

# ΣΤΟΧΑΣΤΙΚΕΣ ΔΙΕΡΓΑΣΙΕΣ & ΒΕΛΤΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗ ΣΤΗ ΜΗΧΑΝΙΚΗ ΜΑΘΗΣΗ

**Εφαρμογές Παραγωγικών Μοντέλων Boltzmann:**

- 1. Restrictive Boltzmann Machine (RBM)**
- 2. Αντιφατική Απόκλιση (Contrastive Divergence Algorithm)**
- 3. Deep Belief Networks (DBN)**

καθ. Βασίλης Μάγκλαρης

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

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

Αίθουσα 002, Νέα Κτίρια ΣΗΜΜΥ

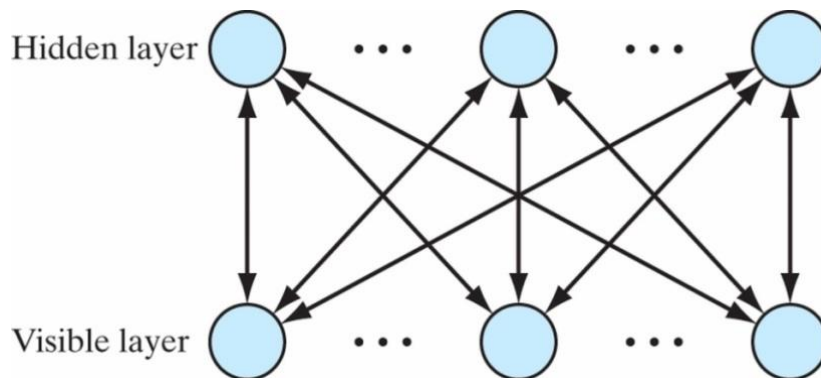
Τρίτη 1/4/2024

# ΣΤΟΧΑΣΤΙΚΕΣ ΔΙΑΔΙΚΑΣΙΕΣ & ΒΕΛΤΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗ ΣΤΗ ΜΗΧΑΝΙΚΗ ΜΑΘΗΣΗ

## Restricted Boltzmann Machine (RBM) (1/2)

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

- Στοχαστικοί νευρώνες 2 επιπέδων (**ορατό, κρυφό**), συμμετρικές συνάψεις, δυαδικές καταστάσεις  $\{0,1\}$
- Οι καταστάσεις των  $K$  ορατών νευρώνων  $v_i$  του δικτύου **RBM** κωδικοποιούν παρατηρήσιμα χαρακτηριστικά (*observable features*) δείγματος εισόδου/εξόδου, ενώ οι  $L$  του κρυφού επιπέδου  $h_j$  κωδικοποιούν κρυφές ιδιότητες (*latent features*)
- Έστω  $\mathbf{x}_\alpha^{(t)} = [v_1 v_2 \dots v_K]^T$ ,  $\mathbf{x}_\beta^{(t)} = [h_1 h_2 \dots h_L]^T$  διανύσματα κατάστασης της **RBM** στο βήμα  $t = 0, 1, 2, \dots, k$
- Οι πιθανότητες ισορροπίας των καταστάσεων εξαρτώνται από την «ενέργεια»  $E(\mathbf{x}_\alpha^{(t)}, \mathbf{x}_\beta^{(t)})$ :
$$P(\mathbf{x}_\alpha^{(t)}, \mathbf{x}_\beta^{(t)}) \propto e^{-E(\mathbf{x}_\alpha^{(t)}, \mathbf{x}_\beta^{(t)})}$$
- Νευρώνες του ίδιου επιπέδου: **Ασύνδετοι**  $\Rightarrow$  Οι καταστάσεις κρυφών νευρώνων  $\sim$  **ανεξάρτητες** τυχαίες μεταβλητές υπό την συνθήκη των καταστάσεων των ορατών νευρώνων



Harmonium (1986, Paul Smolensky)  $\rightarrow$   
RBM (2006, Geoffrey Hinton)

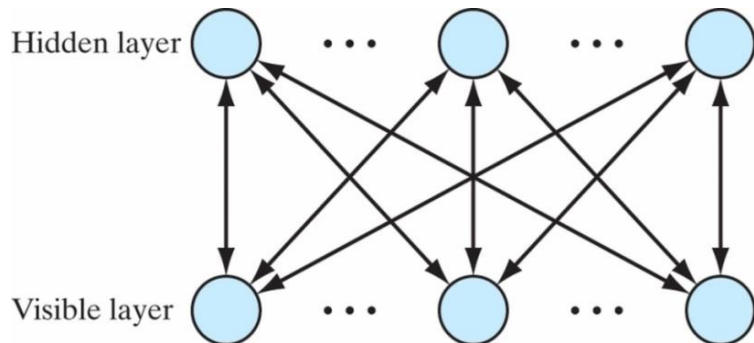
# ΣΤΟΧΑΣΤΙΚΕΣ ΔΙΑΔΙΚΑΣΙΕΣ & ΒΕΛΤΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗ ΣΤΗ ΜΗΧΑΝΙΚΗ ΜΑΘΗΣΗ

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

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

- Κάθε δειγματικό στοιχείο μάθησης  $\in \mathcal{T}$  κλειδώνει στο **βήμα**  $t = 0$  τις καταστάσεις των  $v_i$
- Σε **βήματα**  $t = 1, 2, \dots, k$  οι καταστάσεις των νευρώνων οδηγούνται σε ισορροπία με **δειγματοληψία Gibbs**. Κάθε βήμα περιλαμβάνει: (1) τη παραγωγή (**sampling**) τιμών από **visible**  $\rightarrow$  **hidden** neurons και (2) **sampling** από τα **hidden**  $\rightarrow$  **visible** neurons
- Συνάρτηση ενεργοποίησης νευρώνων: Σιγμοειδής (**logistic**) συνάρτηση  $\varphi(v) = \frac{1}{1 + \exp(-v)}$
- Στη παράμετρο ενεργοποίησης  $v$  αθροίζονται οι καταστάσεις των συνδεόμενων νευρώνων με συναπτικά βάρη  $w_{ji} = w_{ij}$  **όπως έχουν οριστεί στη παρούσα επανάληψη** καθώς και εξωτερικοί παράγοντες **bias**:  $a_i$  για τους ορατούς νευρώνες και  $b_j$  για τους κρυφούς
- Η «ενέργεια» του δικτύου **RBM** με δυαδικές καταστάσεις  $\{0, 1\}$  απλοποιείται σαν

$$E(\mathbf{x}_\alpha^{(t)}, \mathbf{x}_\beta^{(t)}) = - \sum_{i,j} v_i h_j w_{ij}$$



### Πλεονέκτημα RBM από Boltzmann Machine

Η μη διασύνδεση μεταξύ νευρώνων του ίδιου επιπέδου επιταχύνει τη παραγωγή δείγματος με στατιστική ομοιότητα σε δεδομένα μάθησης

# ΣΤΟΧΑΣΤΙΚΕΣ ΔΙΑΔΙΚΑΣΙΕΣ & ΒΕΛΤΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗ ΣΤΗ ΜΗΧΑΝΙΚΗ ΜΑΘΗΣΗ

## Αλγόριθμος Μάθησης σε Restricted Boltzmann Machine (RBM)

(2002, Geoffrey Hinton)

<https://www.cs.toronto.edu/~hinton/absps/guideTR.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**: Συναπτικά Βάρη  $w_{ij} = w_{ji}$  μεταξύ ορατών και κρυφών νευρώνων ώστε στη

σύγκλιση ( $t \rightarrow \infty$ ) να δημιουργηθούν καταστάσεις  $v_i$  του  $\mathbf{x}_\alpha^{(t)}$  με κατανομή **Gibbs** που να

προσεγγίζει κατά **Kullback-Leibler (KL)** την κατανομή του δείγματος μάθησης  $\mathbf{x}_\alpha^{(0)} \in \mathcal{J}$

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

**Αλγόριθμος**: Για κάθε στοιχείο  $\mathbf{x}_\alpha^{(0)}$  του δείγματος μάθησης επαναλαμβάνεται για  $t = 1, 2, 3 \dots k$

η παραγωγή (*sampling*) 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**  $\mathbf{x}_\alpha^{(0)} \in \mathcal{J}$  και παραγωγή (*Gibbs sampling*) του  $\mathbf{x}_\beta^{(0)}$  των καταστάσεων των κρυφών νευρώνων  $h_j$  με σιγμοειδή πιθανότητα:  $p(h_j = 1) = \varphi(b_j + \sum_i v_i w_{ij})$

➤ Για  $t = 1, 2, 3 \dots k$  *sampling* 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 όλα τα  $\mathbf{x}_\alpha^{(0)}, \mathbf{x}_\alpha^{(k)}$  προκύπτουν οι διαφοροποιήσεις  $\Delta w_{ij}$  προς τη μεγιστοποίηση του **λογαρίθμου πιθανοφάνειας** των **ανεξαρτήτων**  $\mathbf{x}_\alpha \in \mathcal{J}$ :  $L(\mathbf{w}) = \sum_{\mathbf{x}_\alpha \in \mathcal{J}} \log P(\mathbf{X}_\alpha = \mathbf{x}_\alpha)$

# ΣΤΟΧΑΣΤΙΚΕΣ ΔΙΑΔΙΚΑΣΙΕΣ & ΒΕΛΤΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗ ΣΤΗ ΜΗΧΑΝΙΚΗ ΜΑΘΗΣΗ

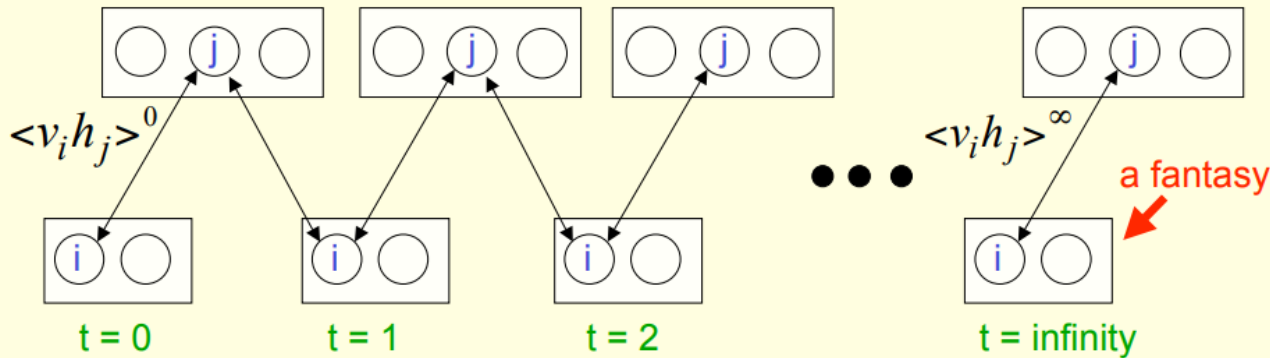
## Αλγόριθμος Αντιφατικής Απόκλισης (Contrastive Divergence)

(2002, Geoffrey Hinton)

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

**Κριτήριο:** Μεγιστοποίηση του λόγου πιθανοφάνειας  $L(\mathbf{w}) = \sum_{\mathbf{x}_\alpha \in \mathcal{T}} \log P(\mathbf{X}_\alpha = \mathbf{x}_\alpha)$  με επαναλήψεις προς *Gradient Ascent* κατά  $\frac{\partial L(\mathbf{w})}{\partial w_{ij}} = \rho_{ij}^{(0)} - \rho_{ij}^{(k)}$  όπου  $\rho_{ij}^{(t)}$  οι μέσες συσχετίσεις των νευρώνων  $i, j$  κατά την εκκίνηση  $t = 0$  και την τελική σύγκλιση  $t = k \rightarrow \infty$

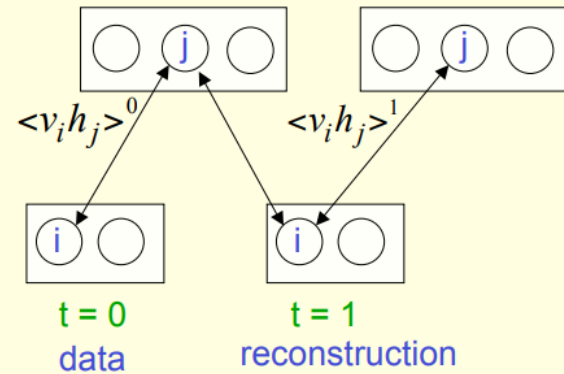
- Οι  $\rho_{ij}^{(0)}$  αντανakλούν συσχετίσεις που ταιριάζουν στα δεδομένα μάθησης ενώ οι  $\rho_{ij}^{(k)}$  παράγουν συσχετίσεις ιδεατών μοντέλων (*Αντιφατική Απόκλιση, Contrastive Divergence*)
- Στόχος της **RBM** η **σύγκλιση** των δύο με κατάλληλη ρύθμιση των παραμέτρων  $\mathbf{w}$



$$\rho_{ij}^{(0)} \leftrightarrow \langle v_i h_j \rangle^0$$
$$\rho_{ij}^{(t)} \leftrightarrow \langle v_i h_j \rangle^t$$

**Προέγγιση στη πράξη:** Ανάλογα με τα δεδομένα μάθησης (πλήθος στοιχείων, αντιπροσωπευτικότητα, παρατηρήσιμα χαρακτηριστικά - *features*) 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:**  $k = 1, \Delta w_{ij} = \varepsilon (\rho_{ij}^{(0)} - \rho_{ij}^{(1)})$



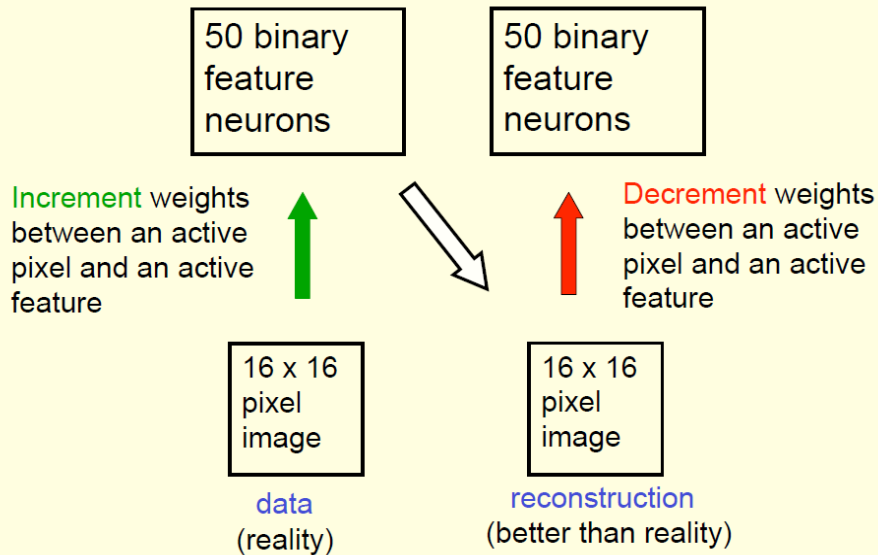
# ΣΤΟΧΑΣΤΙΚΕΣ ΔΙΑΔΙΚΑΣΙΕΣ & ΒΕΛΤΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗ ΣΤΗ ΜΗΧΑΝΙΚΗ ΜΑΘΗΣΗ

## Εφαρμογή RBM – Αναπαραγωγή Χειρόγραφων Αριθμών (1/3)

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

- Δειγματικά στοιχεία μάθησης (**data**): Σκαναρισμένες εικόνες χειρόγραφου αριθμού σε  $16 \times 16 = 256$  pixels με κωδικοποίηση 1 bit/pixel (άσπρο – μαύρο)  
(απλοποίηση από **MNIST Database**: αριθμός pixels 784  $\rightarrow$  256, grayscale  $\rightarrow$  black/white)
- Αναπαραγωγή (**reconstruction**): Μέσω **RBM** με 256 visible neurons & 50 hidden feature neurons (50  $\times$  256 συναπτικά βάρη)

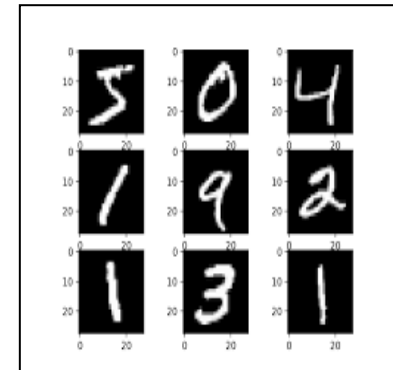
How to learn a set of features that are good for reconstructing images of the digit 2



### 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

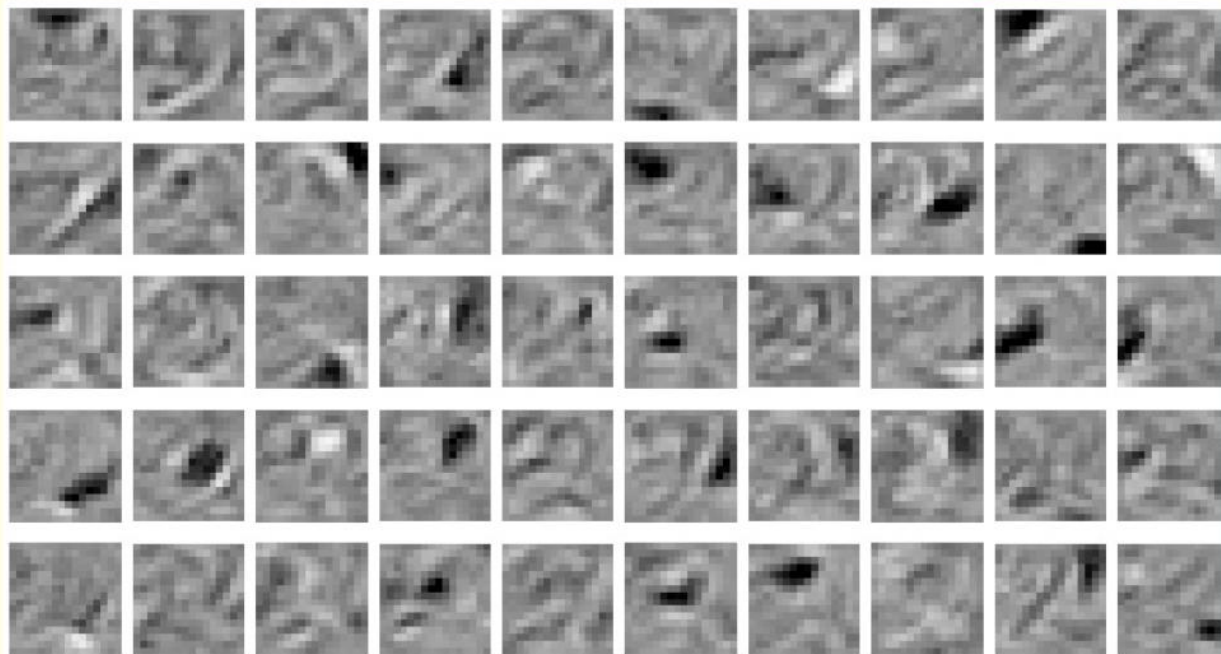


# ΣΤΟΧΑΣΤΙΚΕΣ ΔΙΑΔΙΚΑΣΙΕΣ & ΒΕΛΤΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗ ΣΤΗ ΜΗΧΑΝΙΚΗ ΜΑΘΗΣΗ

## Εφαρμογή RBM – Αναπαραγωγή Χειρόγραφων Αριθμών (2/3)

*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.

# ΣΤΟΧΑΣΤΙΚΕΣ ΔΙΑΔΙΚΑΣΙΕΣ & ΒΕΛΤΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗ ΣΤΗ ΜΗΧΑΝΙΚΗ ΜΑΘΗΣΗ

## Εφαρμογή RBM – Αναπαραγωγή Χειρόγραφων Αριθμών (3/3)

*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  
↓  
Reconstruction from activated binary features  
↓



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

Data  
↓  
Reconstruction from activated binary features  
↓



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



# ΣΤΟΧΑΣΤΙΚΕΣ ΔΙΑΔΙΚΑΣΙΕΣ & ΒΕΛΤΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗ ΣΤΗ ΜΗΧΑΝΙΚΗ ΜΑΘΗΣΗ

## Παράδειγμα Ταξινόμησης Προτύπων με RBM

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

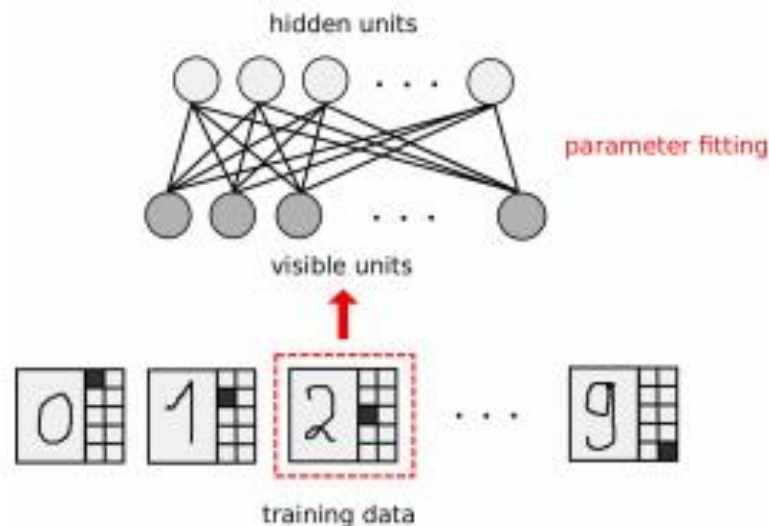
### Δείγμα Μάθησης RBM με Ενσωμάτωση Label σε Εικόνες

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

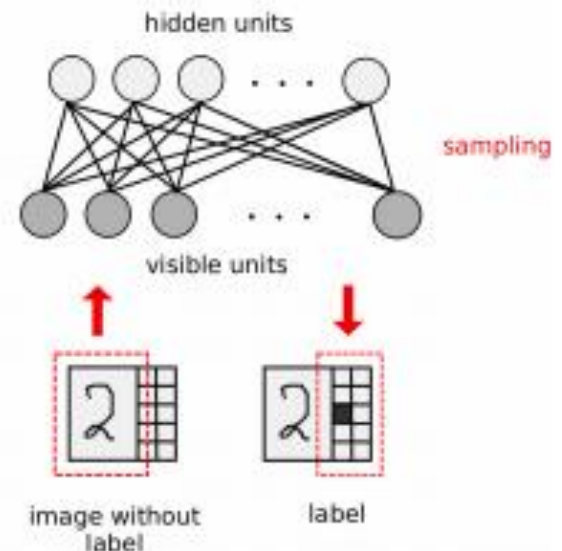
### Ταξινόμηση Δείγματος Test

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



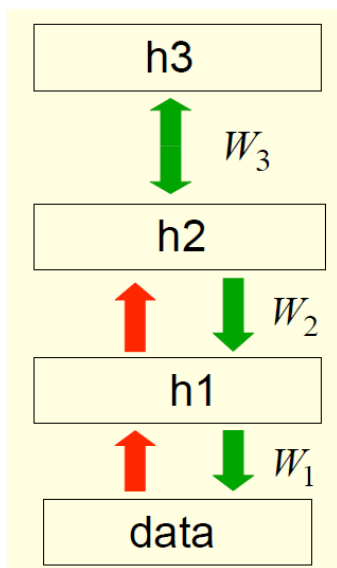
# ΣΤΟΧΑΣΤΙΚΕΣ ΔΙΑΔΙΚΑΣΙΕΣ & ΒΕΛΤΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗ ΣΤΗ ΜΗΧΑΝΙΚΗ ΜΑΘΗΣΗ

## Deep Belief Nets (DBN)

Μάθηση των DBN (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 την 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