, l)$

General formulation



Figure : N objects in a population



• characteristics ($\chi \in X$)

- e.g. distance, size, brightness...
- parametrized PDF: $p(\chi|\theta)$
- population parameters $(\theta \in \Theta)$
- measurements (D)
 - χ with noise
- $\boldsymbol{\chi} := \{\chi_i\}_{i=1}^N$, $\boldsymbol{D} := \{D_i\}_{i=1}^N$

< ロ > < 同 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ >



• Inference of distribution of population parameters

<ロ> (日) (日) (日) (日) (日)

æ

Goals

- Inference of distribution of population parameters
- A "classic" method: MLE
 - Likelihood function: $\mathcal{L}(\theta|D_1,\ldots,D_N) = \prod_{i=1}^N p(D_i|\theta)$
 - Finding a value of θ that maximizes \mathcal{L}

A (10) × (10)

Goals

- Inference of distribution of population parameters
- A "classic" method: MLE
 - Likelihood function: $\mathcal{L}(\theta|D_1,\ldots,D_N) = \prod_{i=1}^N p(D_i|\theta)$
 - Finding a value of θ that maximizes \mathcal{L}
- However, suppose we have detail info about measurement errors and
- Further goals:
 - Not only model fitting but iterative improvement for estimation of probability distribution of population parameters and characteristics
 - Refinement on measurements

Goals

- Inference of distribution of population parameters
- A "classic" method: MLE
 - Likelihood function: $\mathcal{L}(\theta|D_1,\ldots,D_N) = \prod_{i=1}^N p(D_i|\theta)$
 - Finding a value of θ that maximizes $\mathcal L$
- However, suppose we have detail info about measurement errors and
- Further goals:
 - Not only model fitting but iterative improvement for estimation of probability distribution of population parameters and characteristics
 - Refinement on measurements
- \implies Hierarchical Bayesian approach:
 - Dealing with not only probabilities but distribution functions

< 同 ト < 三 ト < 三 ト

Hierarchical Bayesian Model



- Drawing samples from joint posterior distribution:
 - $\ \ \, p(\boldsymbol{\chi},\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{D}) \propto p(\boldsymbol{D}|\boldsymbol{\chi}) \cdot p(\boldsymbol{\chi}|\boldsymbol{\theta}) \cdot p(\boldsymbol{\theta})$

A B M A B M

Hierarchical Bayesian Model



- Drawing samples from joint posterior distribution:
 - $\ \ \, p(\boldsymbol{\chi},\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{D}) \propto p(\boldsymbol{D}|\boldsymbol{\chi}) \cdot p(\boldsymbol{\chi}|\boldsymbol{\theta}) \cdot p(\boldsymbol{\theta})$
- By a so-called Metropolis-within-Gibbs (MWG) sampling
- This is an MCMC method run over $\Theta \times X^N$ parameter space

.

Hierarchical Bayesian Model



- Drawing samples from joint posterior distribution:
 - $p(\boldsymbol{\chi}, \boldsymbol{\theta} | \boldsymbol{D}) \propto p(\boldsymbol{D} | \boldsymbol{\chi}) \cdot p(\boldsymbol{\chi} | \boldsymbol{\theta}) \cdot p(\boldsymbol{\theta})$
- By a so-called Metropolis-within-Gibbs (MWG) sampling
- This is an MCMC method run over $\Theta \times X^N$ parameter space
- Alternate estimation heta and χ (Gibbs)

周 ト イ ヨ ト イ ヨ ト

Hierarchical Bayesian Model



- Drawing samples from joint posterior distribution:
 - $p(\boldsymbol{\chi}, \boldsymbol{\theta} | \boldsymbol{D}) \propto p(\boldsymbol{D} | \boldsymbol{\chi}) \cdot p(\boldsymbol{\chi} | \boldsymbol{\theta}) \cdot p(\boldsymbol{\theta})$
- By a so-called Metropolis-within-Gibbs (MWG) sampling
- This is an MCMC method run over $\Theta \times X^N$ parameter space
- Alternate estimation heta and χ (Gibbs)
- N + 1 Markov chains (Metropolis)

• • = • • = •

Computational approaches

•
$$\theta \sim p(\theta|\boldsymbol{\chi})$$
 (CPU)
• $\chi_i \sim p(\chi_i|\theta, D_i)$ for $i = 1, ..., N$ (GPU)
• $p(\theta|\boldsymbol{\chi}) \propto \underbrace{p(\theta)}_{\text{prior}} \cdot \underbrace{\prod_{i=1}^{N} p(\chi_i|\theta)}_{\mathcal{L}(\theta|\chi_1, ..., \chi_N)}$
• $p(\chi_i|\theta, D_i) \propto \underbrace{p(D_i|\chi_i)}_{\text{error}} \cdot p(\chi_i|\theta)$

• Posterior mean $<\chi_i>$ directly from MCMC

イロト イボト イヨト イヨト

Previous knowledge



- Prior PDF
- Initial values

イロト イヨト イヨト

Burn-in period



J. M. Szalai-Gindl HB Method with MCMC Integration on GPUs

< ロ > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 >

Sampling result



J. M. Szalai-Gindl HB Method with MCMC Integration on GPUs

< ロ > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 >

Posterior mean



J. M. Szalai-Gindl HB Method with MCMC Integration on GPUs

æ

Sampling



Sampling



Sampling



Sampling



Sampling





$CPU + data move \stackrel{?}{<} single-threaded GPU kernel$

J. M. Szalai-Gindl HB Method with MCMC Integration on GPUs

伺 ト イヨト イヨト

Use case: luminosity function

•
$$\theta = (\beta, l, u)$$

- If each object is "visible" \Longrightarrow looks pretty good
- If there is flux limit \Longrightarrow difficulties
- We have implementation for both cases which is written in C/C++ with CUDA and works with simulated data.

< 回 > < 回 > < 回 >

A possible difficulty

- Complicated numerical integration, e.g.:
- $\int_0^\infty \int_0^\infty \zeta\left(\frac{L}{4\pi r^2}, T, \sigma_0\right) \cdot \phi(L; \theta) \cdot \delta(r) \, \mathrm{d}L \, \mathrm{d}r$
- $\delta(r)$: distance PDF
- T: flux limit
- $\zeta\left(\frac{L}{4\pi r^2}, T, \sigma_0\right) = \frac{1}{2}\left(1 + \operatorname{erf}\left(\frac{\chi T}{\sqrt{2}\sigma(\chi)}\right)\right)$
- erf: error function

• • = • • = •

Performance tests I

- NVIDIA Tesla K40c
- Linear scaling
- 1M obj.
 2M iter.
 ca. 2.6 hours
- (For a simple model)



< ロ > < 同 > < 回 > < 回 >

Performance tests II

- For more complex model
- e.g. with timeconsuming num. int.



イロト イヨト イヨト



• Utilization cosmological distance

- The expansion of Universe hasn't been taking into account yet
- More complex numerical integration etc.
- Application on SDSS data set

同 ト イ ヨ ト イ ヨ ト



- HB method for object characteristics and population-level parameters estimation
- Characteristics computation with MC on GPU cores

Acknowledgements

- The research was supported by the Hungarian OTKA grants 103244 and 114560.
- Images by courtesy of Boians Cho Joo Young, Stuart Miles, TAW4 and xedos4 at FreeDigitalPhotos.net

Thank you for your attention!

J. M. Szalai-Gindl HB Method with MCMC Integration on GPUs