ε.δε.μ²

ΕΠΙΣΤΗΜΗ ΔΕΔΟΜΕΝΩΝ & ΜΗΧΑΝΙΚΗ ΜΑΘΗΣΗ

ΣΤΟΧΑΣΤΙΚΕΣ ΔΙΕΡΓΑΣΙΕΣ & ΒΕΛΤΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗ ΣΤΗ ΜΗΧΑΝΙΚΗ ΜΑΘΗΣΗ

Στοχαστικές Μηχανές Μη Επιβλεπόμενης Μάθησης: Παραγωγικά Μοντέλα - Generative Models

1. Boltzmann Machine & Logistic Belief Nets
2. Restricted Boltzmann Machine (RBM) - Deep Belief Nets

καθ. Βασίλης Μάγκλαρης

maglaris@netmode.ntua.gr

www.netmode.ntua.gr

Video Conference μέσω Cisco Webex

Πέμπτη 23/4/2020

Εφαρμογή Δειγματοληψίας Gibbs – Boltzmann Machine, BM (1/6) (*επανάληψη*)

Γενικά περί Μηχανής Boltzmann

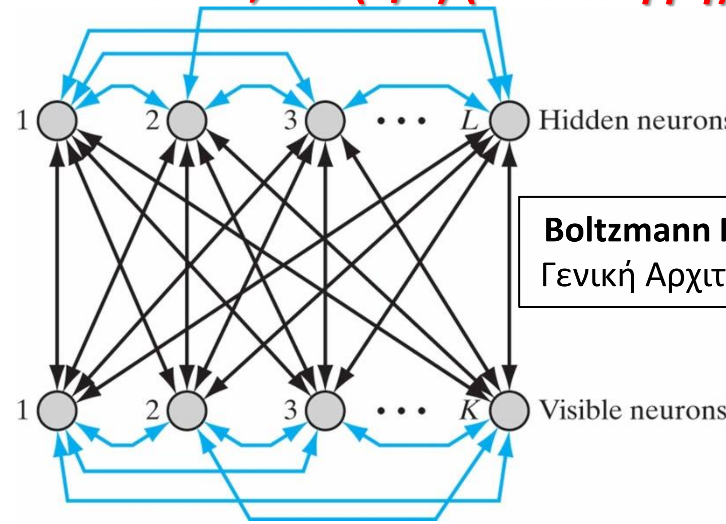
(1985, ***Geoffrey Hinton*** & ***Terry Sejnowski***)

Εξέλιξη του δικτύου ***Hopfield*** με δυαδικές καταστάσεις και αναδρομικές συμμετρικές συνάψεις με στοχαστικά χαρακτηριστικά (***Stochastic Recurrent Networks with Hidden Nodes***). Στόχος η συμπλήρωση **ελλειμματικών** διανυσμάτων εισόδου σε στοιχεία εξόδου με στατιστικές ιδιότητες ισορροπίας συμβατές με το δείγμα μάθησης (***pattern completion***)

Μια ΜΒ περιλαμβάνει:

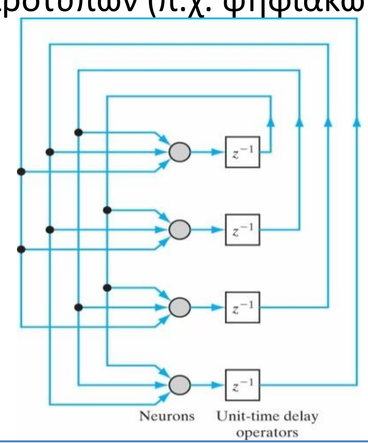
- Δύο διακριτά στρώματα K **Visible** και L **Hidden Neurons** με **δυαδικές καταστάσεις** ± 1
- **Συμμετρικές Συνάψεις** $w_{ij} = w_{ji}$, $w_{ii} = 0$ εν δυνάμει μεταξύ όλων των νευρώνων της **ΒΜ**

Η **μη επιβλεπόμενη** μάθηση ξεκινά με **δείγμα μάθησης** που κλειδώνει στα ***Visible Nodes*** και μέσω **gradient ascent** προσδιορίζει συναπτικά βάρη και καταστάσεις όλων των νευρώνων (***Visible*** & ***Hidden***). Όταν **ελλειμματικό στοιχείο** από **δείγμα test** κλειδώνεται σε υποσύνολο των ***Visible Nodes***, η **ΒΜ** εκτιμά το **πλήρες δειγματικό στοιχείο** στην κατάσταση των ***Visible Nodes***



Boltzmann Machine
Γενική Αρχιτεκτονική

Νευρωνικό Δίκτυο Hopfield (1982, ***John Hopfield***)
Δυαδικοί νευρώνες με αναδρομικές συμμετρικές συνάψεις, threshold activation και ***Supervised Learning*** για μόνιμο προσδιορισμό των $w_{ij} = w_{ji}$, $w_{ii} = 0$, συμβατών με το αξίωμα του ***Hebbs*** σε κατάσταση ισορροπίας (τοπικό ελάχιστο της ***ενέργειας του συστήματος***). Εφαρμογές ταξινόμησης - επεξεργασίας προτύπων (π.χ. ψηφιακών εικόνων)



Εφαρμογή Δειγματοληψίας Gibbs – Boltzmann Machine, BM (2/6) (*επανάληψη*)

Φάσεις Μάθησης Μηχανής Boltzmann

- **Θετική Φάση Μάθησης**: Τα στοιχεία του δείγματος μάθησης κλειδώνουν (***clamp***) δυαδικές καταστάσεις των ***ορατών νευρώνων*** με βάση τις πιθανότητες γνωστών χαρακτηριστικών τους. Μέσω του προσδιορισμού των συναπτικών βαρών η **BM** κωδικοποιεί στους L ***κρυφούς νευρώνες*** στατιστικές ιδιότητες ανώτερης τάξεως (π.χ. συσχετίσεις) με οριακές πιθανότητες (***marginal distribution***) καταστάσεων ***Gibbs*** υπό τη συνθήκη κλειδωμένων καταστάσεων των K ορατών νευρώνων

- **Αρνητική Φάση Ελεύθερης Επεξεργασίας**: Σε δεύτερη φάση, οι νευρώνες (***ορατοί*** και ***κρυφοί***) αλληλεπιδρούν ελεύθερα χωρίς εξάρτηση από το δείγμα μάθησης και ορίζουν συναπτικά βάρη που οδηγούν τη **BM** προς καταστάσεις *θερμικής ισορροπίας* (***Gibbs***). Οι τελικές καταστάσεις των ορατών νευρώνων ***παράγουν*** (στην έξοδο) νέα δειγματικά στοιχεία με οριακές πιθανότητες χαρακτηριστικών συμβατές με το δείγμα μάθησης

- **Πολυπλοκότητα Αλγορίθμου**: Συνήθως απαιτείται μεγάλος αριθμός κρυφών νευρώνων $L \gg K$ για κωδικοποίηση σύνθετων στατιστικών ιδιοτήτων χαρακτηριστικών πολυμόρφου δείγματος, καθώς και πολλές επαναλήψεις για ικανοποιητική σύγκλιση των συμμετρικών συνάψεων $w_{ij} = w_{ji}, w_{ii} = 0$ μεταξύ όλων των $L + K$ νευρώνων

- **Αναλογία με Φυσιολογικά Νευρολογικά Συστήματα**: Ενίσχυση συνάψεων μεταξύ ενεργών νευρώνων (αξίωμα ***Hebbs***). *Θετική Φάση* ~ Ενεργή Εγκεφαλική Λειτουργία, *Αρνητική Φάση* ~ Επεξεργασία σε Κατάσταση Ύπνου (;)

ΣΤΟΧΑΣΤΙΚΕΣ ΔΙΑΔΙΚΑΣΙΕΣ & ΒΕΛΤΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗ ΣΤΗ ΜΗΧΑΝΙΚΗ ΜΑΘΗΣΗ

Εφαρμογή Δειγματοληψίας Gibbs – Boltzmann Machine, BM (3/6) (*επανάληψη*)

Ορισμοί

- **Κατάσταση Δικτύου**: Τυχαίο Διάνυσμά $\mathbf{X} \rightarrow \mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_K, .., x_m)^{\mathrm{T}}, m = L + K$
  $x_i \in \{-1,1\} \triangleq \{OFF, ON\}$ η κατάσταση του νευρώνα i

- **Κατάσταση των K Ορατών & L Κρυφών Νευρώνων**: $\mathbf{X}_\alpha \rightarrow \mathbf{x}_\alpha,\ \mathbf{X}_\beta \rightarrow \mathbf{x}_\beta, \mathbf{x} = (\mathbf{x}_\alpha, \mathbf{x}_\beta)$

- **Συναπτικά Βάρη** $j \rightarrow i : w_{ij} = w_{ji}, w_{ii} = 0$ (πιθανή εξωτερική επίδραση ***bias*** στον κόμβο j θεωρείται ότι εισάγεται από κόμβο 0 σε κατάσταση ON με βάρος w_{j0})

- **Ενέργεια Κατάστασης BM**: $E(\mathbf{x}) \triangleq -\frac{1}{2}\sum_i \sum_{j \neq i} w_{ji} x_i x_j$ για $\mathbf{x}$ με στοιχεία $x_i \in \{-1,1\}$
  (αναλογία με θερμοδυναμική)

- **Πιθανότητες Θερμικής Ισορροπίας**: $P(\mathbf{X} = \mathbf{x}) = \frac{1}{Z}\exp\left(-\frac{E(\mathbf{x})}{T}\right)$, κατανομή ***Gibbs/Boltzmannn***

ΣΤΟΧΑΣΤΙΚΕΣ ΔΙΑΔΙΚΑΣΙΕΣ & ΒΕΛΤΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗ ΣΤΗ ΜΗΧΑΝΙΚΗ ΜΑΘΗΣΗ

Εφαρμογή Δειγματοληψίας Gibbs – Boltzmann Machine, BM (4/6) (*επανάληψη*)

- **Σύνολα Γεγονότων (Events) για Διανυσματικό Δείγμα με m Διαστάσεις**:

  Για τυχαίο στοιχείο $\left[X_1 = x_1, X_2 = x_2, \dots, X_j = x_j, \dots, X_m = x_m\right]^{\mathrm{T}}$ ορίζουμε τα σύνολα

  $$A = \{X_j = x_j\}, B = \{X_1 = x_1, \dots, X_{j-1} = x_{j-1}, X_{j+1} = x_{j+1}, \dots, X_m = x_m\},$$
  $$C = A, B = \{X_1 = x_1, \dots, X_m = x_m\}$$

  Σε θερμική ισορροπία και για X_j που προκύπτουν από τη δειγματοληψία ***Gibbs***:

  $$P(C) = P(A, B) = \frac{1}{Z}\exp\left(\frac{1}{2T}\sum_i \sum_{j \neq i} w_{ji} x_i x_j\right)$$
  $$P(B) = \sum_A P(A, B) = \frac{1}{Z}\sum_{x_j} \exp\left(\frac{1}{2T}\sum_{i \neq j} \sum_j w_{ji} x_i x_j\right)$$

- **Υπό Συνθήκη Πιθανότητες Μεταβάσεων**:

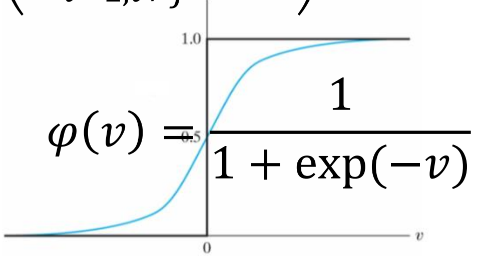
  Δεδομένου ότι x_i, x_j παίρνουν τις τιμές ± 1 η υπό συνθήκη πιθανότητα $P(A|B)$ απλοποιείται:

  $$P(A|B) = \frac{P(A, B)}{P(B)} = \frac{1}{1 + \exp\left(-\frac{x_j}{T}\sum_{i \neq j} w_{ji} x_i\right)}$$

  $$P\left(X_j = x \middle| \{X_1 = x_1, \dots, X_{j-1} = x_{j-1}, X_{j+1} = x_{j+1}, \dots, X_m = x_m\}\right) = \varphi\left(\frac{x}{T}\sum_{i=1, i \neq j}^{m} w_{ji} x_i\right)$$

  όπου $\varphi(\cdot)$ η σιγμοειδής (***logistic***) συνάρτηση $\varphi(v)$

  Η $P(A, B)$ προκύπτει σαν αποτέλεσμα της δειγματοληψίας ***Gibbs*** από αρχική κατάσταση $\mathbf{x}(0)$ με διαδοχικές επισκέψεις $\mathbf{x}(n) \to \mathbf{x}(n+1)$ λαμβάνοντας υπόψη τις πιο πρόσφατες ανανεώσεις των $x_i(n)$ και διαδοχικά μειώνοντας την θερμοκρασία $T \to 0$ (***Simulated Annealing***)



$$\varphi(v) = \frac{1}{1 + \exp(-v)}$$

Εφαρμογή Δειγματοληψίας Gibbs – Boltzmann Machine, BM (5/6) (*επανάληψη*)

Κανόνας Μάθησης Boltzmann

Εφαρμογή κριτηρίου Maximum Likelihood ή Log Likelihood

Το διάνυσμα της κατάστασης $\mathbf{x}$ αποτελείται από τη συρραφή δύο υποσυνόλων: Τις καταστάσεις των ορατών νευρώνων $\mathbf{x}_\alpha$ και των κρυφών νευρώνων $\mathbf{x}_\beta$ με οριακές πιθανότητες θερμικής ισορροπίας ***Gibbs***

Η λειτουργία της **BM** προχωρά σε δύο φάσεις:

- **Θετική Φάση** που καθορίζεται από τις συνθήκες κλειδώματος (clamping) καταστάσεων του στα δειγματικά στοιχεία μάθησης του περιβάλλοντος $\boldsymbol{\mathcal{T}}$
- **Αρνητική Φάση** όπου το δίκτυο λειτουργεί αυτόνομα χωρίς εισόδους από το περιβάλλον

Με δεδομένα τα συναπτικά βάρη w_{ji}, στοιχεία της μήτρας $\mathbf{w}$ όλου του δικτύου, ορίζονται οι πιθανότητες ***ορατών*** καταστάσεων $P(\mathbf{X}_\alpha = \mathbf{x}_\alpha)$. Αν έχουμε πολλά στοιχεία μάθησης στο $\boldsymbol{\mathcal{T}}$, μπορούμε να θεωρήσουμε ότι οι καταστάσεις $\mathbf{X}_\alpha$είναι ***ανεξάρτητα*** τυχαία διανύσματα και η συνολική τους πιθανότητα δίνεται από το ***παραγοντικό γινόμενο*** $\prod_{\mathbf{x}_\alpha \in \boldsymbol{\mathcal{T}}} P(\mathbf{X}_\alpha = \mathbf{x}_\alpha)$

Αν θεωρήσουμε τον λογάριθμο του γινομένου $L(\mathbf{w})$ έχουμε

$$L(\mathbf{w}) = \log \prod_{\mathbf{x}_\alpha \in \boldsymbol{\mathcal{T}}} P(\mathbf{X}_\alpha = \mathbf{x}_\alpha) = \sum_{\mathbf{x}_\alpha \in \boldsymbol{\mathcal{T}}} \log P(\mathbf{X}_\alpha = \mathbf{x}_\alpha)$$

Οι $P(\mathbf{X}_\alpha = \mathbf{x}_\alpha)$ συμπεριλαμβάνουν τις πιθανότητες όλων των καταστάσεων $\mathbf{x} = (\mathbf{x}_\alpha, \mathbf{x}_\beta)$ με σταθερό το υποσύνολο των κλειδωμένων ορατών καταστάσεων $\mathbf{x}_\alpha$:

$$P(\mathbf{X}_\alpha = \mathbf{x}_\alpha) = \frac{1}{Z} \sum_{\mathbf{x}_\beta} \exp\left(-\frac{E(\mathbf{x})}{T}\right), \qquad Z = \sum_{\mathbf{x}} \exp\left(-\frac{E(\mathbf{x})}{T}\right)$$

Εφαρμογή Δειγματοληψία Gibbs – Boltzmann Machine, BM (6/6) (*επανάληψη*)

Κανόνας Μάθησης Boltzmann

Εφαρμογή κριτηρίου Maximum Likelihood ή Log Likelihood (συνέχεια)

Προκύπτει επομένως για τον λογάριθμο του παραγοντικού γινομένου

$$L(\mathbf{w}) = \sum_{\mathbf{x}_\alpha \in \boldsymbol{\mathcal{T}}} \left(\log \sum_{\mathbf{x}_\beta} \exp\left(-\frac{E(\mathbf{x})}{T}\right) - \log \sum_{\mathbf{x}} \exp\left(-\frac{E(\mathbf{x})}{T}\right) \right)$$

Παραγωγίζοντας ως προς τα συναπτικά βάρη w_{ji} έχουμε

$$\frac{\partial L(\mathbf{w})}{\partial w_{ji}} = \frac{1}{T} \sum_{\mathbf{x}_\alpha \in \boldsymbol{\mathcal{T}}} \left(\sum_{\mathbf{x}_\beta} P(\mathbf{X}_\beta = \mathbf{x}_\beta | \mathbf{X}_\alpha = \mathbf{x}_\alpha) x_j x_i - \sum_{\mathbf{x}} P(\mathbf{X} = \mathbf{x}) x_j x_i \right) \triangleq \frac{1}{T}\left(\rho_{ji}^{+} - \rho_{ji}^{-}\right)$$

Το ρ_{ji}^{+} υποδηλώνει τον μέσο ρυθμό ενεργοποίησης (***firing rate***) ή τη συσχέτιση (***correlation***) μεταξύ των καταστάσεων των νευρώνων $j \leftrightarrow i$ στη **Θετική Φάση** και το ρ_{ji}^{-} τη συσχέτιση (***correlation***) μεταξύ των καταστάσεων των νευρώνων $j \leftrightarrow i$ στη **Αρνητική Φάση**

Ο κανόνας μάθησης Boltzmann (***Boltzmann Learning Rule***) μεγιστοποιεί το $L(\mathbf{w})$ με τη μέθοδο του ***gradient ascent***:

$$\Delta w_{ji} = \boldsymbol{\epsilon} \frac{\partial L(\mathbf{w})}{\partial w_{ji}} = \eta\left(\rho_{ji}^{+} - \rho_{ji}^{-}\right)$$

Όπου $\eta = \frac{\boldsymbol{\epsilon}}{T}$ η ***learning rate parameter*** η οποία μεταβάλλεται στις επαναλήψεις του ***Simulated Annealing***. Τα βάρη ανανεώνονται με βάση όλα τα στοιχεία του δείγματος μάθησης (***batch mode***) με μεγάλη πολυπλοκότητα και αργή σύγκλιση $\Rightarrow$ ***ΑΝΑΓΚΗ ΑΠΛΟΠΟΙΗΣΗΣ ΔΙΚΤΥΟΥ***

ΣΤΟΧΑΣΤΙΚΕΣ ΔΙΑΔΙΚΑΣΙΕΣ & ΒΕΛΤΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗ ΣΤΗ ΜΗΧΑΝΙΚΗ ΜΑΘΗΣΗ

Στατιστική Ταξινόμηση: Generative & Discriminative Models

Παραδοσιακό Διακριτικό Μοντέλο (Discriminative Model) Στατιστικής Ταξινόμησης

Observable Input Data: x **Target Output Labels**: y

Απ' ευθείας εκτίμηση $P(y|x)$ από δεδομένα του δείγματος μάθησης και ανάθεση της πιθανότερης y σε data x με βάση τις εμφανίσεις της y ***υπό συνθήκη*** x που μετρήθηκαν στη φάση της (***επιβλεπόμενης***) μάθησης, π.χ. ***Logistic Regression*** και ***Back-Propagation Algorithm***

Παραγωγικό Μοντέλο (Generative Model) Στατιστικής Ταξινόμησης

Observable Input Data: x **Target Output Labels**: y

Εκίμηση $P(x,y)$ με βάση ***συνδυασμένες*** στατιστικές παραδοχές εμφάνισης των x και y, υπολογισμός υπό συνθήκη πιθανοτήτων $P(y|x) = \frac{P(x,y)}{P(x)}$, $P(x) = \sum_y P(x,y)$ από κανόνα ***Bayes*** και ανάθεση της πιθανότερης y σε data x. Τα ζεύγη x, y ***δημιουργούνται*** σύμφωνα με τις εμπειρικές $P(x,y)$ όπως αυτές εκτιμήθηκαν από το δείγμα μάθησης ώστε να προσεγγίζουν τα χαρακτηριστικά συγκεκριμένων εφαρμογών ταξινόμησης δεδομένων

Παράδειγμα: $x \in \{1,2\}, y \in \{0,1\}$ (*βάση του* https://en.wikipedia.org/wiki/Generative_model)

$P(x,y)$	$y=0$	$y=1$
$x=1$	$1/2$	0
$x=2$	$1/6$	$2/6$

$\Rightarrow$

$P(y\|x)$	$y=0$	$y=1$
$x=1$	$\mathbf{1}$	0
$x=2$	$2/6$	$\mathbf{4/6}$

$P(x=1) = 1/2,\ P(x=2) = 3/6 = 1/2$

Προτιμάται για περιπτώσεις που τα δεδομένα παρουσιάζουν ελλείψεις (π.χ. κενά σε εικόνες ή δυσδιάκριτα σήματα φωνής) τις οποίες το σύστημα μάθησης καλείται να μαντέψει με βάση μοντέλα στατιστικών ***συσχετίσεων*** χαρακτηριστικών τους, π.χ. ***Boltzmann Machine***

Στατιστική Προσέγγιση: Generative & Discriminative Models (1/2)

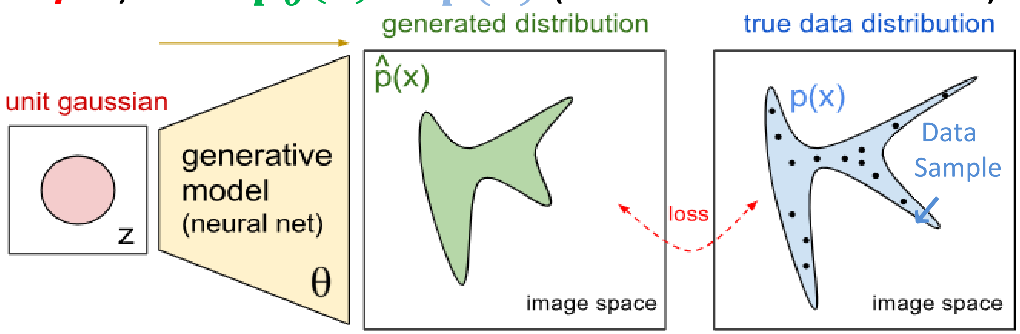
Γενίκευση Παραγωγικού Μοντέλου (Generative Model)

https://openai.com/blog/generative-models/

$p(x)$: Κατανομή των στοιχείων του αληθινού δείγματος (***Data Sample***) $\{x_1, x_2, \ldots, x_n\}$

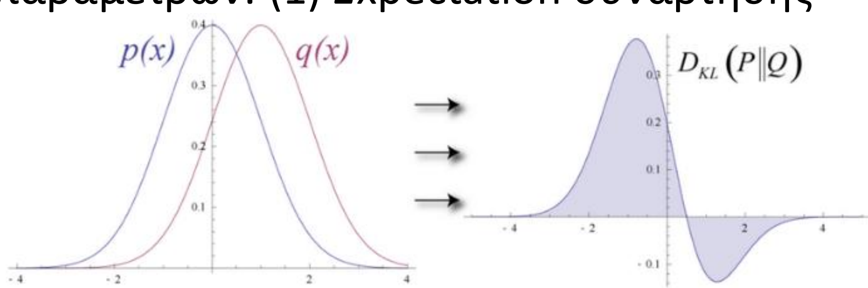
$\hat{p}_\theta(x)$: Κατανομή των εικονικών στοιχείων του παραγόμενου δείγματος (***Generated Sample***) στην **έξοδο** νευρωνικού δικτύου παραμέτρων θ με αυθαίρετο δείγμα **εισόδου**, π.χ. 100 τυχαίοι αριθμοί με κανονική κατανομή, ***Gaussian Sample*** Z

Διαδικασία Μάθησης: Ρύθμιση παραμέτρων θ νευρωνικού δικτύου με βάση δεδομένα μάθησης (***Training Sample***) ώστε $\hat{p}_\theta(x) \to p(x)$ (κατά ***Kullback-Leibler***)



Μετρικές Ομοιότητας Κατανομών $p(x), q(x)$

- **Expectation-Maximization (*EM*) Algorithm**:
  Επαναλήψεις δύο σταδίων για προσδιορισμό παραμέτρων: (1) ***E***xpectation συνάρτησης Log-Likelihood, (2) ***M***aximization
  (*χρησιμοποιείται ευρύτατα σε Μηχανική Μάθηση*)
- **Kullback-Leibler (*KL*) Divergence** :
  $$D_{\mathrm{KL}}(P||Q) = \sum_{x \in \mathcal{T}} P(x) \log \frac{Q(x)}{P(x)}$$
  (*εφαρμόζεται σε Boltzmann Machine,* https://skymind.ai/wiki/restricted-boltzmann-machine)



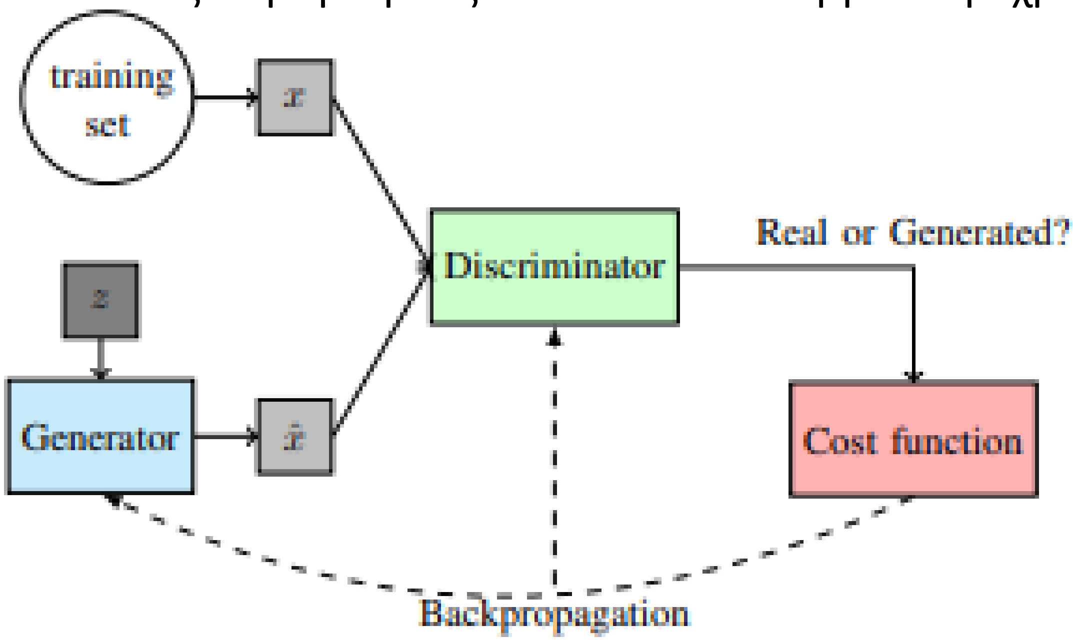
Στατιστική Προσέγγιση: Generative & Discriminative Models (2/2)

Generative Adversarial Networks - GAN (2010 ***Olli Niemitalo***, 2014 ***Ian Goodfellow***)

Συνδυασμός ανεξάρτητης επεξεργασίας από δύο *παίκτες* σε ***zero-sum adversarial game*** μεταξύ ***παραγόμενου εικονικού δείγματος*** και ***αληθινού δείγματος .*** Η ***μάθηση*** βασίζεται σε δυο νευρωνικά δίκτυα τύπου Multilayer Perceptron - ***MLP***:

- **Generator** που με είσοδο ***latent random variables*** z (π.χ. ***Gauss***) δημιουργεί στην έξοδο εικονικό παραγόμενο (***generated***) δείγμα $\hat{x}$ με κατανομή $p_\theta(\hat{x})$
- **Discriminator** που προσπαθεί να ταξινομήσει με ***επιβλεπόμενη μάθησης*** τη διαφορά μεταξύ ***αληθινών δεδομένων μάθησης*** $x \sim p(x)$ και ***εικονικών δεδομένων*** $\hat{x} \sim p_\theta(\hat{x})$

Όσο ο ***Discriminator*** καταλαβαίνει τη διαφορά (έξοδος ***Generated***), ο παίκτης ***Generator*** τροποποιεί τις παραμέτρους του και επαναλαμβάνει μέχρι να τον εξαπατήσει (έξοδος ***Real***)



Εφαρμογές:
Computer vision, virtual reality, computer graphics, interactive games, scientific simulations, ….

https://www.researchgate.net/publication/322413149_Everything_You_Wanted_to_Know_about_Deep_Learning_for_Computer_Vision_but_Were_Afraid_to_Ask

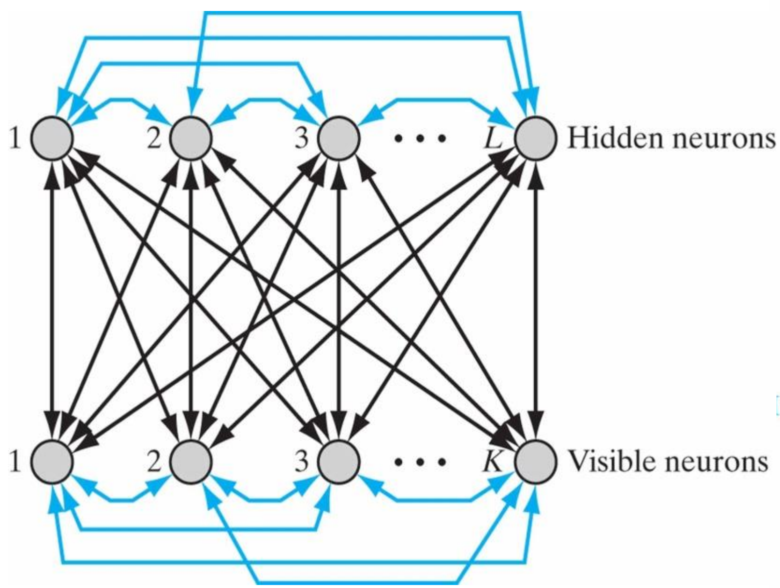
Generative Stochastic Neural Networks

Geoffrey Hinton, "**Tutorial on Deep Belief Nets**" *2007 NIPS (Neural Information Processing Systems) Conference* https://www.cs.toronto.edu/~hinton/nipstutorial/nipstut3.pdf

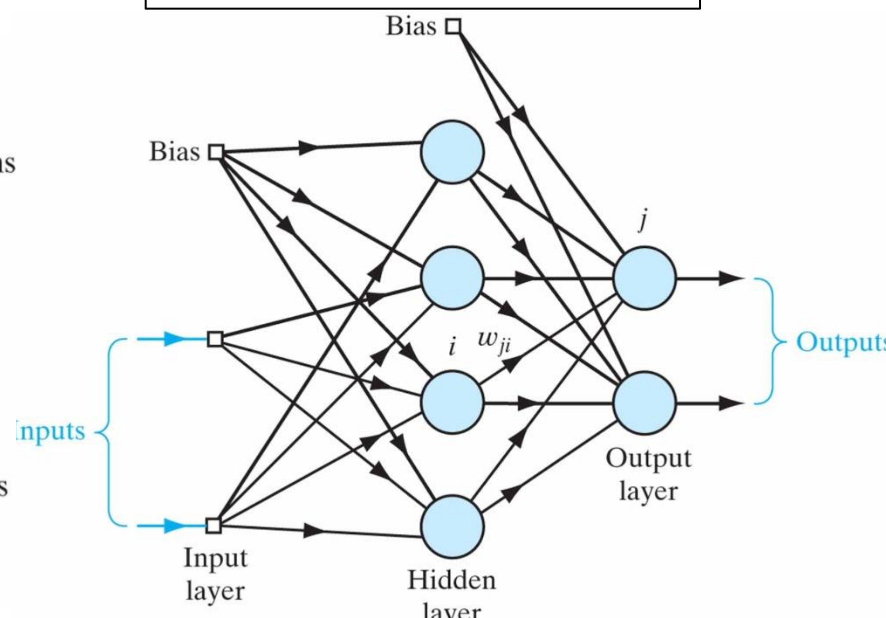
Generative Deep Neural Networks με Δυαδικούς (ON/OFF) Στοχαστικούς Νευρώνες

- **Στόχοι**: (1) Εκτίμηση (συμπερασματολογία, inference) μη παρατηρήσιμων συνιστωσών κατάστασης, (2) Παραγωγή (generation) εικονικών δεδομένων συμβατών με κατανομή δείγματος μάθησης
- Διασύνδεση με **συμμετρικούς** νευρώνες ⇒ **Boltzmann Machine** (1983, ***Geoffrey Hinton*** & ***Terry Sejnowski***)
- Διασύνδεση σε **Κατευθυντικό** γράφο χωρίς κύκλους ⇒ **Logistic (Sigmoid) Belief Nets** (1992, ***Radford Neal***)

Boltzmann Machine



Logistic (Sigmoid) Belief Nets



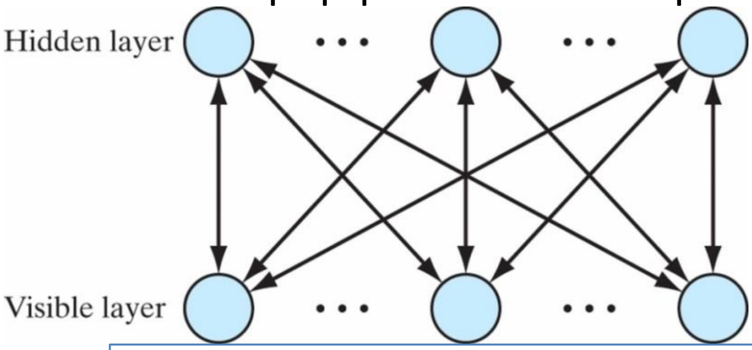
Δυσκολίες μάθησης (ρύθμιση συνάψεων κρυφών επιπέδων), αργή σύγκλιση

ΣΤΟΧΑΣΤΙΚΕΣ ΔΙΑΔΙΚΑΣΙΕΣ & ΒΕΛΤΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗ ΣΤΗ ΜΗΧΑΝΙΚΗ ΜΑΘΗΣΗ

Restricted Boltzmann Machine (RBM) (1/6)

Harmonium (1986, *Paul Smolensky*) → **RBM** (2006, *Geoffrey Hinton*)

- Στοχαστικοί νευρώνες 2 επιπέδων (**ορατό**, **κρυφό**), συμμετρικές συνάψεις, καταστάσεις $\{0,1\}$
- Οι καταστάσεις των ορατών νευρώνων κωδικοποιούν παρατηρήσιμα χαρακτηριστικά (*observable features*) δείγματος εισόδου/εξόδου, ενώ του κρυφού επίπεδου κωδικοποιούν κρυφές ιδιότητες (*latent features*)
- Νευρώνες του ιδίου επιπέδου: **Ασύνδετοι** $\Rightarrow$ Οι καταστάσεις κρυφών νευρώνων είναι **ανεξάρτητες** τυχαίες μεταβλητές υπό την συνθήκη των καταστάσεων των ορατών νευρώνων
- Συνάρτηση ενεργοποίησης νευρώνων: Σιγμοειδής (*logistic*) συνάρτηση $\varphi(v) = \frac{1}{1+\exp(-v)}$
- Οι καταστάσεις των νευρώνων οδηγούνται σε ισορροπία σε επαναλαμβανόμενα διπλά *βήματα Gibbs* $\mathrm{t} = 0,1,2,\dots,k$ για κάθε δειγματικό στοιχείο μάθησης $\in \mathcal{T}$. Κάθε βήμα περιλαμβάνει: (1) τη παραγωγή τιμών από **όλα** τα visible neurons → hidden neurons σε πρώτο πέρασμα και (2) σε επόμενο πέρασμα από **όλα** τα hidden neurons → visible neurons
- Τα συναπτικά βάρη ανανεώνονται μετά την είσοδο όλων των στοιχείων του $\mathcal{T}$ (*batch mode*)



Η διαδικασία μάθησης συνήθως επαναλαμβάνεται σε εποχές (*epochs*) με βάση το ίδιο σύνολο δειγματικών στοιχείων (*batch*) με πιθανή αλλαγή της σειράς τους

Πλεονέκτημα RBM από Boltzmann Machine:
Η μη ύπαρξη διασύνδεσης μεταξύ νευρώνων του ιδίου επιπέδου επιτρέπει τη γρήγορη παραγδειγματικών στοιχείων συμβατών με δεδομένα μάθησης

Restricted Boltzmann Machine (RBM) (2/6)

Αλγόριθμος μάθησης σε RBM – Contrastive Divergence (***Geoffrey Hinton*** **2002**)

https://www.cs.toronto.edu/~hinton/absps/guideTR.pdf, https://christian-igel.github.io/paper/TRBMAI.pdf

Ορισμοί Δυαδικών Καταστάσεων $\{0,1\}$:

Συνιστώσα v_i του $\mathbf{x}_\alpha^{(\mathrm{t})}$: Κατάσταση **ορατού** (*visible*) νευρώνα i στο βήμα t, $v_i = \begin{cases} 1\ (ON) \\ 0\ (OFF) \end{cases}$

Συνιστώσα h_j του $\mathbf{x}_\beta^{(\mathrm{t})}$: Κατάσταση **κρυφού** (*hidden*) νευρώνα j στο βήμα t, $h_j = \begin{cases} 1\ (ON) \\ 0\ (OFF) \end{cases}$

Ζητούμενο: Προσδιορισμός Συναπτικών Βαρών $w_{ij} = w_{ji}$ μεταξύ ορατών και κρυφών νευρώνων ώστε στη σύγκλιση (t → ∞) να δημιουργηθούν καταστάσεις v_i του $\mathbf{x}_\alpha^{(\mathrm{t})}$ με κατανομή όμοια κατά **Kullback-Leibler (*KL*)** με αυτή του δείγματος μάθησης $\mathbf{x}_\alpha^{(0)} \in \mathcal{T}$

$$P\left(\mathbf{x}_\alpha^{(\mathrm{t})}\right) = \frac{1}{Z}\sum_{\mathbf{x}_\beta^{(\mathrm{t})}} \exp\left(-\frac{E\left(\mathbf{x}^{(\mathrm{t})}\right)}{T}\right), E\left(\mathbf{x}^{(\mathrm{t})}\right) = E\left(\mathbf{x}_\alpha^{(\mathrm{t})}, \mathbf{x}_\beta^{(\mathrm{t})}\right) = -\sum_{i,j} v_i h_j w_{ij}\ , -\frac{\partial E\left(\mathbf{x}^{(\mathrm{t})}\right)}{\partial w_{ij}} = v_j h_i$$

Αλγόριθμος: Για όλα τα στοιχεία $\mathbf{x}_\alpha^{(0)}$ του δείγματος (ή *batch*) μάθησης επαναλαμβάνονται βήματα $\mathrm{t} = 1,2,3 \ldots k$ διπλής παραγωγής διανυσμάτων καταστάσεων $\mathbf{x}_\alpha^{(\mathrm{t})}, \mathbf{x}_\beta^{(\mathrm{t})}$:

(λη

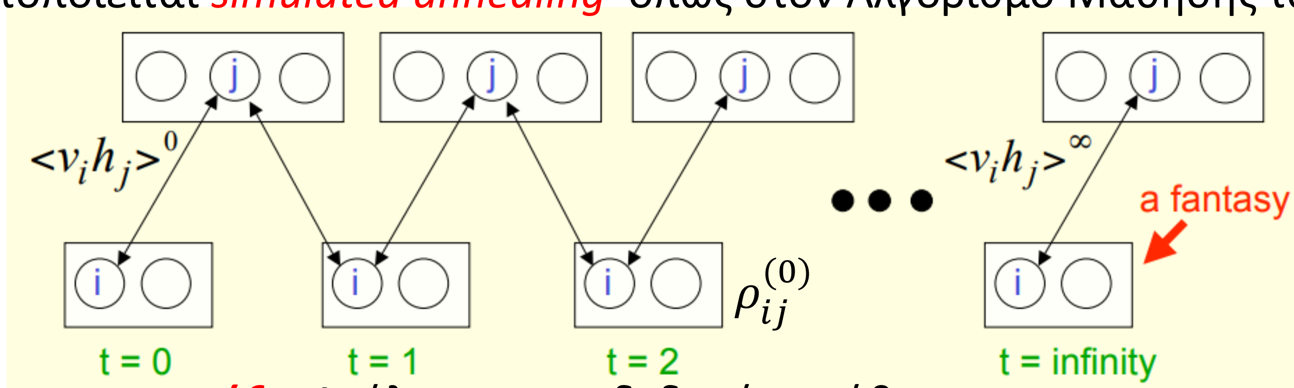
- Εκκίνηση $\mathrm{t} = 0$ με κλείδωμα των καταστάσεων των ορατών νευρώνων σε *δειγματικά στοιχεία μάθησης* $\mathbf{x}_\alpha^{(0)} \in \mathcal{T}$ και στο επόμενο πέρασμα (*pass*) παραγωγή των $\mathbf{x}_\beta^{(0)}$
- Σε κάθε βήμα $\mathrm{t} = 1,2,3 \ldots k$ πραγματοποιείται παράλληλη ανανέωση με δειγματοληψία *Gibbs* των $\mathbf{x}_\alpha^{(\mathrm{t})}$ με δεδομένες όλες τις $\mathbf{x}_\beta^{(\mathrm{t}-1)}$ και παραγωγή των $\mathbf{x}_\beta^{(\mathrm{t})}$ από τις $\mathbf{x}_\alpha^{(\mathrm{t})}$
- Από τις $\mathbf{x}_\alpha^{(0)}$, $\mathbf{x}_\alpha^{(k)}$ υπολογισμός διαφοροποιήσεων Δw_{ij} των συναπτικών βαρών, της συνεισφοράς του $\mathbf{x}_\alpha^{(0)}$ στη μεγιστοποίηση του λογαρίθμου του λόγου πιθανοφάνειας $L(\mathbf{w})$

Restricted Boltzmann Machine (RBM) (3/6)

Αλγόριθμος μάθησης σε RBM – Contrastive Divergence (*Geoffrey Hinton* 2002)

http://www.cs.utoronto.ca/~hinton/absps/nccd.pdf

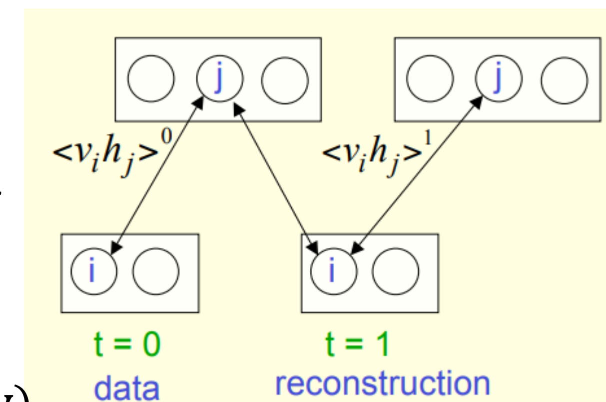
Κριτήριο: Μεγιστοποίηση του λόγου πιθανοφάνειας $L(\mathbf{w}) = \sum_{\mathbf{x}_\alpha \in \mathcal{T}} \log P(\mathbf{X}_\alpha = \mathbf{x}_\alpha)$ με βήματα προς *Gradient Ascent* $\frac{\partial L(\mathbf{w})}{\partial w_{ij}} = \rho_{ij}^{(0)} - \rho_{ij}^{(k)}$ όπου $\rho_{ij}^{(0)}$ και $\rho_{ij}^{(k)}$ οι μέσες συσχετίσεις των νευρώνων i, j κατά την εκκίνηση $\mathrm{t} = 0$ και την τελική σύγκλιση $\mathrm{t} = k \to \infty$ (*όπως στις Boltzmann Machines - BM* αλλά *χωρίς εξάρτηση από τη θερμοκρασία* T αφού δεν πραγματοποιείται *simulated annealing* όπως στον Αλγόριθμο Μάθησης των *BM*)



$$\rho_{ij}^{(\mathrm{t})} \leftrightarrow < v_i h_j >^{\mathrm{t}}$$

Προσέγγιση στη πράξη: Ανάλογα με τα δεδομένα μάθησης (αριθμός στοιχείων δείγματος, αντιπροσωπευτικότητα, παρατηρήσιμα χαρακτηριστικά - *features* που καθορίζουν τους ορατούς νευρώνες) και τον αριθμό κρυφών νευρώνων που καθορίζουν *latent features* μπορεί να αρκούν λίγα βήματα k αντί των πολλών για κατευθύνσεις μεγιστοποίησης $\rho_{ij}^{(0)} - \rho_{ij}^{(\infty)}$

Μέγιστη απλούστευση: $k = 1,\ \Delta w_{ij} = \varepsilon \left(\rho_{ij}^{(0)} - \rho_{ij}^{(1)} \right)$ προσέγγιση *Contrastive Divergence* αντί μεγιστοποίησης του $L(\mathbf{w})$

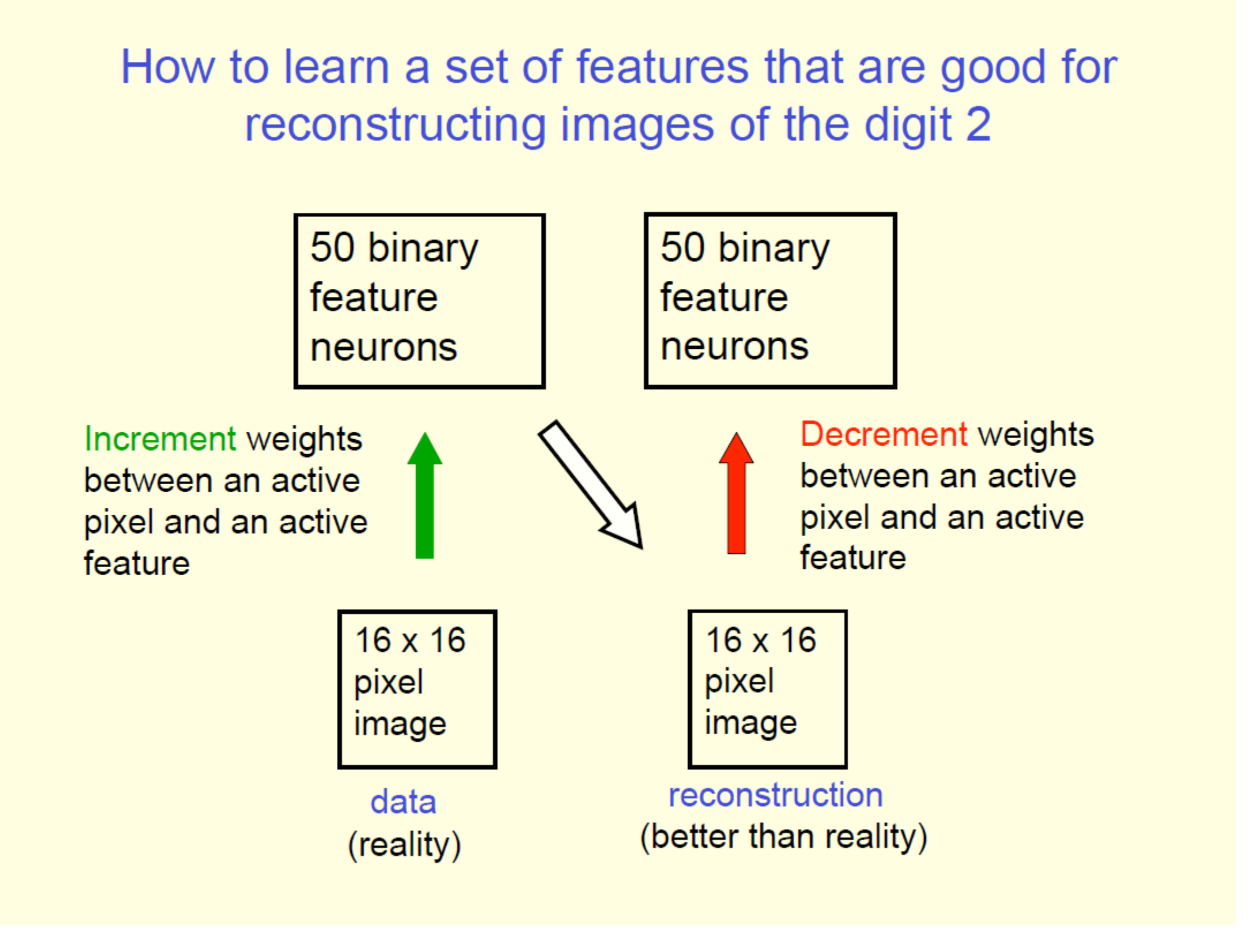


ΣΤΟΧΑΣΤΙΚΕΣ ΔΙΑΔΙΚΑΣΙΕΣ & ΒΕΛΤΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗ ΣΤΗ ΜΗΧΑΝΙΚΗ ΜΑΘΗΣΗ

Restricted Boltzmann Machine (RBM) (4/6)

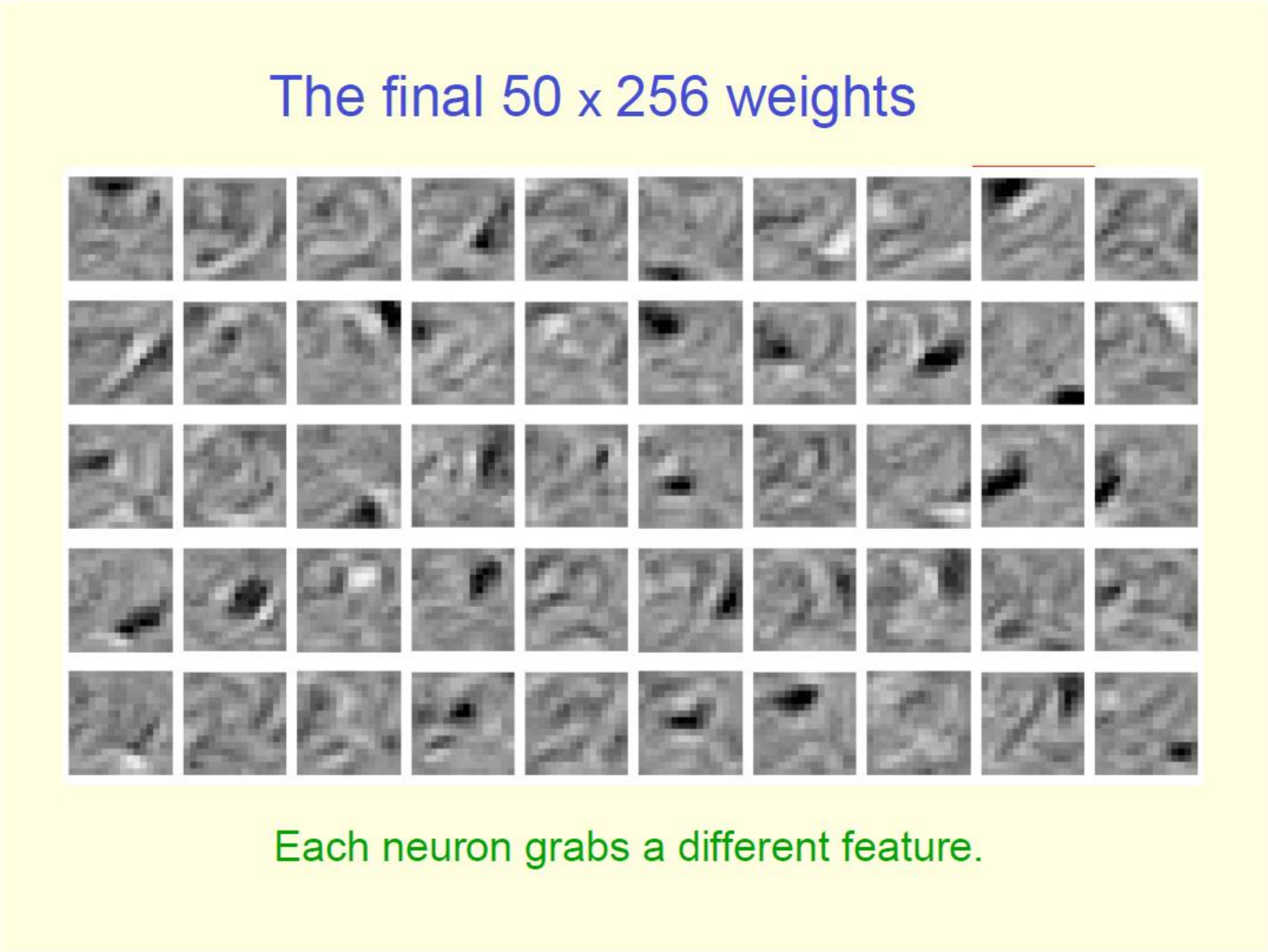
Geoffrey Hinton, “**Tutorial on Deep Belief Nets**” *2007 NIPS* (*Neural Information Processing Systems*) *Conference* https://www.cs.toronto.edu/~hinton/nipstutorial/nipstut3.pdf

Παραγωγή εικονικού δειγματικού στοιχείου από δείγμα χειρόγραφων αριθμών $16 \times 16 = 256$ pixels (features) κωδικοποιημένα με 1 bit (άσπρο – μαύρο) μέσω RBM από 50 hidden neurons (50×256 binary feature neurons)



Restricted Boltzmann Machine (RBM) (5/6)

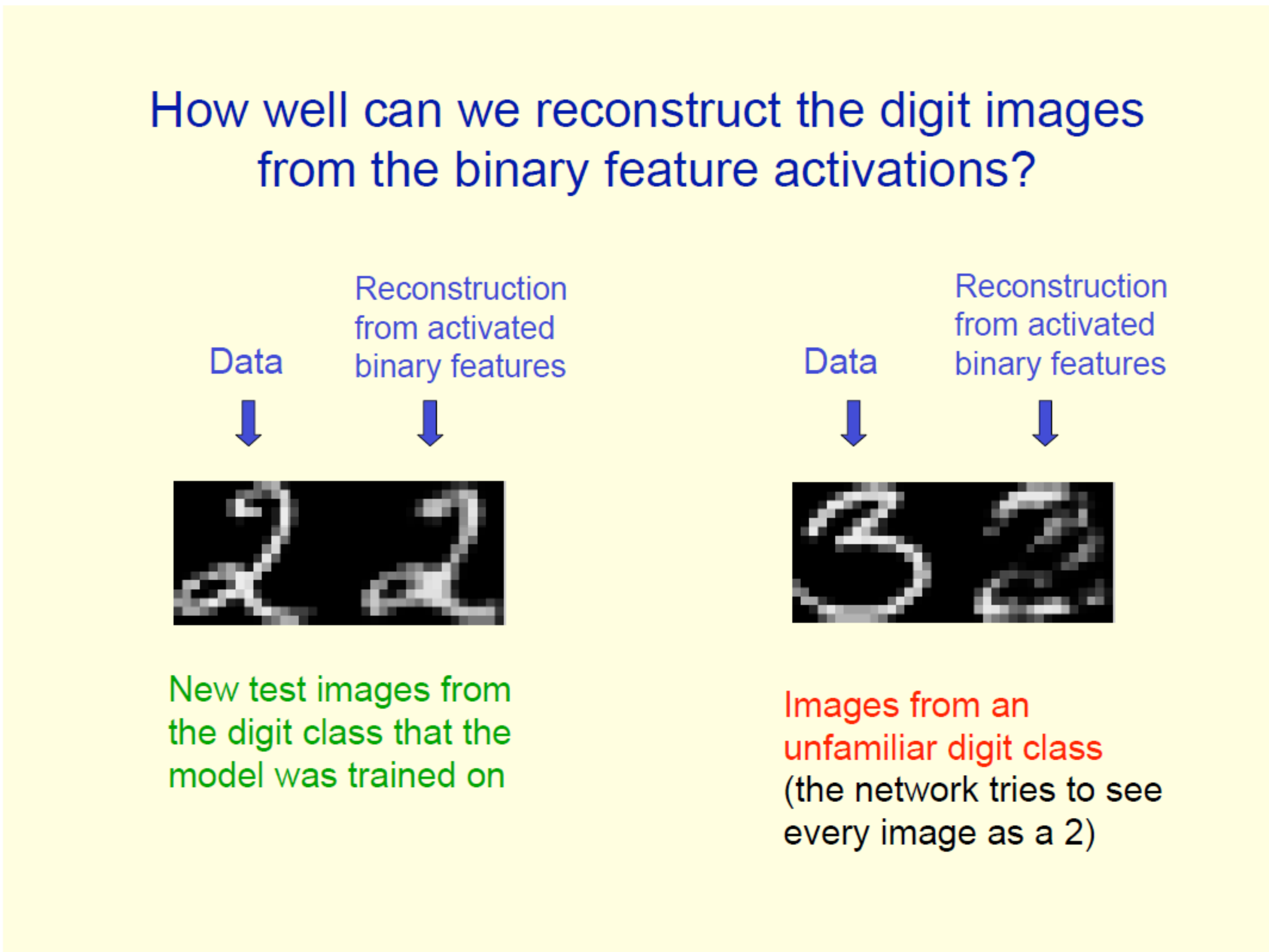
Geoffrey Hinton, "**Tutorial on Deep Belief Nets**" *2007 NIPS* (*Neural Information Processing Systems*) *Conference* https://www.cs.toronto.edu/~hinton/nipstutorial/nipstut3.pdf



Restricted Boltzmann Machine (RBM) (6/6)

Geoffrey Hinton, "**Tutorial on Deep Belief Nets**" *2007 NIPS* (*Neural Information Processing Systems*) *Conference* https://www.cs.toronto.edu/~hinton/nipstutorial/nipstut3.pdf

Προβλήματα γενίκευσης από υπεραπλούστευση διαδικασίας μάθησης: Λανθασμένη αναπαραγωγή χειρόγραφου αριθμού ***3*** από RBM με δείγμα μάθησης αποκλειστικά με χειρόγραφα στοιχεία αριθμού ***2***



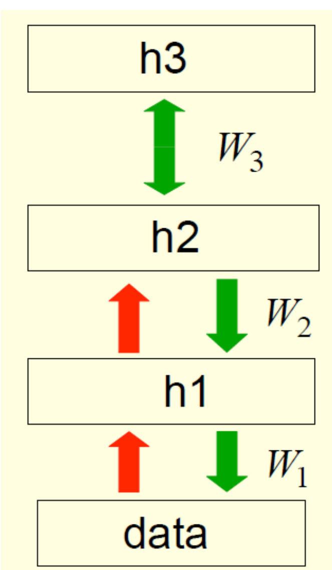
ΣΤΟΧΑΣΤΙΚΕΣ ΔΙΑΔΙΚΑΣΙΕΣ & ΒΕΛΤΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗ ΣΤΗ ΜΗΧΑΝΙΚΗ ΜΑΘΗΣΗ

Deep Belief Nets

Μάθηση των Deep Belief Nets (2007, ***Geoffrey Hinton***)

Αποτελείται από στοίβα πολλαπλών ιεραρχικών στρωμάτων συνδεόμενων νευρώνων:

1. **Ορατό Στρώμα Εισόδου** (***Visible Layer***) που αρχικά **κλειδώνει** σε δειγματικά στοιχεία μάθησης και μετά τη σύγκλιση παράγει ορατό δειγματικό στοιχείο (***generated visible state***)
2. **Ιεραρχικά Κρυφά Στρώματα** (***Hidden Layers***) που κωδικοποιούν στατιστικά χαρακτηριστικά - ***features*** (και στατιστικά χαρακτηριστικά χαρακτηριστικών – ***features of features***) που προκύπτουν από το δείγμα μάθησης (λογική **pendemonium**, 1958 ***Selfridge***)
3. **Στο σχήμα με 3 Κρυφά Στρώματα**, τα ανώτερα (**h2** & **h3**) αποτελούν ***Restricted Boltzmann Machines*** (**harmonium**) με το **h2** να παίζει ρόλο ορατού στρώματος. Τα δύο **κατώτερα** (visible **data** & **h3**) διαμορφώνουν ***Κατευθυντικό Γράφο*** (**Logistic Belief Net**)



Φάση Μάθησης (bottom-up)

- Το στρώμα data συντονίζει το h1 με βάση το training sample
- Το h1 ενεργοποιεί το RBM (h2, h3)

Φάση Παραγωγής Δείγματος (sample generation)

- Η RBM (h2, h3) παράγει δείγμα ισορροπίας Gibbs με *πολλαπλές διαδοχικές επαναλήψεις* (κύριος λόγος καθυστέρησης)

Τελική Φάση Συνολικής Ανανέωσης Καταστάσεων (top-down)

- Τα κατώτερα στρώματα h1 και data συντονίζονται με το δείγμα ισορροπίας σε μία τελική επανάληψη