ε.δε.μ²
ΕΠΙΣΤΗΜΗ ΔΕΔΟΜΕΝΩΝ & ΜΗΧΑΝΙΚΗ ΜΑΘΗΣΗ

ΣΤΟΧΑΣΤΙΚΕΣ ΔΙΕΡΓΑΣΙΕΣ & ΒΕΛΤΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗ ΣΤΗ ΜΗΧΑΝΙΚΗ ΜΑΘΗΣΗ

Παραγωγικά Μοντέλα μη Επιβλεπόμενης Μάθησης

1. Μηχανή Boltzmann

2. Παραγωγικά (Generative) Στοχαστικά Νευρωνικά Δίκτυα

3. Generative Adversarial Networks (GAN)

4. Restricted Boltzmann Machine (RBM), Deep Belief Networks

καθ. Βασίλης Μάγκλαρης

maglaris@netmode.ntua.gr

www.netmode.ntua.gr

Αίθουσα 002, Νέα Κτίρια ΣΗΜΜΥ

Παρασκευή 31/3/2023

ΣΤΟΧΑΣΤΙΚΕΣ ΔΙΑΔΙΚΑΣΙΕΣ & ΒΕΛΤΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗ ΣΤΗ ΜΗΧΑΝΙΚΗ ΜΑΘΗΣΗ

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

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

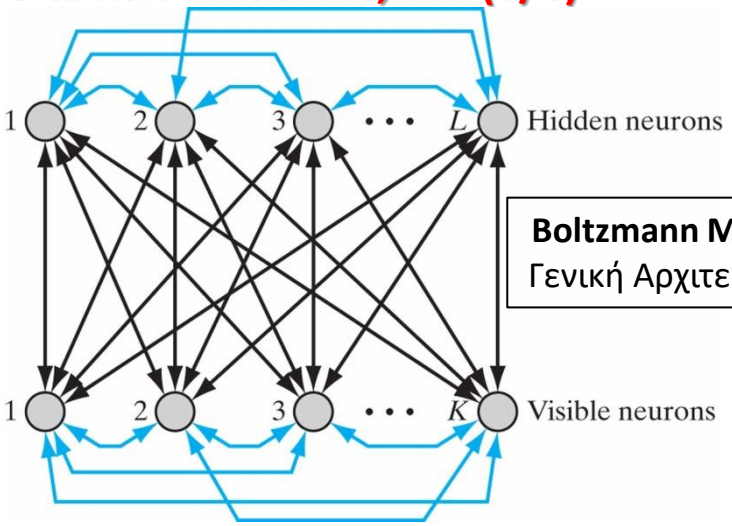
Στόχος η προσέγγιση **ελλειμματικού** διανύσματος εισόδου (π.χ. ***pattern completion*** εικόνων) μέσω δημιουργίας διανύσματος εξόδου, στατιστικά συμβατού με ***unlabeled*** δείγμα μάθησης

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

- K **Visible** και L **Hidden Neurons**
- **Συμμετρικές Συνάψεις** $i \to j$: $w_{ji} = w_{ij}, w_{ii} = 0$ εν δυνάμει μεταξύ όλων των νευρώνων της **BM**

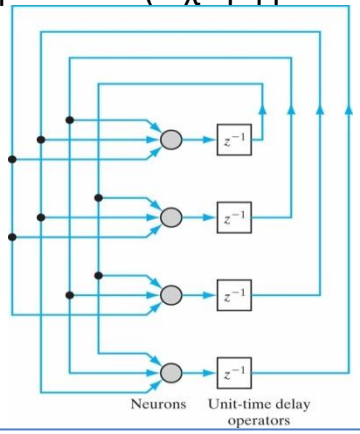
Αποτελεί εξέλιξη του αναδρομικού δικτύου ***Hopfield*** με νευρώνες σε **δυαδικές καταστάσεις** ± 1 σύμφωνα με ορισμένες **πιθανότητες** (***Stochastic Recurrent Network with Hidden Nodes***). Το δίκτυο συγκλίνει με **μη επιβλεπόμενη** μάθηση σε ισορροπία ***Markov Random Field***:

- Δυαδικά παραδείγματα **μάθησης** εισάγονται στα ***Visible Nodes*** και με **gradient ascent** προσδιορίζονται συναπτικά βάρη και **τελικές** καταστάσεις των νευρώνων (***Visible*** & ***Hidden***)
- Δυαδικά στοιχεία **test** εισάγονται στα ***Visible Nodes*** και η **BM** τα αναπαράγει (***generates***, ***sampling***) σύμφωνα με τις στατιστικές ιδιότητες του **δείγματος μάθησης**



Boltzmann Machine
Γενική Αρχιτεκτονική

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



ΣΤΟΧΑΣΤΙΚΕΣ ΔΙΑΔΙΚΑΣΙΕΣ & ΒΕΛΤΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗ ΣΤΗ ΜΗΧΑΝΙΚΗ ΜΑΘΗΣΗ

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

Φάσεις Μάθησης Μηχανής Boltzmann

- **Θετική Φάση Μάθησης**: Τα στοιχεία του δείγματος μάθησης κλειδώνουν (***clamp***) δυαδικές καταστάσεις ± 1 των ***ορατών νευρώνων*** με βάση τις τιμές 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 ***Hebb***). *Θετική Φάση* $\sim$ Ενεργή Εγκεφαλική Λειτουργία, *Αρνητική Φάση* $\sim$ Επεξεργασία σε Κατάσταση Ύπνου (;)

ΣΤΟΧΑΣΤΙΚΕΣ ΔΙΑΔΙΚΑΣΙΕΣ & ΒΕΛΤΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗ ΣΤΗ ΜΗΧΑΝΙΚΗ ΜΑΘΗΣΗ

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

Ορισμοί

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

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

- **Συναπτικά Βάρη** $i \to j : w_{ji} = w_{ij}, w_{ii} = 0$ (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***

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

https://www.cs.toronto.edu/~hinton/csc321/readings/boltz321.pdf
https://youtu.be/5jaBneYd5Ig

ΣΤΟΧΑΣΤΙΚΕΣ ΔΙΑΔΙΚΑΣΙΕΣ & ΒΕΛΤΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗ ΣΤΗ ΜΗΧΑΝΙΚΗ ΜΑΘΗΣΗ

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

- **Συμβάντα (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 ***events***

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

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**:

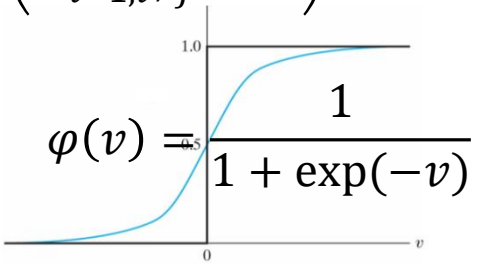
Δεδομένου ότι x_i, x_j παίρνουν τις τιμές ± 1 η υπό συνθήκη πιθανότητα $P(A|B)$ απλοποιείται:

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

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

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

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***)



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 πιθανότητες που θεωρούμε πως συγκλίνουν σε 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 παραδείγματα μάθησης από το δείγμα μάθησης $\mathcal{T}$
- **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, προκύπτουν οι πιθανότητες ***ορατών*** καταστάσεων ***Gibbs*** $P(\mathbf{X}_\alpha = \mathbf{x}_\alpha)$ που προσεγγίζουν την κατανομή του δείγματος μάθησης. Αν έχουμε πολλά στοιχεία στο $\mathcal{T}$, μπορούμε να θεωρήσουμε ότι οι καταστάσεις $\mathbf{X}_\alpha$ είναι ***ανεξάρτητα*** τυχαία διανύσματα με πιθανότητα (πιθανοφάνεια προσέγγισης από τη κατανομή ***Gibbs***) το ***παραγοντικό γινόμενο*** $\prod_{\mathbf{x}_\alpha \in \mathcal{T}} P(\mathbf{X}_\alpha = \mathbf{x}_\alpha)$

Αν θεωρήσουμε τον λογάριθμο $L(\mathbf{w})$ του γινομένου 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 των καταστάσεων $\mathbf{x} = (\mathbf{x}_\alpha, \mathbf{x}_\beta)$, $\forall\, \mathbf{x}_\beta$:

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

ΣΤΟΧΑΣΤΙΚΕΣ ΔΙΑΔΙΚΑΣΙΕΣ & ΒΕΛΤΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗ ΣΤΗ ΜΗΧΑΝΙΚΗ ΜΑΘΗΣΗ

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

$$L(\mathbf{w}) = \sum_{\mathbf{x}_\alpha \in \boldsymbol{\mathcal{T}}} \left(\log \sum_{\mathbf{x}_\beta} \exp\left(-\frac{E(\mathbf{x})}{T}\right) - \log \sum_{\mathbf{x}} \exp\left(-\frac{E(\mathbf{x})}{T}\right) \right), \qquad E(\mathbf{x}) = -\frac{1}{2}\sum_i \sum_{j \neq i} w_{ji} x_i x_j$$

Παραγωγίζοντας ως προς τα συναπτικά βάρη w_{ji} έχουμε

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

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

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

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

ΑΝΑΓΚΗ ΑΠΛΟΠΟΙΗΣΗΣ ΔΙΚΤΥΟΥ → RESTRICTED BOLTZMANN MACHNE (RBM)

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)

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

$\Rightarrow$

$P(y\|x)$	$y=0$	$y=1$
$x=1$	**1**	0
$x=2$	$2/6$	**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***

ΣΤΟΧΑΣΤΙΚΕΣ ΔΙΑΔΙΚΑΣΙΕΣ & ΒΕΛΤΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗ ΣΤΗ ΜΗΧΑΝΙΚΗ ΜΑΘΗΣΗ

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

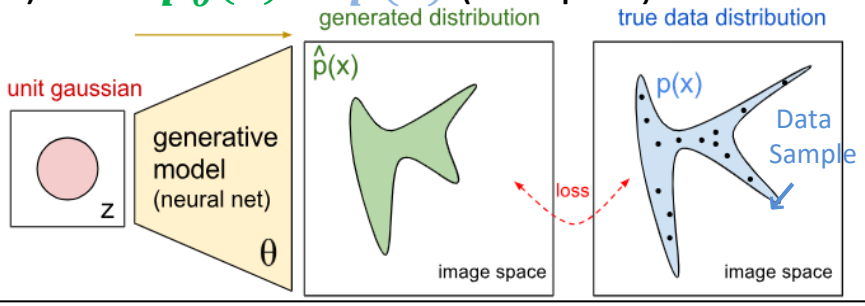
Γενίκευση Παραγωγικού Μοντέλου (Generative Model)

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 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 $\hat{p}_\theta(x) \rightarrow p(x)$ (συνήθως κατά ***Kullback-Leibler***)



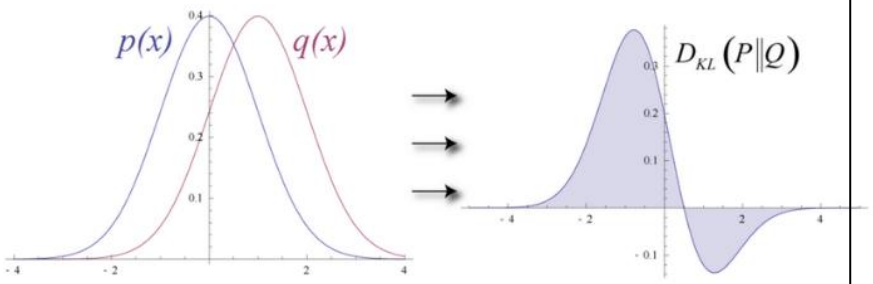
Μετρικές Ομοιότητας Κατανομών $p(x), q(x)$

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

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

  (*εφαρμόζεται σε Boltzmann Machine*)

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



- **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

ΣΤΟΧΑΣΤΙΚΕΣ ΔΙΑΔΙΚΑΣΙΕΣ & ΒΕΛΤΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗ ΣΤΗ ΜΗΧΑΝΙΚΗ ΜΑΘΗΣΗ

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

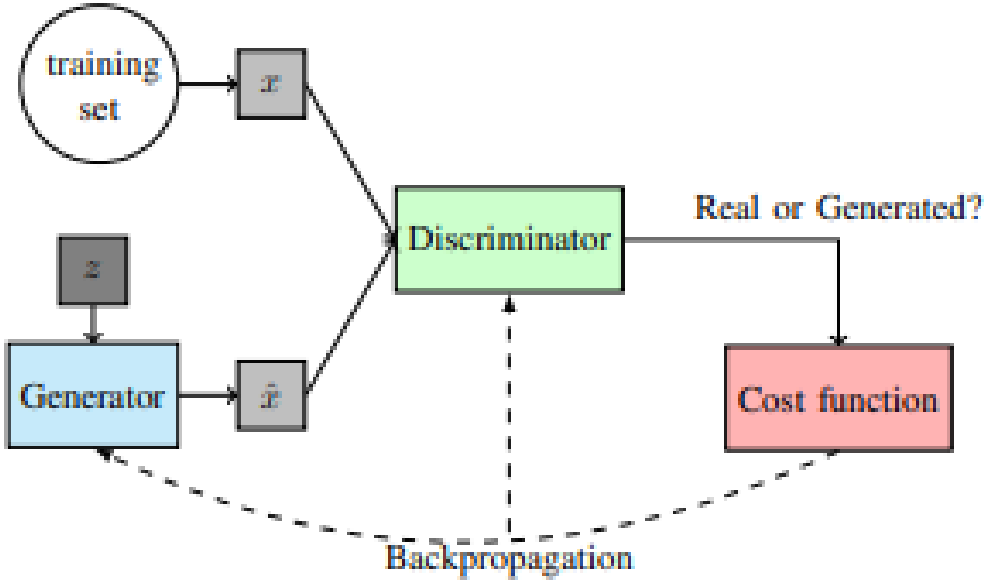
Generative Adversarial Networks - GAN (2014 ***Ian Goodfellow*** et.al.)

https://arxiv.org/pdf/1406.2661.pdf

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

- **Generator** (**G**) που με είσοδο ***latent random variables*** z (π.χ. ***Gauss***) δημιουργεί στην έξοδο $G(z)$ εικονικό παραγόμενο (***generated***) δείγμα $\hat{x}$ με κατανομή $p_\theta(\hat{x})$
- **Discriminator** (**D**) 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 **D** καταλαβαίνει τη διαφορά (έξοδος ***Generated***), ο παίκτης **G** τροποποιεί τις παραμέτρους του και επαναλαμβάνει μέχρι να τον εξαπατήσει (έξοδος ***Real***)



Cost Functions (Loss) for D - G Game:

D: $max\left\{\log D(x) + \log\left(1 - D\left(G(z)\right)\right)\right\}$

maximize probability $\hat{x}$ classified as fake

G: $min\left\{\log\left(1 - D\left(G(z)\right)\right)\right\}$

minimize probability $\hat{x}$ classified as fake

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

ΣΤΟΧΑΣΤΙΚΕΣ ΔΙΑΔΙΚΑΣΙΕΣ & ΒΕΛΤΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗ ΣΤΗ ΜΗΧΑΝΙΚΗ ΜΑΘΗΣΗ

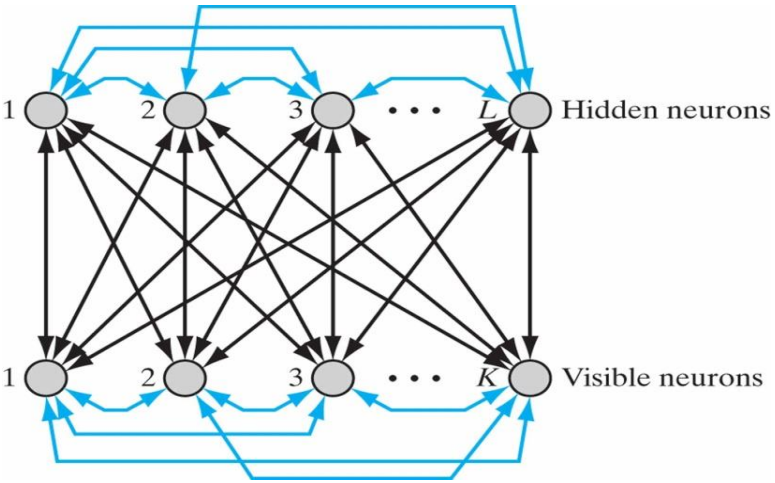
Generative Stochastic Neural Networks

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

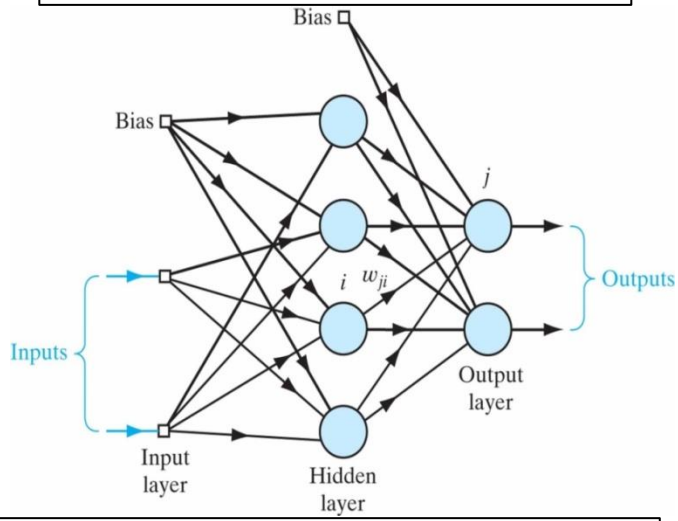
Generative Deep Neural Networks με Δυαδικούς (ON/OFF) Στοχαστικούς Νευρώνες

- **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 ⇒ **Boltzmann Machine** (1983, ***Geoffrey Hinton*** & ***Terry Sejnowski***)
- **Κατευθυντική Ακυκλική Διασύνδεση** σε γράφο δυαδικών στοχαστικών νευρώνων ⇒ **Logistic (Sigmoid) Belief Nets** (1992, ***Radford Neal***)

Boltzmann Machine



Logistic (Sigmoid) Belief Nets



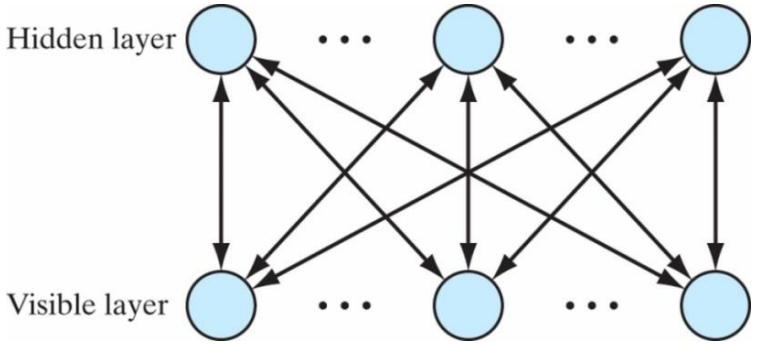
Δυσκολίες μάθησης (ρύθμιση συνάψεων κρυφών επιπέδων), αργή σύγκλιση

ΣΤΟΧΑΣΤΙΚΕΣ ΔΙΑΔΙΚΑΣΙΕΣ & ΒΕΛΤΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗ ΣΤΗ ΜΗΧΑΝΙΚΗ ΜΑΘΗΣΗ

Restricted Boltzmann Machine (RBM) (1/7)

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 ιδίου 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 συνδεόμενων νευρώνων με συναπτικά βάρη $w_{ji} = w_{ij}$ καθώς και εξωτερικοί παράγοντες *bias*: a_i για τους ορατούς νευρώνες και b_j για τους κρυφούς
- Ξεκινώντας από κάθε δειγματικό στοιχείο μάθησης $\in \boldsymbol{\mathcal{T}}$ οι καταστάσεις των νευρώνων οδηγούνται σε ισορροπία σε επαναλαμβανόμενα διπλά *βήματα τυχαίας δειγματοληψίας Gibbs* $\mathrm{t} = 0,1,2,\dots,k$. 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 ιδίου επιπέδου επιταχύνει τη παραγωγή δείγματος με στατιστική ομοιότητα σε δεδομένα μάθησης όπως κλειδώνονται στους ορατούς νευρώνες

ΣΤΟΧΑΣΤΙΚΕΣ ΔΙΑΔΙΚΑΣΙΕΣ & ΒΕΛΤΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗ ΣΤΗ ΜΗΧΑΝΙΚΗ ΜΑΘΗΣΗ

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: Συναπτικά Βάρη $w_{ij} = w_{ji}$ μεταξύ ορατών και κρυφών νευρώνων ώστε στη σύγκλιση ($t \to \infty$) 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 $\mathbf{x}_\alpha^{(0)} \in \boldsymbol{\mathcal{T}}$

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

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

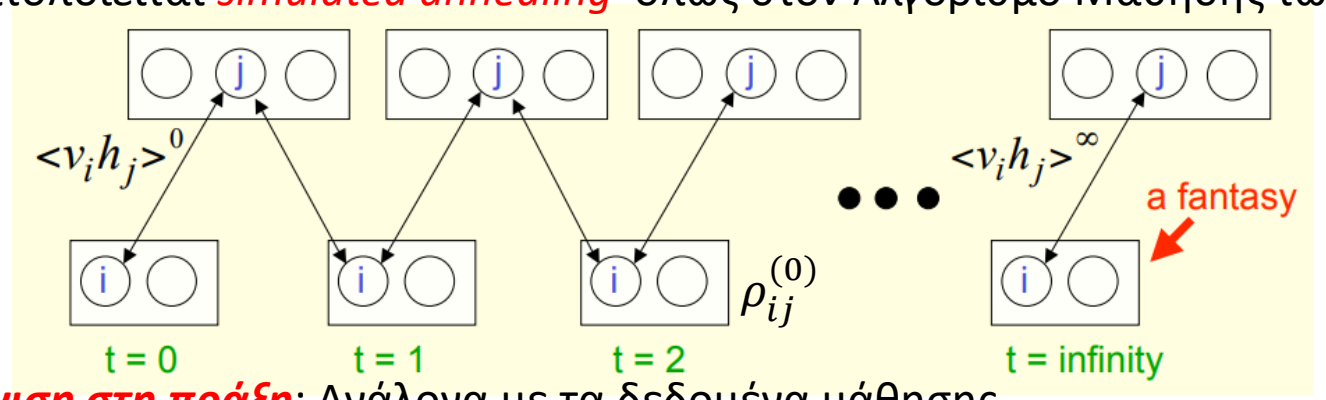
ΣΤΟΧΑΣΤΙΚΕΣ ΔΙΑΔΙΚΑΣΙΕΣ & ΒΕΛΤΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗ ΣΤΗ ΜΗΧΑΝΙΚΗ ΜΑΘΗΣΗ

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

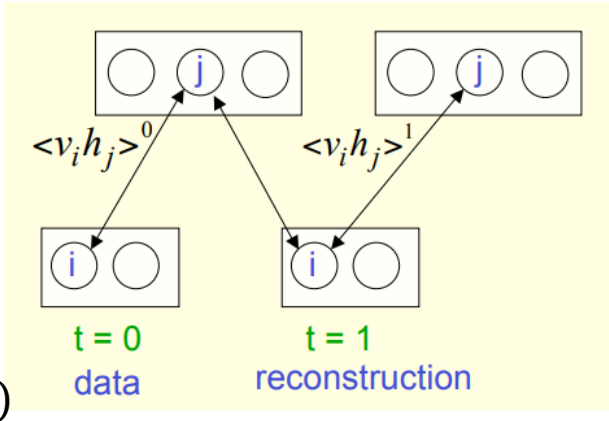


$$\rho_{ij}^{(\mathrm{t})} \leftrightarrow < v_i h_j >^{\mathrm{t}}$$

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 $L(\mathbf{w})$

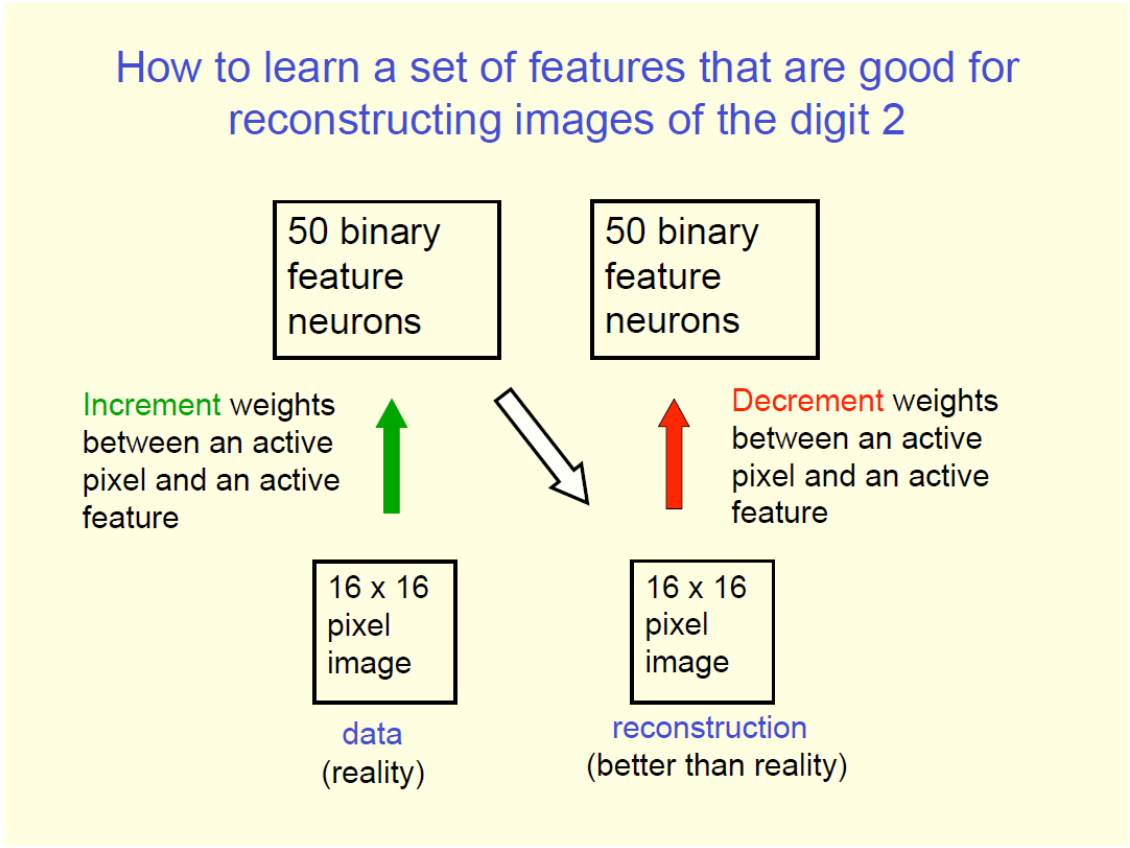


ΣΤΟΧΑΣΤΙΚΕΣ ΔΙΑΔΙΚΑΣΙΕΣ & ΒΕΛΤΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗ ΣΤΗ ΜΗΧΑΝΙΚΗ ΜΑΘΗΣΗ

Restricted Boltzmann Machine (RBM) (4/7)

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

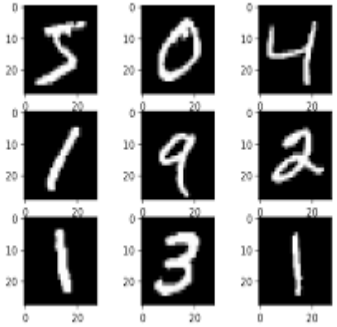
Παραγωγή εικονικού δειγματικού στοιχείου από δείγμα χειρόγραφων αριθμών $16 \times 16 = 256$ pixels κωδικοποιημένα με 1 bit (άσπρο – μαύρο) μέσω RBM με 256 visible neurons & 50 hidden feature neurons (50×256 συναπτικά βάρη)
(*απλοποίηση από* **MNIST Database**: *αριθμός pixels* 784 → 256, *grayscale* → *black/white*)



MNIST Datasets

Modified National Institute of Standards & Technology Database

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

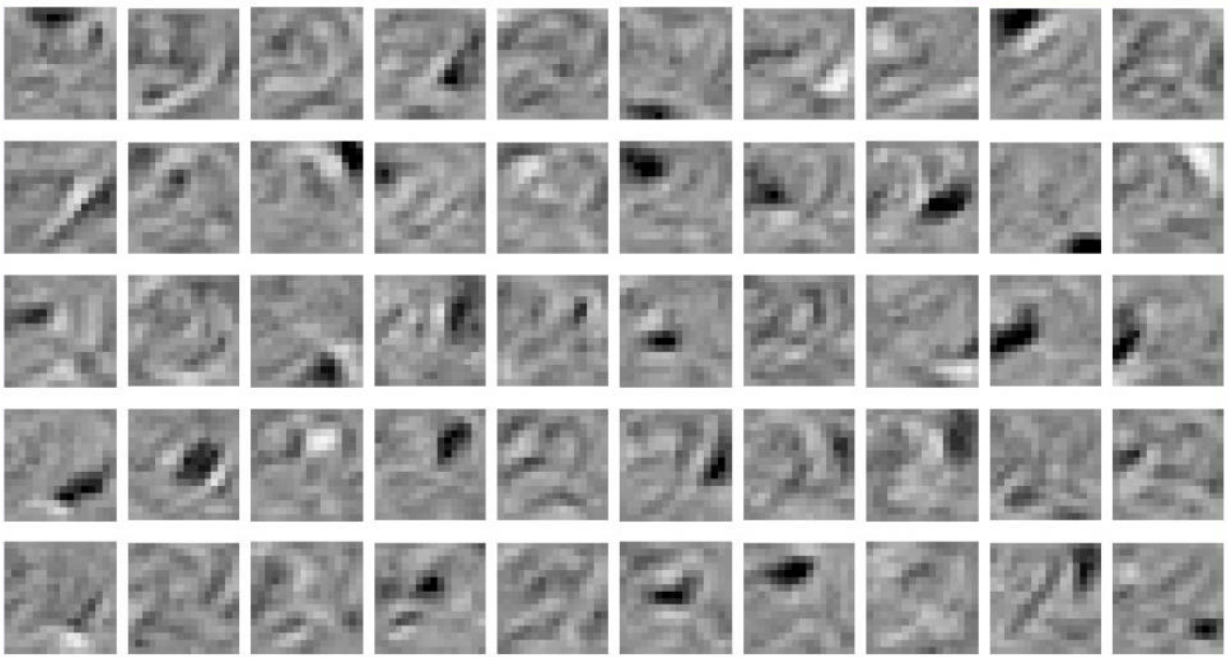


ΣΤΟΧΑΣΤΙΚΕΣ ΔΙΑΔΙΚΑΣΙΕΣ & ΒΕΛΤΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗ ΣΤΗ ΜΗΧΑΝΙΚΗ ΜΑΘΗΣΗ

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.

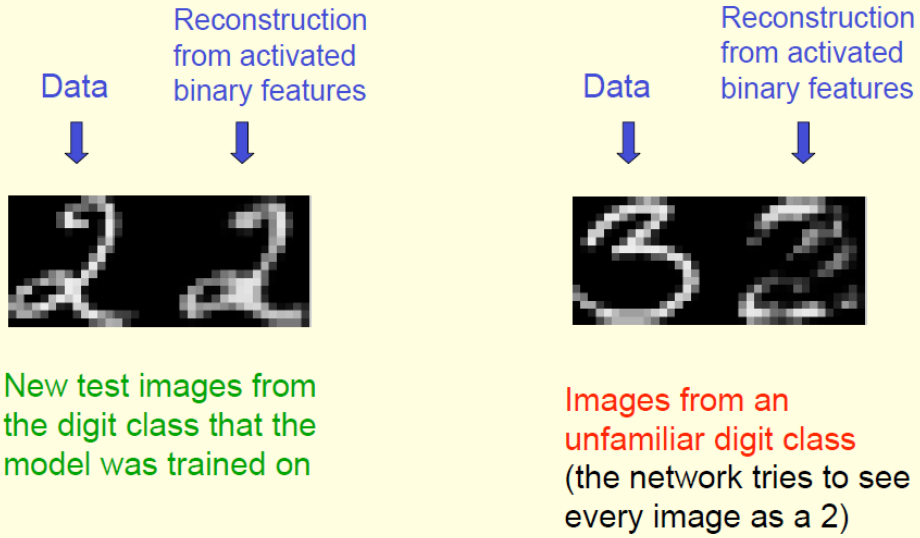
ΣΤΟΧΑΣΤΙΚΕΣ ΔΙΑΔΙΚΑΣΙΕΣ & ΒΕΛΤΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗ ΣΤΗ ΜΗΧΑΝΙΚΗ ΜΑΘΗΣΗ

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?



ΣΤΟΧΑΣΤΙΚΕΣ ΔΙΑΔΙΚΑΣΙΕΣ & ΒΕΛΤΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗ ΣΤΗ ΜΗΧΑΝΙΚΗ ΜΑΘΗΣΗ

Restricted Boltzmann Machine (RBM) (7/7)

https://christian-igel.github.io/paper/TRBMAI.pdf

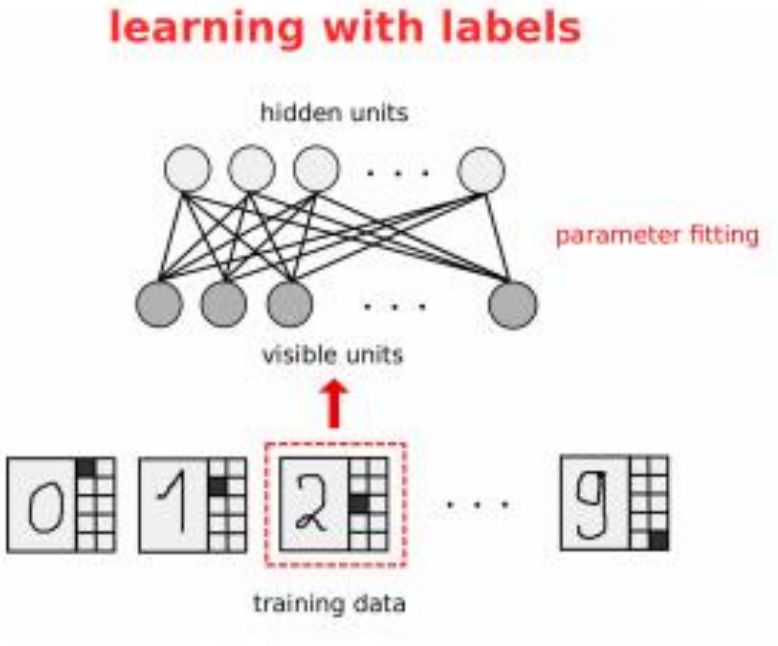
Παράδειγμα Ταξινόμησης Προτύπων με RBM

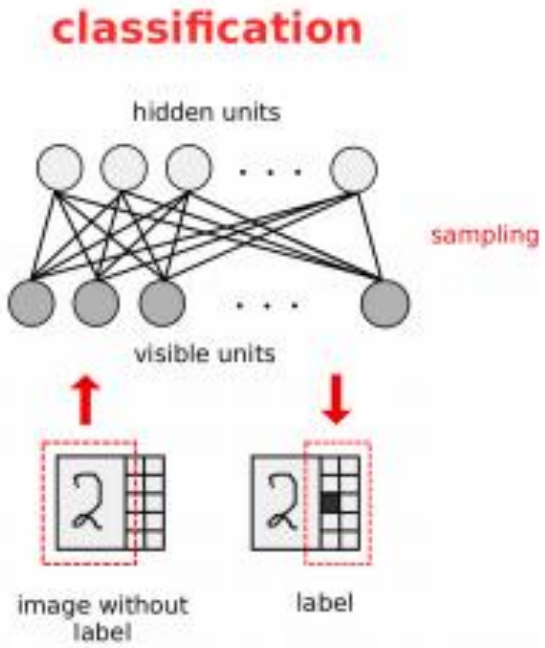
Μη Επιβλεπόμενη Μάθηση RBM

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





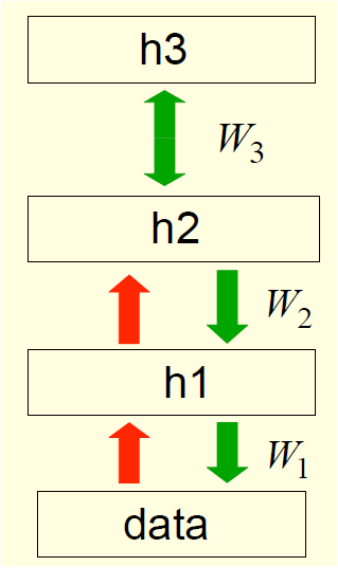
ΣΤΟΧΑΣΤΙΚΕΣ ΔΙΑΔΙΚΑΣΙΕΣ & ΒΕΛΤΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗ ΣΤΗ ΜΗΧΑΝΙΚΗ ΜΑΘΗΣΗ

Deep Belief Nets

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

Αποτελείται από στοίβα πολλαπλών ιεραρχικών στρωμάτων συνδεόμενων νευρώνων 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