ε.δε.μ²

ΕΠΙΣΤΗΜΗ ΔΕΔΟΜΕΝΩΝ & ΜΗΧΑΝΙΚΗ ΜΑΘΗΣΗ

ΣΤΟΧΑΣΤΙΚΕΣ ΔΙΕΡΓΑΣΙΕΣ & ΒΕΛΤΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗ ΣΤΗ ΜΗΧΑΝΙΚΗ ΜΑΘΗΣΗ

Μέθοδοι Μηχανικής Μάθησης & Βελτιστοποίησης μέσω Εννοιών Στατιστικής Φυσικής

1. Αλγόριθμοι Simulated Annealing
2. Gibbs Sampling
3. Μηχανή Boltzmann

καθ. Βασίλης Μάγκλαρης

maglaris@netmode.ntua.gr

www.netmode.ntua.gr

Video Conference μέσω Cisco Webex

Πέμπτη 8/4/2021

ΣΤΟΧΑΣΤΙΚΕΣ ΔΙΑΔΙΚΑΣΙΕΣ & ΒΕΛΤΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗ ΣΤΗ ΜΗΧΑΝΙΚΗ ΜΑΘΗΣΗ

Ενδεικτικές Εφαρμογές & Επεκτάσεις Αλγόριθμου Metropolis-Hastings (1/2) (*Επανάληψη*)

Ακολουθία Τυχαίου Δείγματος προς Θερμική Ισορροπία

Ο αλγόριθμος ***Metropolis*** παράγει **συσχετισμένες** καταστάσεις ***time reversible*** αλυσίδας Markov X_n με εργοδικές πιθανότητες συμβατές με κατανομή ***Gibbs*** (***Boltzmann***) χωρίς γνώση της ***partition function*** Z. Οι καταστάσεις είναι σχεδόν αδύνατο να προσδιορισθούν με πληρότητα, ιδίως αν είναι ***πολυδιάστατες***, και άρα η κανονικοποίησή τους είναι δυσεπίλυτη

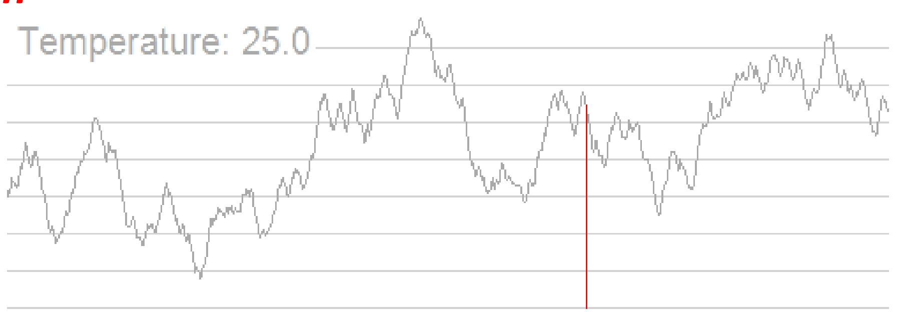
Υπολογισμοί Ολοκληρωμάτων και Στατιστικών Παραμέτρων

Η δημιουργία ακολουθίας τιμών που προσομοιώνουν ***Markov Chain Random Walks*** μπορεί να αποτελέσει εργαλείο για τον αριθμητικό υπολογισμό ολοκληρωμάτων και ροπών κατανομών ***πολυδιάστατων*** τυχαίων μεταβλητών χωρίς πλήρη στοιχεία και με λογικό αριθμό διαστάσεων

Εντοπισμός Ακραίων Τιμών, Simulated Annealing

Οι μέθοδοι MCMC παρέχουν τη δυνατότητα να μην εγκλωβισθεί μια επαναληπτική διαδικασία σε περιοχές με τοπικά άκρα αλλά επιτρέπει να διερευνηθούν με κάποια πιθανότητα και εναλλακτικές προς μη ελκυστικές κατευθύνσεις που ένας αλγόριθμος τύπου deepest descent δεν θα εντόπιζε. Αυτή είναι η αρχή αλγορίθμων τύπου ***Προσομοιωμένης Ανόπτησης*** (***Simulated Annealing***) με εφαρμογή σε περίπλοκα προβλήματα συνδυαστικής βελτιστοποίησης, π.χ. ***Travelling Salesman Problem***

ΕΥΡΕΣΗ ΣΦΑΙΡΙΚΟΥ ΑΚΡΟΥ: Ο αλγόριθμος ακολουθεί κατευθύνσεις προς το ζητούμενο σφαιρικό (*global*) άκρο (ψηλότερη κορυφή), αλλά επιτρέπει φαινομενικά *λάθος* βήματα με σταδιακά μειούμενη πιθανότητα όσο μειώνεται η «θερμοκρασία»



https://en.wikipedia.org/wiki/File:Hill_Climbing_with_Simulated_Annealing.gif

ΣΤΟΧΑΣΤΙΚΕΣ ΔΙΑΔΙΚΑΣΙΕΣ & ΒΕΛΤΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗ ΣΤΗ ΜΗΧΑΝΙΚΗ ΜΑΘΗΣΗ

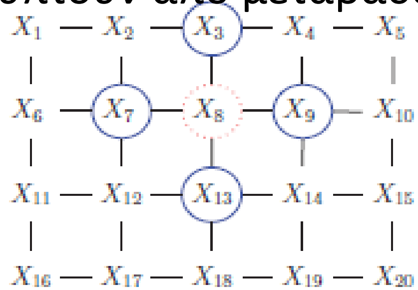
Ενδεικτικές Εφαρμογές & Επεκτάσεις Αλγόριθμου Metropolis-Hastings (2/2) (*Επανάληψη*)

Μοντέλο *Ising* – Markov Random Fields, Προσομοίωση Μεταβάσεων Φάσεων

Αφορά σε υλικά με μαγνητικά δίπολα s κατανεμημένα στις κορυφές ενός γράφου G με ακμές μεταξύ τους αν υπάρχει αμφίδρομη αλληλοεπίδραση. Κάθε δίπολο μπορεί να βρίσκεται σε δύο καταστάσεις (***spins***) $y_s \in \{-1, +1\}$. Αν $s \leftrightarrow t$ τα δίπολα s, t είναι γειτονικά και αλληλοεπιδρούν με δύναμη $J_{s,t}$ θετική (π.χ. $J_{s,t}=1$) αν τείνει να ευθυγραμμίσει τις καταστάσεις y_s και y_t ή αρνητική (π.χ. $J_{s,t}=-1$) αν τις ωθεί προς αντίθετη κατεύθυνση.

Σε ένα ***Markov Random Field*** οι καταστάσεις ενός διπόλου s μπορεί να επηρεάζονται μόνο από τα αμέσως γειτονικά του $t \in N(s) \subset G$. Αν τα δίπολα είναι κατανεμημένα σε επίπεδο δύο διαστάσεων με τοπολογία πλέγματος (***lattice***) η συνολική κατάσταση σε ισορροπία του συστήματος $\boldsymbol{y}(G) = [y_1\ y_2 \ldots y_s\ y_t \ldots]^T$ αφορά σε νόμιμους σχηματισμούς (***configurations***) των επιμέρους καταστάσεων y_s των διπόλων που προκύπτουν από μεταβάσεις με πιθανότητες $P(y_s|\boldsymbol{y}(G)) = P(y_s|\boldsymbol{y}(N(s)))$

Η κατάσταση του διπόλου X_8 εξαρτάται μόνο από τα X_3, X_7, X_9 και X_{13}



Το ***Markov Random Field*** του μοντέλου ***Ising*** ισορροπεί σε καταστάσεις $\boldsymbol{y}(G)$ με πιθανότητες κατανομής ***Gibbs*** (***Boltzmann***) με ή χωρίς εξωτερική μαγνητική επιρροή h_t στα δίπολα t :

$$P\big(\boldsymbol{y}(G)\big) = \frac{1}{Z}\exp\left(-\frac{E(\boldsymbol{y}(G))}{T}\right) \text{ με } E\big(\boldsymbol{y}(G)\big) \approx -\sum_{s\leftrightarrow t} J_{s,t} y_s y_t - \mu \sum_t h_t y_t$$

Αν $J_{s,t}= J$ για όλα τα γειτονικά ζεύγη $s \leftrightarrow t$ τότε $E\big(\boldsymbol{y}(G)\big) \approx -J\sum_{s\leftrightarrow t} y_s y_t - \mu \sum_t h_t y_t$

Η σύγκλιση σε καταστάσεις ισορροπίας και η σταθερά Z μπορούν να προσεγγισθούν με αλγόριθμο random walk ***Metropolis-Hastings***

ΣΤΟΧΑΣΤΙΚΕΣ ΔΙΑΔΙΚΑΣΙΕΣ & ΒΕΛΤΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗ ΣΤΗ ΜΗΧΑΝΙΚΗ ΜΑΘΗΣΗ

Αντιστοίχιση Εννοιών Στατιστικής Φυσικής – Συνδυαστικής Βελτιστοποίησης

Οι διαδικασίες ***Simulated Annealing*** και τα ***Random Markov Fields*** – ***Ising Model*** έχουν εμπνεύσει αλγορίθμους Συνδυαστικής Βελτιστοποίησης κατ’ αναλογία εννοιών Στατιστικής Φυσικής (π.χ. μεταβάσεις καταστάσεων σε θερμική ισορροπία ***Gibbs/Boltzmann*** όπως αυτές εξελίσσονται σε προσομοιώσεις Monte Carlo αλυσίδων Markov τύπου ***Metropolis-Hastings***)

Κοινά Χαρακτηριστικά

- Ζητείται ο εντοπισμός δύστροπων πολυδιάστατων καταστάσεων ισορροπίας ελαχίστου ***Κόστους*** ή ***Ενέργειας***, προς τις οποίες συγκλίνει ένα μοντέλο στοχαστικών μεταβάσεων. Η σύγκλιση μπορεί να υποβοηθείται από παραμέτρους ελέγχου (***Bias*** σε συστήματα Μηχανικής Μάθησης - Νευρωνικά Δίκτυα ή ***Θερμοκρασία*** σε Φυσικά Συστήματα)
- Οι αλγόριθμοι βελτιστοποίησης δεν προχωρούν μονοσήμαντα προς βήματα ελάττωσης του κόστους (ή αύξησης της ανταμοιβής - reward) αλλά δημιουργούν τυχαίες ακολουθίες Markov (***Random Walk Samples***) που επισκέπτονται μεγάλο εύρος πιθανών καταστάσεων ώστε να μην εγκλωβίζεται η αναζήτηση σε κάποιο ***τοπικό ελάχιστο κόστος*** (ή μέγιστη ανταμοιβή)

TABLE 11.1 Correspondence between Statistical Physics and Combinatorial Optimization

Statistical physics	Combinatorial optimization
Sample	Problem instance
State (configuration)	Configuration
Energy	Cost function
Temperature	Control parameter
Ground-state energy	Minimal cost
Ground-state configuration	Optimal configuration

Προσομοιωμένη Ανόπτηση - Simulated Annealing (1/2)

Αρχική Θερμοδυναμική Προσέγγιση

Μελέτη φυσικού συστήματος πολλών σωματιδίων: Σύγκλιση αλυσίδας Markov σε κατάσταση ισορροπίας χαμηλής θερμοκρασίας T

- Το σύστημα συγκλίνει στις πιθανότητες ***Gibbs*** $p_i = \frac{1}{Z}\exp\left(-\frac{E_i}{T}\right)$ όταν $T \to 0$ με τις καταστάσεις χαμηλής ενέργειας να έχουν τις μεγαλύτερες πιθανότητες

Ο αλγόριθμος ***Metropolis*** εντοπίζει καταστάσεις ισορροπίας με γρήγορη σύγκλιση για υψηλές θερμοκρασίες T αλλά με εξαιρετική βραδύτητα σε χαμηλές T εξού και η τροποποίηση του με την τεχνική ***Simulated Annealing*** που περιλαμβάνει δύο συστατικά:

- Πρόγραμμα μείωσης της θερμοκρασίας (***cooling schedule***) προς την ζητούμενη χαμηλή τιμή της $T \to 0$ μέσω επαναλήψεων $T_{0,} T_1, \dots, T_k, \dots, T$ με συνεχώς μειούμενα άλματα (π.χ. $T_k = \alpha T_{k-1}, 0.8 < \alpha < 0.99$)
- Προσδιορισμός καταστάσεων ισορροπίας με τον αλγόριθμος ***Metropolis*** αρχικά για υψηλή T_0 που να επιτρέπει μεγάλο εύρος μεταβάσεων και λογικό αριθμό διαδοχικών επαναλήψεων (π.χ. 10 μεταβάσεις καταστάσεως) σε χαμηλότερες $T_k \to T_{k+1}$ με αρχικοποίηση στην κατάσταση που οδηγήθηκε το σύστημα στην προηγούμενη θερμοκρασία T_k

Ο αλγόριθμος ***Simulated Annealing*** μπορεί να εγκλωβισθεί σε **πολλαπλά τοπικά ελάχιστα**. Η σύγκλιση στο σφαιρικό ελάχιστο (***global minimum***) δεν είναι εγγυημένη για ρεαλιστικά προγράμματα μείωσης της θερμοκρασίας

Προσομοιωμένη Ανόπτηση - Simulated Annealing (2/2)

Εφαρμογή σε Συνδυαστική Βελτιστοποίηση (Combinatorial Optimization)

Η ανίχνευση θερμοδυναμικής ισορροπίας σε χαμηλές θερμοκρασίες μεταφράζεται σε ανεύρεση κατάστασης ελάχιστου κόστους σε προβλήματα **Συνδυαστικής Βελτιστοποίησης** περίπλοκων προβλημάτων με πολλαπλά τοπικά ελάχιστα και μεγάλο αριθμό καταστάσεων

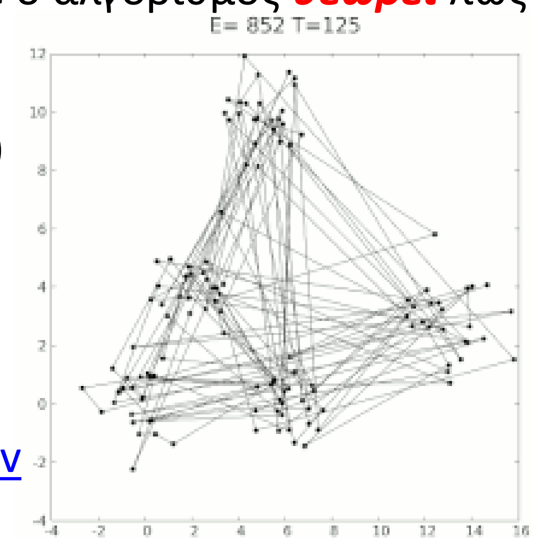
- Οι ενέργειες των καταστάσεων E_i αντιστοιχούν με το αριθμητικό κόστος των διακριτών καταστάσεων. Η θερμοκρασίας T είναι παράμετρος εξωτερικού ελέγχου μεταβάσεων του συστήματος και ξεκινά με υψηλή αρχική τιμή και μειώνεται $T \to \alpha T$ με βήμα (υπερπαράμετρο - ***hyperparameter***) $\alpha,\ 0 < \alpha < 1$ μέχρι $T \cong 0$
- Σε κάθε διαδοχική μείωση της T ο αλγόριθμος ***Metropolis*** εκκινεί από την προηγούμενη τελική κατάσταση προς νέα ισορροπία με πιθανότητες ***Gibbs*** $p_i = \frac{1}{Z}\exp\left(-\frac{E_i}{T}\right)$ για E_i και T. Η αποδοχή μεταβάσεων $i \to j$ προς γειτονικές καταστάσεις υψηλότερου κόστους $E_j > E_i$ με μη μηδενική πιθανότητα $\exp(-\frac{E_j - E_i}{T})$, αποτρέπει τον εγκλωβισμό σε **τοπικά ελάχιστα**. Η πιθανότητα αυτή μειώνεται όσο χαμηλώνει η T προς $T = 0$ οπότε ο αλγόριθμος ***θεωρεί*** πως βρήκε το **γενικό ελάχιστο** και σταματά

Traveling Salesman Problem

(Διάσημο ***NP-Complete*** πρόβλημα Συνδυαστικής Βελτιστοποίησης)

Δίνεται γράφος με $N = 125$ σημεία (πόλεις) με κόστος c_{ij} μεταξύ σημείων (κόμβων) i και j. Ζητείται η βέλτιστη διαδρομή ελαχίστου κόστους επίσκεψης ενός περιπλανώμενου πωλητή (***Traveling Salesman***) σε όλα τα σημεία μόνο μία φορά

https://en.wikipedia.org/wiki/File:Travelling_salesman_problem_solved_with_simulated_annealing.gif



ΣΤΟΧΑΣΤΙΚΕΣ ΔΙΑΔΙΚΑΣΙΕΣ & ΒΕΛΤΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗ ΣΤΗ ΜΗΧΑΝΙΚΗ ΜΑΘΗΣΗ

Δειγματοληψία Gibbs (1/2)

- Παράγει μια ακολουθία τυχαίων στοιχείων δείγματος **πολλών διαστάσεων** μέσω προσομοίωσης ***Monte Carlo*** αλυσίδας ***Markov*** **διανυσματικών** καταστάσεων πολλών μεταβλητών με εργοδικές πιθανότητες κατανομής ***Gibbs***. Τα παραγόμενα τυχαία στοιχεία δεν είναι ανεξάρτητα (συσχετίσεις λόγω μεταβάσεων ***Markov***)
- Αποτελεί παραλλαγή του αλγόριθμου ***Metropolis*** με επαναλήψεις (βήματα) που οδηγούν σε καταστάσεις χαμηλότερης ενέργειας, αλλά επιτρέπονται και αντίθετες μεταβάσεις με κάποια φθίνουσα πιθανότητα
- Κάθε επανάληψη περιλαμβάνει διαδοχικές μεταβάσεις για κάθε συνιστώσα του διανυσματικού δείγματος. Οι πιθανότητες μετάβασης ανά συνιστώσα εξαρτώνται από τις παρούσες τιμές όλων των συνιστωσών **πλην της παρούσας τιμής της ίδιας συνιστώσας** και δεν είναι χρονοσταθερές. Οι παρούσες τιμές περιλαμβάνουν νέες τιμές άλλων συνιστωσών όπως ανανεώθηκαν στη παρούσα επανάληψη πριν από την υπό μετάβαση συνιστώσα
- Συγκλίνει προς καταστάσεις ισορροπίας ***Gibbs***, επιτρέποντας εκτιμήσεις συνδυασμένων (***joint***) και οριακών (***marginal***) εργοδικών πιθανοτήτων καταστάσεων
- **Εφαρμογές** (με την υπόθεση τυχαίων δειγμάτων κατανομής ***Gibbs***)
  - Δημιουργία με προσομοίωση ***Monte Carlo*** διανυσματικού δείγματος κατανομής ***Gibbs***
  - Συμπλήρωση διανυσματικών δεδομένων με μη παρατηρήσιμες ή παραμορφωμένες συνιστώσες (***hidden variables*** σε Νευρωνικά Δίκτυα με κρυφούς νευρώνες, ***Deep Neural Networks***)
  - Προσέγγιση συνάρτησης εξαρτώμενης από μια μόνο μεταβλητή, π.χ. μέση τιμή μιας συνιστώσας διανυσματικού δείγματος κατανομής ***Gibbs***

Δειγματοληψία Gibbs (2/2)

- Ορισμός τυχαίου διανύσματος με K συνιστώσες στο βήμα (επανάληψη) n:

$$\mathbf{X}(n) = [X_1(n)\ X_2(n)\ \ldots\ X_K(n)]^{\mathrm{T}}$$

- Οι διανυσματικές τιμές των τυχαίων μεταβλητών $\mathbf{X}(n)$ ορίζουν καταστάσεις :

$$\mathbf{x}(n) = [x_1(n)\ x_2(n)\ \ldots\ x_K(n)]^{\mathrm{T}}$$

Αλγόριθμος (*Stuart* & *Donald Geman*, 1984)

$n = 0$: Αυθαίρετη αρχικοποίηση $\mathbf{x}(0) = [x_1(0)\ x_2(0)\ \ldots\ x_K(0)]^{\mathrm{T}}$

$n \to n + 1$: Κατά σειρά για $i = 1, \ldots, K$ δημιουργείται νέα τιμή $x_i(n+1)$ της συνιστώσας i της $X_i(n+1)$ με ψευτο-τυχαίο τρόπο βάση της υπό συνθήκη πιθανότητας

$$P[X_i(n+1) | \{x_1(n+1)\ \ldots\ x_{i-1}(n+1)\ x_{i+1}(n)\ \ldots\ x_K(n)\}]$$

Η συνθήκη περιλαμβάνει τις τιμές των άλλων συνιστωσών όπως έχουν ορισθεί μέχρι το στάδιο αυτό και **δεν** περιλαμβάνει την τιμή της συνιστώσας $X_i(n)$

Η ακολουθία των δειγμάτων $x_i(n)$, $i = 1, \ldots, K$ σηματοδοτεί αλυσίδα ***Markov*** που συγκλίνει (γεωμετρικά) προς καταστάσεις θερμικής ισορροπίας $\mathbf{x} = [x_1\ x_2\ \ldots\ x_K]$ με οριακές (**marginal**) πιθανότητες

$$\lim_{n\to\infty} P(X_i(n) = x_i(n) | x_i(0)) = P(X_i = x_i)$$

και με συνδυασμένες (**joint**) πιθανότητες ***Gibbs***

$$\lim_{n\to\infty} P(\mathbf{X}_n = \mathbf{x}_n) = P(X_1 = x_1, \ldots, X_K = x_K) = P(\mathbf{X} = \mathbf{x}) = \frac{1}{Z}\exp\left(-\frac{E(\mathbf{x})}{T}\right)$$

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

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

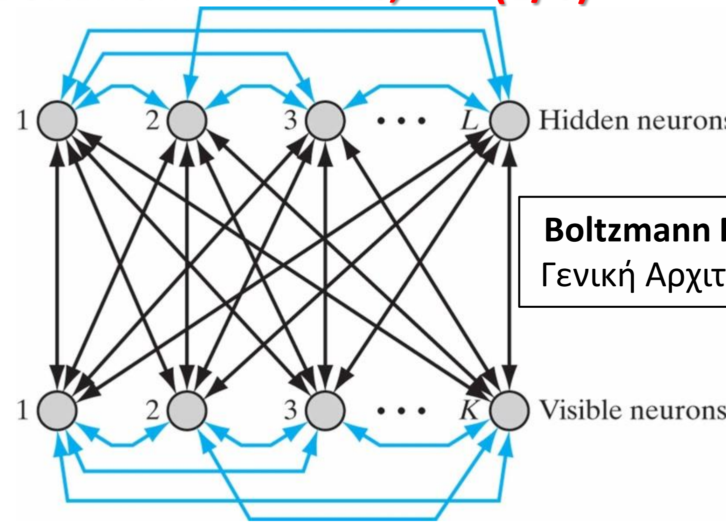
Στόχος η προσέγγιση **ελλειμματικού** διανύσματος εισόδου (π.χ. ***pattern completion*** εικόνων) μέσω δημιουργίας διανύσματος εξόδου, στατιστικά συμβατού με ***unlabeled*** δείγμα μάθησης

Εξέλιξη του δικτύου ***Hopfield*** με δυαδικές καταστάσεις και αναδρομικές συμμετρικές **στοχαστικές** συνάψεις (***Stochastic Recurrent Networks with Hidden Nodes***) που συγκλίνει σε ***Markov Random Field*** κατά το ***Ising Model***.

Μια ***Boltzmann Machine*** (**BM**) περιλαμβάνει:

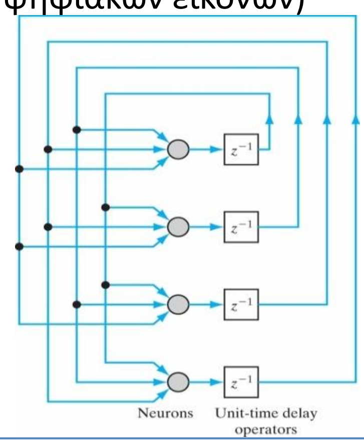
- Δύο διακριτά στρώματα K **Visible** και L **Hidden Neurons** με **δυαδικές καταστάσεις** ± 1
- **Συμμετρικές Συνάψεις** $w_{ij} = w_{ji}, w_{ii} = 0$ εν δυνάμει μεταξύ όλων των νευρώνων της **BM**

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** εισάγεται σε υποσύνολο των ***Visible Nodes***, η **BM** εκτιμά το **πλήρες στοιχείο**



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)

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 ***hyperparameter*** $L \gg K$ 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 (;)

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

Ορισμοί

- **Κατάσταση Δικτύου**: Τυχαίο Διάνυσμά $\mathbf{X} \rightarrow \mathbf{x} = [x_1\ x_2\ \dots\ x_K\ \dots\ x_m]^{\mathrm{T}}, m = L + K$
  $x_i \in \{-1,1\} \triangleq \{OFF, ON\}$ όπου x_i η κατάσταση του ***στοχαστικού*** 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 ΒΜ**: $E(\mathbf{x}) \triangleq -\frac{1}{2}\sum_i \sum_{j\neq i} w_{ji} x_i x_j$ 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/Boltzmann***

- **Κατάσταση των K Ορατών Νευρώνων**: $\mathbf{X}_\alpha \rightarrow \mathbf{x}_\alpha = [x_1\ x_2\ \dots\ x_K\ \dots\ x_K]^{\mathrm{T}}$
  Η κατάσταση του ορατού νευρώνα i αντιστοιχεί σε δυαδικό χαρακτηριστικό (***feature***) του στοιχείου εισόδου/εξόδου i με πιθανότητα να είναι ON ίση με $P(x_i = 1)$

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

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

Για τυχαίο στοιχείο $\begin{bmatrix} X_1 = x_1 & X_2 = x_2 & \dots & X_j = x_j & \dots & X_m = x_m \end{bmatrix}^{\mathrm{T}}$ ορίζουμε τα ***events***

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

και το C σαν ***joint event*** των A, B: $(X_1 = x_1, \ \dots, X_j = x_j, \ \dots, X_m = x_m)$

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**:

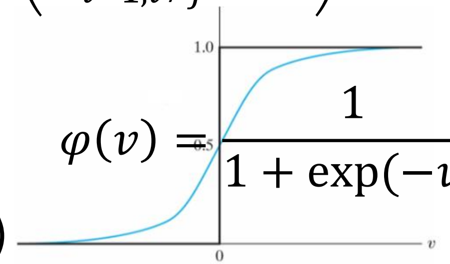
Δεδομένου ότι x_i, x_j παίρνουν τις τιμές ± 1 η υπό συνθήκη πιθανότητα $P(A|B)$ απλοποιείται:

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

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

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

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



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

ΣΤΟΧΑΣΤΙΚΕΣ ΔΙΑΔΙΚΑΣΙΕΣ & ΒΕΛΤΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗ ΣΤΗ ΜΗΧΑΝΙΚΗ ΜΑΘΗΣΗ

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

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 $\mathcal{T}$
- **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 $\mathcal{T}$, μπορούμε να θεωρήσουμε ότι οι καταστάσεις $\mathbf{X}_\alpha$είναι ***ανεξάρτητα*** τυχαία διανύσματα και η συνολική τους πιθανότητα δίνεται από το ***παραγοντικό γινόμενο*** $\prod_{\mathbf{x}_\alpha \in \mathcal{T}} P(\mathbf{X}_\alpha = \mathbf{x}_\alpha)$

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

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

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)

Κανόνας Μάθησης Boltzmann

Εφαρμογή κριτηρίου Maximum Likelihood ή Log Likelihood (συνέχεια)

Προκύπτει επομένως για τον λογάριθμο του παραγοντικού γινομένου

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

Παραγωγίζοντας ως προς τα συναπτικά βάρη w_{ji} έχουμε

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

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*** με σταθερό βήμα (***hyperparameter***) $\boldsymbol{\epsilon}$:

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

Η ***learning rate*** $\eta = \frac{\boldsymbol{\epsilon}}{T}$ 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 ⇒ ***ΑΝΑΓΚΗ ΑΠΛΟΠΟΙΗΣΗΣ ΔΙΚΤΥΟΥ***