

# 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](mailto:maglaris@netmode.ntua.gr)

[www.netmode.ntua.gr](http://www.netmode.ntua.gr)

Video Conference μέσω Cisco Webex

Πέμπτη 15/4/2021

# ΣΤΟΧΑΣΤΙΚΕΣ ΔΙΑΔΙΚΑΣΙΕΣ & ΒΕΛΤΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗ ΣΤΗ ΜΗΧΑΝΙΚΗ ΜΑΘΗΣΗ

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

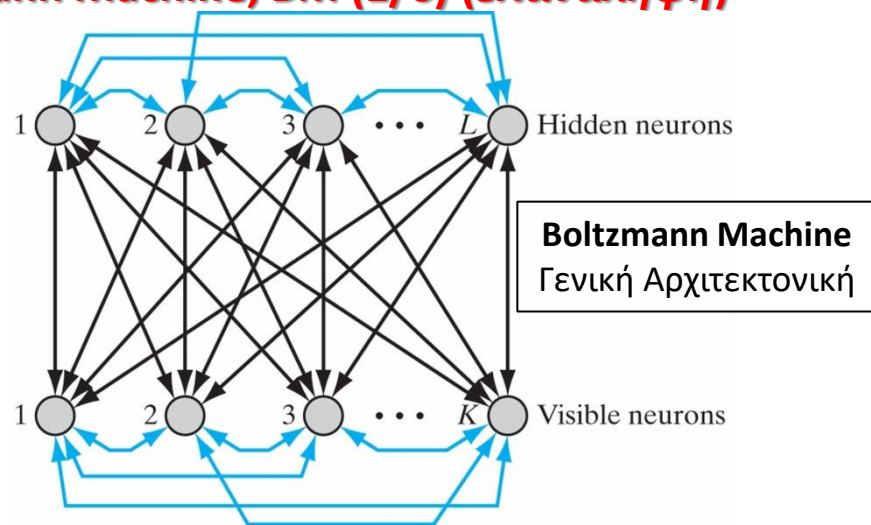
(1985, *Geoffrey Hinton & Terry Sejnowski*)

Στόχος η προσέγγιση ελλειμματικού διανύσματος εισόδου (π.χ. *pattern completion* εικόνων) μέσω δημιουργίας διανύσματος εξόδου, στατιστικά συμβατού με *unlabeled* δείγμα μάθησης. Αποτελεί εξέλιξη του δικτύου *Hopfield* με δυαδικές **στοχαστικές** καταστάσεις και αναδρομικές συμμετρικές συνάψεις (*Stochastic Recurrent Networks with Hidden Nodes*) που συγκλίνει μέσω μη επιβλεπόμενης μάθησης σε *Markov Random Field* κατά το *Ising Model*.

Μια *Boltzmann Machine* (BM) περιλαμβάνει:

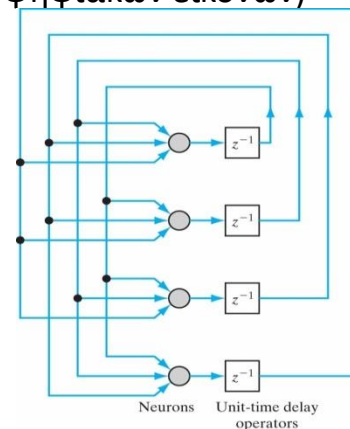
- Δύο διακριτά στρώματα  $K$  **Visible** και  $L$  **Hidden Neurons** με δυαδικές καταστάσεις  $\pm 1$
- Συμμετρικές Συνάψεις  $w_{ij} = w_{ji}$ ,  $w_{ii} = 0$  εν δυνάμει μεταξύ όλων των νευρώνων της BM

Αρχικά το **δείγμα μάθησης** εισάγεται στα **Visible Nodes** και μέσω **gradient ascent** προσδιορίζονται συναπτικά βάρη και καταστάσεις  **όλων**  των νευρώνων (**Visible & Hidden**). Δειγματικό στοιχείο **test** εισάγεται στα **Visible Nodes** και η BM το αναπαράγει σύμφωνα με τις στατιστικές ιδιότητες ισορροπίας του **δείγματος μάθησης**



### 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)



### 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 (;)

# ΣΤΟΧΑΣΤΙΚΕΣ ΔΙΑΔΙΚΑΣΙΕΣ & ΒΕΛΤΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗ ΣΤΗ ΜΗΧΑΝΙΚΗ ΜΑΘΗΣΗ

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

### Ορισμοί

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

<https://www.cs.toronto.edu/~hinton/csc321/readings/boltz321.pdf>

<https://youtu.be/5jaBneYd5lg>

# ΣΤΟΧΑΣΤΙΚΕΣ ΔΙΑΔΙΚΑΣΙΕΣ & ΒΕΛΤΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗ ΣΤΗ ΜΗΧΑΝΙΚΗ ΜΑΘΗΣΗ

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

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

Για τυχαίο στοιχείο  $[X_1 = x_1 \ X_2 = x_2 \ \dots \ X_j = x_j \ \dots \ X_m = x_m]^T$  ορίζουμε τα **events**

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

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**:

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

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

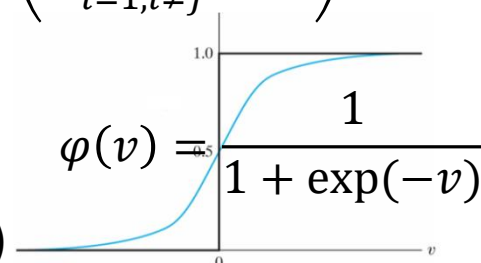
- Υπό Συνθήκη Πιθανότητες Μεταβάσεων:

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

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

$P(X_j = x | \{X_1 = x_1, \dots, X_{j-1} = x_{j-1}, X_{j+1} = x_{j+1}, \dots, X_m = x_m\}) = \varphi \left( \frac{x}{T} \sum_{i=1, i \neq j}^m w_{ji} x_i \right)$   
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  $\mathbf{x}(n) \rightarrow \mathbf{x}(n+1)$  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) (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 των ορατών νευρώνων στα δειγματικά στοιχεία μάθησης του περιβάλλοντος  $\mathcal{J}$
- **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  $\mathcal{J}$ , μπορούμε να θεωρήσουμε ότι οι καταστάσεις  $\mathbf{X}_\alpha$  είναι **ανεξάρτητα** τυχαία διανύσματα και η συνολική τους πιθανότητα δίνεται από το **παραγοντικό γινόμενο**  $\prod_{\mathbf{x}_\alpha \in \mathcal{J}} P(\mathbf{X}_\alpha = \mathbf{x}_\alpha)$

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

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

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  $\mathbf{x}_\alpha$ :

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

Εφαρμογή κριτηρίου Maximum Likelihood ή Log Likelihood (συνέχεια)

Προκύπτει επομένως για τον λογάριθμο του παραγοντικού γινομένου

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

Παραγωγίζοντας ως προς τα συναπτικά βάρη  $w_{ji}$  έχουμε

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

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

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

Η **learning rate**  $\eta = \frac{\epsilon}{T}$  μεταβάλλεται σε διαδοχικές επαναλήψεις **Simulated Annealing** αντιστρόφως ανάλογα με τη μειούμενη  $T$ . 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 στατιστικά χαρακτηριστικά συγκεκριμένων εφαρμογών ταξινόμησης δεδομένων

**Παράδειγμα:**  $x \in \{1,2\}, y \in \{0,1\}$  ([https://en.wikipedia.org/wiki/Generative\\_model](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

⇒

$P(y x)$	$y = 0$	$y = 1$
$x = 1$	<b>1</b>	0
$x = 2$	2/6	<b>4/6</b>

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

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)

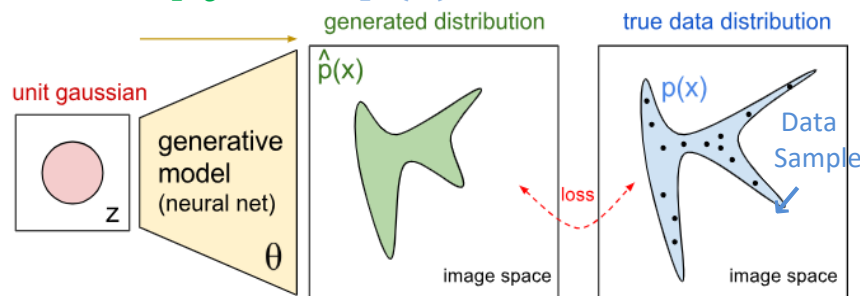
<https://openai.com/blog/generative-models/>

$p(x)$ : Κατανομή των στοιχείων του δείγματος μάθησης (**Training Sample**)  $\{x_1, x_2, \dots, x_n\}$

$\hat{p}_\theta(x)$ : Κατανομή των εικονικών στοιχείων του παραγόμενου δείγματος (**Generated Sample**)

στην έξοδο νευρωνικού δικτύου παραμέτρων  $\theta$  με αυθαίρετο δείγμα εισόδου, π.χ. 100 τυχαίοι αριθμοί με κανονική κατανομή, **Gaussian Sample Z**

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



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

- **Kullback-Leibler (KL) Divergence** (Απόκλιση):

$$D_{KL}(P||Q) = \sum_{x \in \mathcal{X}} P(x) \log \frac{Q(x)}{P(x)}$$

(εφαρμόζεται σε **Boltzmann Machine**)

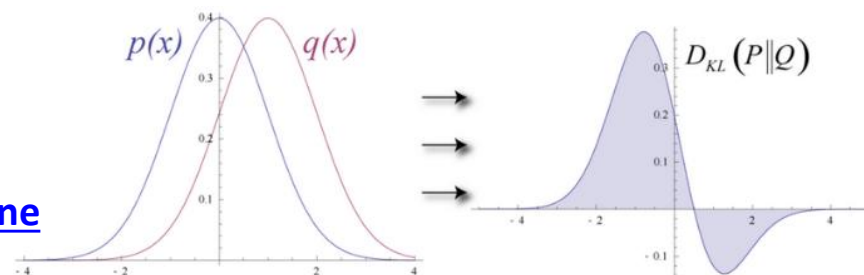
<https://skymind.ai/wiki/restricted-boltzmann-machine>

- **Expectation-Maximization (EM) Algorithm** :

Επαναλήψεις δύο σταδίων για προσδιορισμό λανθανουσών (**latent**) παραμέτρων:

(π.χ. προσδιορισμός ποσοστών μείξης τυχαίων μεταβλητών από 2 ανεξάρτητα δείγματα Gauss)

[https://en.wikipedia.org/wiki/Expectation%E2%80%93maximization\\_algorithm](https://en.wikipedia.org/wiki/Expectation%E2%80%93maximization_algorithm)

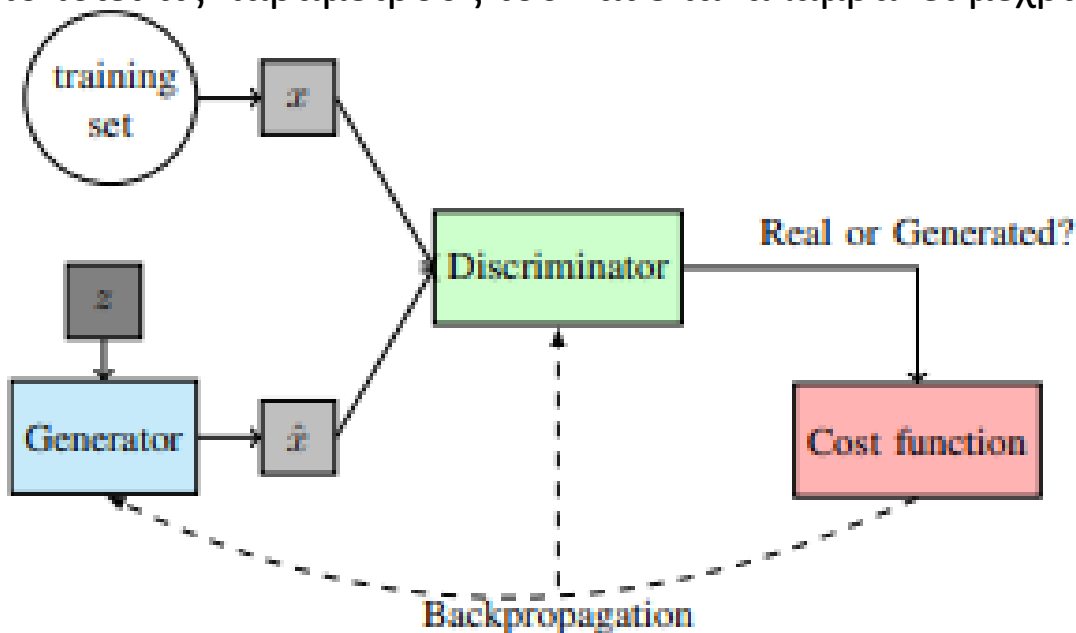


### Generative Adversarial Networks - GAN (2010 *Olli Niemitalo*, 2014 *Ian Goodfellow*)

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 μάθηση* 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, ....

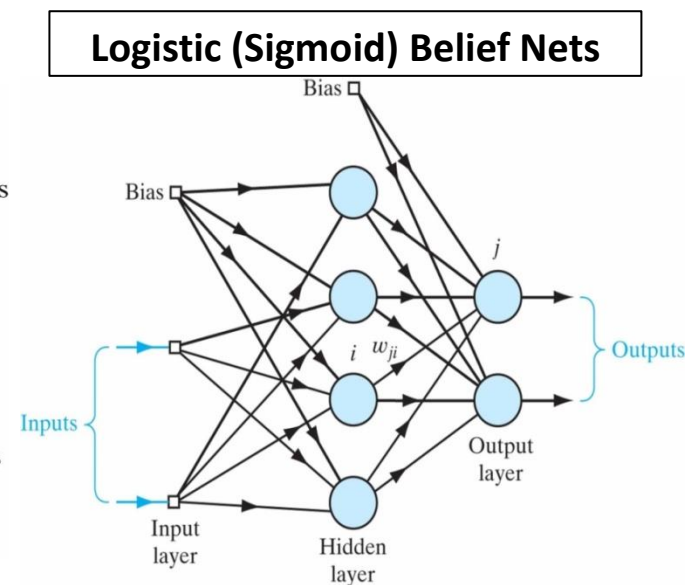
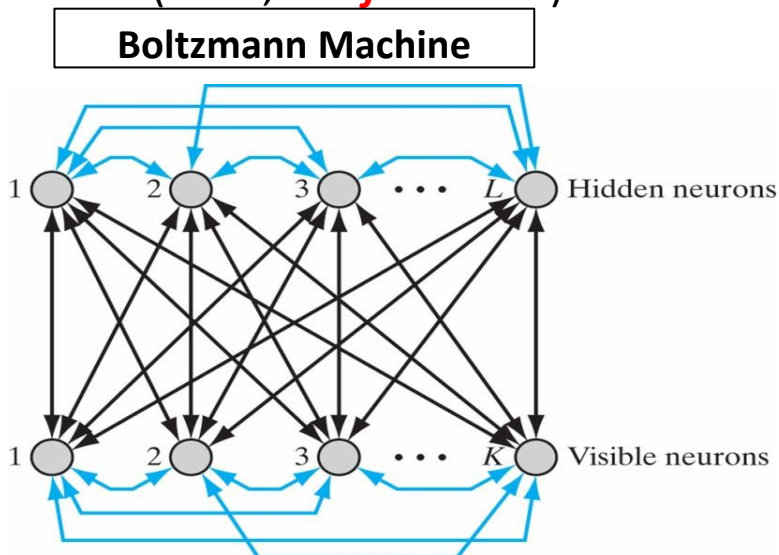
# ΣΤΟΧΑΣΤΙΚΕΣ ΔΙΑΔΙΚΑΣΙΕΣ & ΒΕΛΤΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗ ΣΤΗ ΜΗΧΑΝΙΚΗ ΜΑΘΗΣΗ

## 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 (**inference**) μη παρατηρήσιμων (**latent**) συνιστωσών κατάστασης, (2) Παραγωγή (**generation**) εικονικών δεδομένων με κατανομή όμοια κατά **Kullback-Leibler (KL)** με την κατανομή του δείγματος μάθησης. Τα δειγματικά στοιχεία μάθησης θεωρούνται **ανεξάρτητα τυχαία διανύσματα**
- Συμμετρική Διασύνδεση δυαδικών στοχαστικών νευρώνων  $\Rightarrow$  **Boltzmann Machine** (1983, **Geoffrey Hinton & Terry Sejnowski**)
- Κατευθυντική Ακυκλική Διασύνδεση σε γράφο δυαδικών στοχαστικών νευρώνων  $\Rightarrow$  **Logistic (Sigmoid) Belief Nets** (1992, **Radford Neal**)



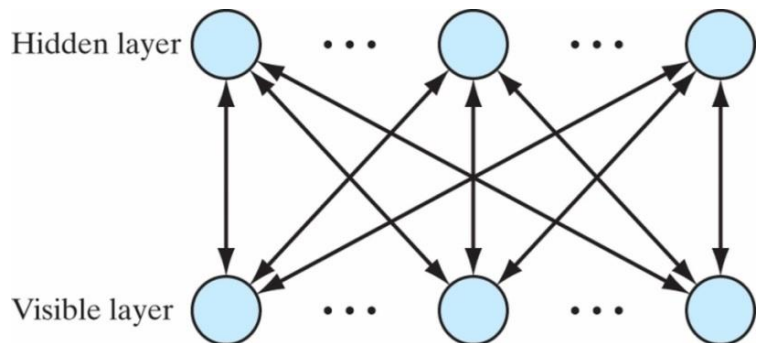
Δυσκολίες μάθησης (ρύθμιση συνάψεων κρυφών επιπέδων), αργή σύγκλιση

# ΣΤΟΧΑΣΤΙΚΕΣ ΔΙΑΔΙΚΑΣΙΕΣ & ΒΕΛΤΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗ ΣΤΗ ΜΗΧΑΝΙΚΗ ΜΑΘΗΣΗ

## Restricted Boltzmann Machine (RBM) (1/7)

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

- Στοχαστικοί νευρώνες 2 επιπέδων (**ορατό, κρυφό**), συμμετρικές συνάψεις, καταστάσεις  $\{0,1\}$
- Οι καταστάσεις των ορατών νευρώνων  $v_i$  κωδικοποιούν παρατηρήσιμα χαρακτηριστικά (*observable features*) δείγματος εισόδου/εξόδου, ενώ του κρυφού επίπεδου  $h_j$  κωδικοποιούν κρυφές ιδιότητες (*latent features*)
- Νευρώνες του ίδιου επιπέδου: **Ασύνδετοι** ⇒ Οι καταστάσεις κρυφών νευρώνων είναι **ανεξάρτητες** τυχαίες μεταβλητές υπό την συνθήκη των καταστάσεων των ορατών νευρώνων
- Συνάρτηση ενεργοποίησης νευρώνων: Σιγμοειδής (*logistic*) συνάρτηση  $\varphi(v) = \frac{1}{1+\exp(-v)}$
- Στη παράμετρο ενεργοποίησης  $v$  αθροίζονται οι καταστάσεις των συνδεδεμένων νευρώνων με συναπτικά βάρη  $w_{ij} = w_{ji}$  καθώς και εξωτερικοί παράγοντες *bias*:  $a_i$  για τους ορατούς νευρώνες και  $b_j$  για τους κρυφούς
- Ξεκινώντας από κάθε δειγματικό στοιχείο μάθησης  $\in \mathcal{T}$  οι καταστάσεις των νευρώνων οδηγούνται σε ισορροπία σε επαναλαμβανόμενα διπλά *βήματα τυχαίας δειγματοληψίας Gibbs*  $t = 0, 1, 2, \dots, k$ . Κάθε βήμα περιλαμβάνει: (1) τη παραγωγή τιμών από **όλα** τα visible neurons → hidden neurons σε πρώτο πέρασμα και (2) σε δεύτερο πέρασμα από **όλα** τα hidden neurons → visible neurons



### Πλεονέκτημα RBM από Boltzmann Machine

Η μη διασύνδεση μεταξύ νευρώνων του ίδιου επιπέδου επιταχύνει τη παραγωγή δείγματος με στατιστική ομοιότητα σε δεδομένα μάθησης όπως κλειδώνονται στους ορατούς νευρώνες

## Restricted Boltzmann Machine (RBM) (2/7)

### Αλγόριθμος μάθησης σε RBM – Contrastive Divergence (Αντιφατική Απόκλιση)

(2002, *Geoffrey Hinton*)

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

Συνιστώσα  $v_i \in \{1,0\}$  του  $\mathbf{x}_\alpha^{(t)}$ : Κατάσταση **ορατού** (*visible*) νευρώνα  $i$  στο βήμα  $t$

Συνιστώσα  $h_j \in \{1,0\}$  του  $\mathbf{x}_\beta^{(t)}$ : Κατάσταση **κρυφού** (*hidden*) νευρώνα  $j$  στο βήμα  $t$

**Ζητούμενο**: Προσδιορισμός Συναπτικών Βαρών  $w_{ij} = w_{ji}$  μεταξύ ορατών και κρυφών

νευρώνων ώστε στη σύγκλιση ( $t \rightarrow \infty$ ) να δημιουργηθούν καταστάσεις  $v_i$  του  $\mathbf{x}_\alpha^{(t)}$  με κατανομή όμοια κατά **Kullback-Leibler (KL)** με αυτή του δείγματος μάθησης  $\mathbf{x}_\alpha^{(0)} \in \mathcal{T}$

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

**Αλγόριθμος**: Για κάθε στοιχείο  $\mathbf{x}_\alpha^{(0)}$  του δείγματος μάθησης επαναλαμβάνεται σε βήματα

$t = 1, 2, 3 \dots k$  η διπλή παραγωγή διανυσμάτων καταστάσεων  $\mathbf{x}_\alpha^{(t)}, \mathbf{x}_\beta^{(t)}$

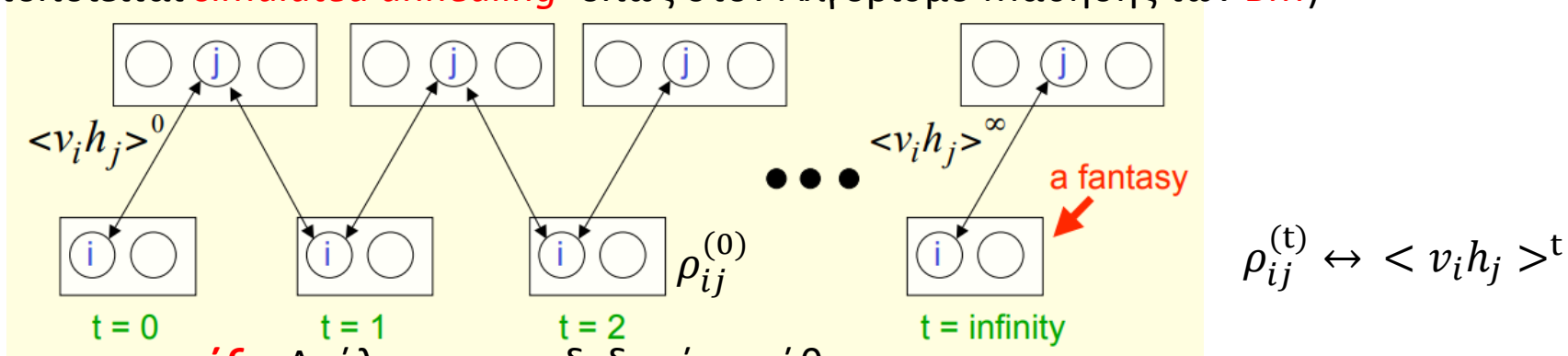
- Εκκίνηση  $t = 0$  με κλείδωμα των καταστάσεων των ορατών νευρώνων  $v_i$  σε **δειγματικό στοιχείο μάθησης**  $\mathbf{x}_\alpha^{(0)} \in \mathcal{T}$  και παραγωγή του  $\mathbf{x}_\beta^{(0)}$  των καταστάσεων των κρυφών νευρώνων  $h_j$  με τυχαίο τρόπο οριζόμενο με σιγμοειδή πιθανότητα:  $p(h_j = 1) = \varphi(b_j + \sum_i v_i w_{ij})$
- Για  $t = 1, 2, 3 \dots k$  ανανέωση των  $\mathbf{x}_\alpha^{(t)}$  από τις  $\mathbf{x}_\beta^{(t-1)}$  με  $p(v_i = 1) = \varphi(a_i + \sum_j h_j w_{ij})$  και των  $\mathbf{x}_\beta^{(t)}$  από τις  $\mathbf{x}_\alpha^{(t)}$  με  $p(h_j = 1) = \varphi(b_j + \sum_i v_i w_{ij})$
- Από τα  $\mathbf{x}_\alpha^{(0)}, \mathbf{x}_\alpha^{(k)}$  υπολογισμός διαφοροποιήσεων  $\Delta w_{ij}$  προς τη μεγιστοποίηση του λογαρίθμου πιθανοφάνειας των **ανεξαρτήτων**  $\mathbf{x}_\alpha \in \mathcal{T}$ :  $L(\mathbf{w}) = \sum_{\mathbf{x}_\alpha \in \mathcal{T}} \log P(\mathbf{X}_\alpha = \mathbf{x}_\alpha)$

## Restricted Boltzmann Machine (RBM) (3/7)

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

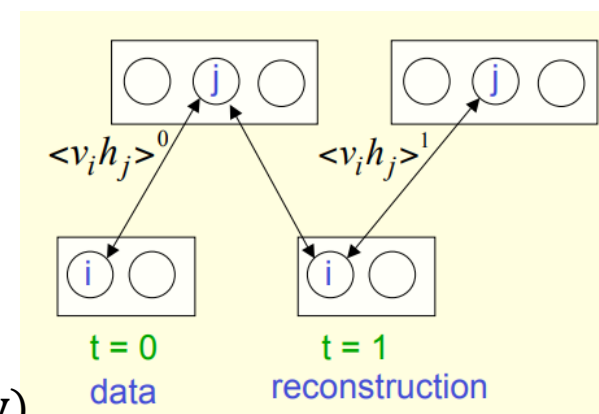
<http://www.cs.utoronto.ca/~hinton/absps/nccd.pdf>

**Κριτήριο:** Μεγιστοποίηση του λόγου πιθανοφάνειας  $L(\mathbf{w}) = \sum_{\mathbf{x}_\alpha \in \mathcal{J}} \log P(\mathbf{X}_\alpha = \mathbf{x}_\alpha)$  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  $t = 0$  και την τελική σύγκλιση  $t = k \rightarrow \infty$  (όπως στις *Boltzmann Machines - BM* αλλά χωρίς εξάρτηση από τη θερμοκρασία  $T$  αφού δεν πραγματοποιείται *simulated annealing* όπως στον Αλγόριθμο Μάθησης των *BM*)



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



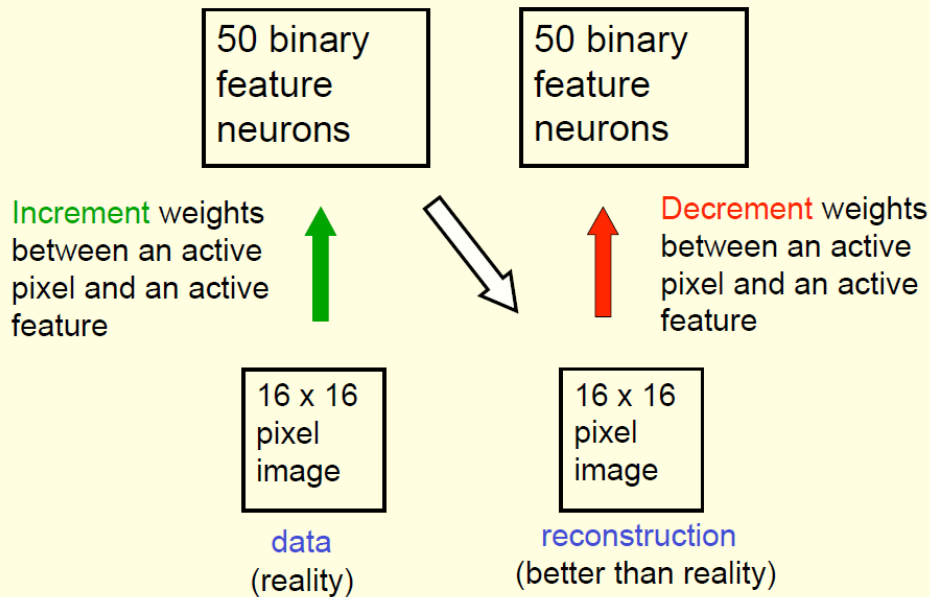
# ΣΤΟΧΑΣΤΙΚΕΣ ΔΙΑΔΙΚΑΣΙΕΣ & ΒΕΛΤΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗ ΣΤΗ ΜΗΧΑΝΙΚΗ ΜΑΘΗΣΗ

## Restricted Boltzmann Machine (RBM) (4/7)

**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 ( $50 \times 256$  binary feature neurons)  
(απλοποίηση από **MNIST Database**: αριθμός pixels 784  $\rightarrow$  256, grayscale  $\rightarrow$  black/white)

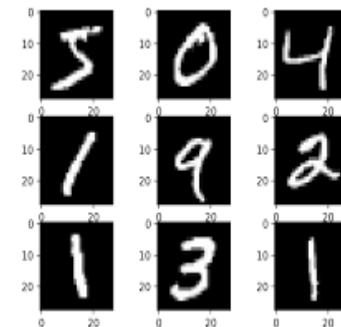
How to learn a set of features that are good for reconstructing images of the digit 2



## MNIST Datasets

### Modified National Institute of Standards & Technology Database

- Images of Handwritten Numbers (0,...,9)
- $28 \times 28 = 784$  pixels/image
- Grayscale Encoding: Range (0,1)
- Learning Dataset: **60,000** Images
- Test Dataset: **10,000** Images

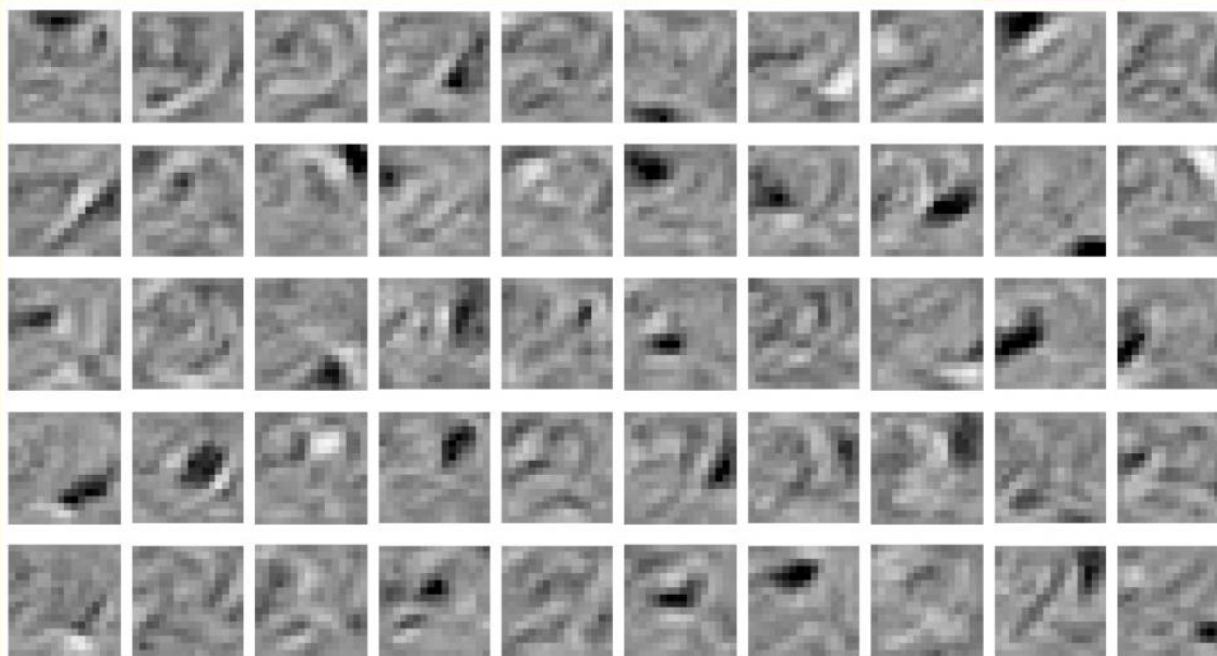


# ΣΤΟΧΑΣΤΙΚΕΣ ΔΙΑΔΙΚΑΣΙΕΣ & ΒΕΛΤΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗ ΣΤΗ ΜΗΧΑΝΙΚΗ ΜΑΘΗΣΗ

## Restricted Boltzmann Machine (RBM) (5/7)

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

The final 50 x 256 weights



Each neuron grabs a different feature.



## Restricted Boltzmann Machine (RBM) (6/7)

**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**

How well can we reconstruct the digit images from the binary feature activations?

Data

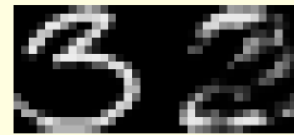


New test images from the digit class that the model was trained on

Reconstruction from activated binary features



Data



Images from an unfamiliar digit class (the network tries to see every image as a 2)

Reconstruction from activated binary features



# ΣΤΟΧΑΣΤΙΚΕΣ ΔΙΑΔΙΚΑΣΙΕΣ & ΒΕΛΤΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗ ΣΤΗ ΜΗΧΑΝΙΚΗ ΜΑΘΗΣΗ

## Restricted Boltzmann Machine (RBM) (7/7)

<https://christian-igels.github.io/paper/TRBMAI.pdf>

### Παράδειγμα Ταξινόμησης Προτύπων με RBM

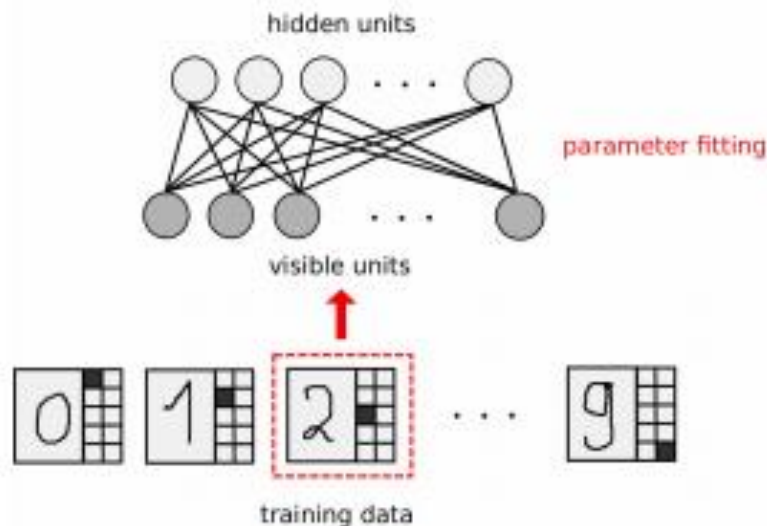
#### Μη Επιβλεπόμενη Μάθηση RBM

Δείγμα Μάθησης Εικόνων με προσθήκη *metadata*: Κωδικοποίηση κλάσης σαν *label* και ενσωμάτωση σε δειγματικά στοιχεία μάθησης που κλειδώνονται στην αρχική κατάσταση των ορατών νευρώνων της RBM

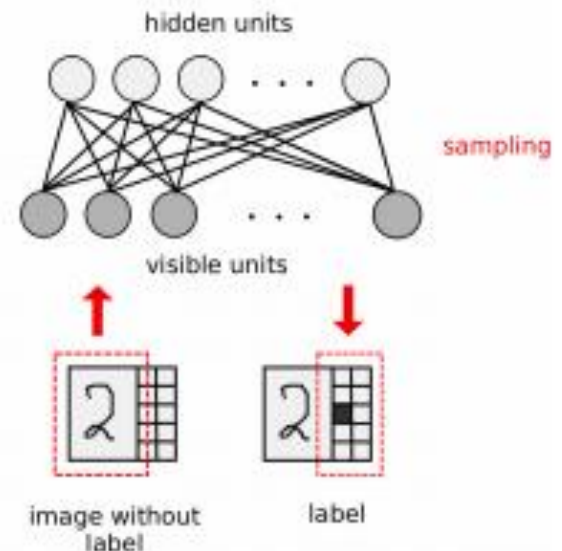
#### Ταξινόμηση Δείγματος Test

Είσοδος εικόνας test χωρίς *label* και *αναπαραγωγή* της στην τελική κατάσταση των ορατών νευρώνων της RBM με συμπλήρωση πληροφορίας κλάσης σύμφωνα με τις στατιστικές εκτιμήσεις που προέκυψαν από τη διαδικασία μάθησης

#### learning with labels



#### classification



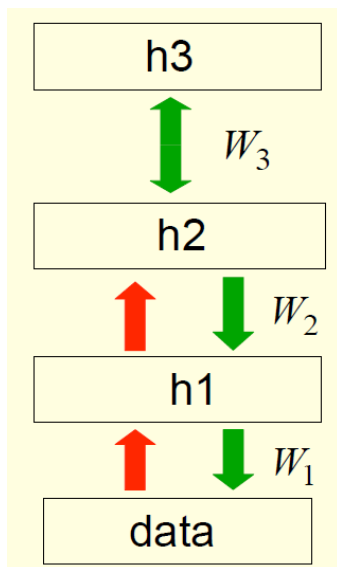
# ΣΤΟΧΑΣΤΙΚΕΣ ΔΙΑΔΙΚΑΣΙΕΣ & ΒΕΛΤΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗ ΣΤΗ ΜΗΧΑΝΙΚΗ ΜΑΘΗΣΗ

## Deep Belief Nets

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

Αποτελείται από στοίβα πολλαπλών ιεραρχικών στρωμάτων συνδεδεμένων νευρώνων με δυαδικές στοχαστικές καταστάσεις:

1. **Ορατό Στρώμα (*Visible Layer*)** που αρχικά **κλειδώνει** σε δειγματικά στοιχεία μάθησης και μετά τη σύγκλιση **παράγει** 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