Kisitli Boltzmann Makinalari (Restricted Boltzmann Machines -RBM-)

Bir RBM icinde ikisel (binary) degerler tasiyan gizli (hidden) h degiskenler, ve yine ikisel gorunen (visible) degiskenler v vardir. Z aynen once gordugumuz Boltzman Makinalarinda (BM) oldugu gibi normalizasyon sabitidir.

$$p(x, h; W) = \exp(-E(x, h))/Z$$

E tanimina "enerji" olarak ta atif yapilabiliyor.

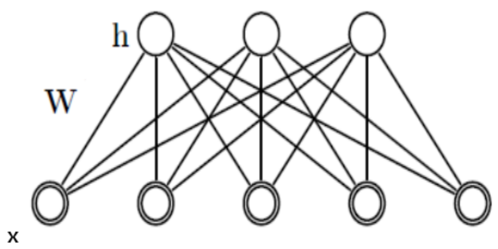
$$E(x, h) = -h^T W x - c^T x - b^T h$$

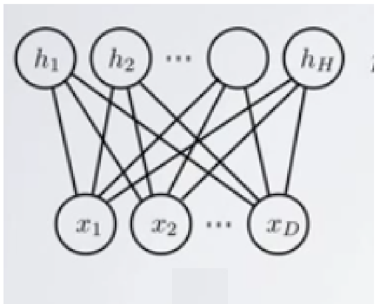
BM'lerden farkli olarak RBM taniminda c, b degiskenleri var. Bu degiskenler yanlilik (bias) icin, yani veri icindeki genel egilimi saptamalari icin modele konulmustur. Ayrica $h^T W x$ terimi var, bu BM'deki $x^T W x$ biraz farkli, gizli degiskenler, h uzerinden x'ler arasinda baglanti yapiyor. Bir baska ilginc farklilik BM ile tum x ogeleri birbirine baglanabiliyordu, RBM ile daha az (ya da fazla) olabilecek h katmaninda baglantilar paylasiliyor. Ozellikle azaltma durumunda RBM ozellik alanini azaltarak bir tur genellemeyi gerceklestirebiliyor.

Formul alttaki gibi de acilabilir,

$$= -\sum_j \sum_k W_{j,k} h_j x_k - \sum_k c_k x_k - \sum_j b_j h_j$$

RBM'lerin alttaki gibi resmedildigini gorebilirsiniz.





h, x degiskenleri olasilik teorisinden bilinen rasgele degiskenlerdir, yani hem x'e hem de h'e "zar attirabiliriz" / bu degiskenler uzerinden orneklem toplayabiliriz.

Ayrica, RBM'ler aynen BM'ler gibi bir olasilik yogunluk fonksiyonu uzerinden tanimlanirlar, onceki formulde gordugumuz gibi, tum mumkun degerleri uzerinden entegralleri (ya da toplamlari) alininca sonuc 1 olur, vs.

RBM'lerin "kisitli" olarak tanimlanmalarinin sebebi gizli degiskenlerin kendi aralarinda, ve gorunen degiskenlerin kendi aralarinda direk baglantiya izin verilmemis olmasidir, bu bakimdan "kisitlanmislardir". Baglantilara, W uzerinden sadece gizli ve gorunen degiskenler (tabakalar) arasinda izin verilmistir. Bu tabii ki matematiksel olarak bazi kolayliklar sagliyor.

Devam edelim, ana formulden hareketle cebirsel olarak sunlar da dogrudur,

$$p(x,h;W) = \exp(-E(x,h))/Z$$

$$= \exp(h^T W x + c^T x + b^T h)/Z \tag{2}$$

$$= \exp(h^T W x)\exp(c^T x)\exp(b^T h)/Z$$

cunku bir toplam uzerindeki exp, ayri ayri exp'lerin carpimi olur. Ayni mantikla, eger ana formulu matris / vektor yerine ayri degiskenler olarak gormek istersek,

$$p(x,h;W) = \frac{1}{Z}\prod_j\prod_k \exp(W_{jk}h_j x_k)\prod_k \exp(c_k x_k)\prod_j \exp(b_j h_j)$$

Notasyonu kolaylastirmak amaciyla b, c terimlerini W icine absorbe edebiliriz, $x_0 = 1$ ve $h_0 = 1$ degerlerini mecbur tutarsak ve $w_{0,:} = c$ ve $w_{:,0} = b$ dersek, yani W'nin sifirinci satirinin tamaminin c oldugunu, sifirinci kolonunun tamaminin b oldugunu kabul edersek RBM ana formulunu tekrar elde etmis oluruz, fakat artik

$$E(x,h) = -h^T W x$$

$$= -\sum_j\sum_k W_{j,k}h_j x_k$$

ve

$$p(x,h;W) = \exp(h^T W x)/Z$$

yeterli olacaktir. Bir diger kolaylik x, h yerine tek degisken kullanmak,

Eger $y \equiv (x,h)$ olarak alirsak,

$$P(x,h;W) = \frac{1}{Z(W)}\exp\left[\frac{1}{2}y^T W y\right]$$

Aslinda acik konusmak gerekirse "enerji" gibi kavramlarla ugrasmak, ya da icinde eksi terimler iceren bir grup degiskenin tekrar eksisini almak ve eksilerin etkisinin notralize etmis olmak yerine bastan (2)'deki ifadeyle yola cikmak daha kisadir. Icinde enerji olan aciklamalari biraz da literaturde gorulebilecek anlatimlara aciklik getirmek icin yaptik.

Neyse, h uzerinden marjinalize edersek,

$$
P(x;W) = \sum_h \frac{1}{Z(W)} \exp\left[\frac{1}{2} y^T W y\right]
$$

$$
P(x;W) = \frac{1}{Z(W)} \sum_h \exp\left[\frac{1}{2} y^T W y\right] \tag{1}
$$

Ve $Z(W)$

$$
Z(W) = \sum_{h,x} \exp\left[\frac{1}{2} y^T W y\right]
$$

(1) denkleminde bolumunden sonraki kisma $Z_x(W)$ dersek, sanki ayni exp denkleminin x'ler uzerinden marjinalize edilmis hali olarak gosterebiliriz onu, ve boylece daha kisa bir formul kullanabiliriz,

$$
P(x;W) = \frac{1}{Z(W)} \underbrace{\sum_h \exp\left[\frac{1}{2} y^T W y\right]}_{Z_x(W)}
$$

O zaman

$$
P(x;W) = \frac{Z_x(W)}{Z(W)}
$$

elde ederiz. Veri uzerinden maksimum olurluk icin, yine log uzerinden bir hesap yapariz, BM icin yapmistik bunu,

$$
\mathcal{L} = \ln \big(\prod_{n=1}^{N} P(x^n;W) \big) = \sum_{n=1}^{N} \ln P(x^n;W)
$$

$$
= \sum_{n=1}^{N} \ln \frac{Z_{x^{(n)}}(W)}{Z(W)} = \sum_{n=1}^{N} \big(\ln Z_{x^{(n)}} - \ln Z \big)
$$

$$
\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial w_{ij}} = \sum_{n=1}^{N} \big(\frac{\partial \ln Z_{x^{(n)}}}{\partial w_{ij}} - \frac{\partial \ln Z}{\partial w_{ij}} \big) \tag{3}
$$

Parantez icindeki 1. turevi alalim,

$$\frac{\partial \ln Z_{x^{(n)}}}{\partial w_{ij}} = \frac{\partial}{\partial w_{ij}} \ln \Big[\sum_h \exp\big(\frac{1}{2} y^{n^T} W y^n\big) \Big]$$

$$= \frac{1}{Z_{x^{(n)}}} \Big[\sum_h \frac{\partial}{\partial w_{ij}} \exp\big(\frac{1}{2} y^{n^T} W y^n\big) \Big]$$

$$= \frac{1}{Z_{x^{(n)}}} \Big[\sum_h \exp\big(\frac{1}{2} y^{n^T} W y^n\big) \frac{\partial}{\partial w_{ij}} y^{n^T} W y^n \Big]$$

$$= \frac{1}{Z_{x^{(n)}}} \sum_h \exp\big(\frac{1}{2} y^{n^T} W y^n\big) y_i y_j$$

$$= \sum_h \frac{1}{Z_{x^{(n)}}} \exp\big(\frac{1}{2} y^{n^T} W y^n\big) y_i y_j$$

$Z_{x^{(n)}}$'nin ne oldugunu hatirlarsak, exp ifadesinin h uzerinden marjinalize edilmis hali,

$$= \sum_h \frac{\exp\big(\frac{1}{2} y^{n^T} W y^n\big)}{\sum_h \exp\big(\frac{1}{2} y^T W y\big)} y_i y_j$$

Eger bolumun ustunu ve altini Z ile bolsek,

$$= \sum_h \frac{\exp\big(\frac{1}{2} y^{n^T} W y^n\big)/Z}{\sum_h \exp\big(\frac{1}{2} y^T W y\big)/Z} y_i y_j$$

Ust kisim $P(y;W)$ yani $P(x,h;W)$ alt kisim $P(x;W)$ olmaz mi? Evet! Ve,

$$P(h|x^n;W) = \frac{P(x^n,h;W)}{P(x^n;W)}$$

olduguna gore,

$$= \sum_h P(h|x^n;W) y_i y_j$$

elde ederiz. Bunu da $< y_i y_j >_{P(h|x^n;W)}$ olarak yazabiliriz.

Simdi parantez icindeki 2. turevi alalim, yani $\frac{\partial \ln Z}{\partial w_{ij}}$,

$$\frac{\partial \ln Z}{\partial w_{ij}} = \sum_{h,x} \frac{1}{Z} \exp\big(\frac{1}{2} y^T W y\big) y_i y_j = \sum_{h,x} P(y;W) y_i y_j$$

ki bu son ifadeyi de $< y_i y_j >_{P(y;W)}$ olarak yazabiliriz. Tamamini, yani (3) ifadesini, artik soyle yazabiliriz,

$$\sum_{n=1}^{N} \big(\frac{\partial \ln Z_{x^{(n)}}}{\partial w_{ij}} - \frac{\partial \ln Z}{\partial w_{ij}} \big) = \sum_{n=1}^{N} < y_i y_j >_{P(h|x^n;W)} - < y_i y_j >_{P(y;W)} \tag{4}$$

Bu formulu de BM icin yaptigimiz gibi bir gradyan guncelleme formulune donusturebiliriz. Guncelleme formulunun hangi hesaplari gerektirdigine gelince; Ilk terim tum h'ler uzerinden, ikincisi ise tum x, h'ler uzerinden bir olasilik hesabi ve ornekleme gerektirecek. Bu durum cetin hesap (intractable) denen bir durum, ve daha once BM icin bu problemi Gibbs orneklemesi ile cozmustuk. Ayni cozumu burada da uygulayabiliriz, fakat belki daha iyi bir yaklasim su olacak.

CD Yontemi (Contrastive Divergence)

RBM'leri egitmek icin kullanilan en populer yontem CD yontemidir. Bu yontemi gecmeden once bazi matematiksel kolayliklari bilmek gerekli.

RBM grafigine bakarsak, eger x biliniyor ise bu h degiskenlerini bagimsiz hale getirir (kosullu olasilik kurali), ve ayni sekilde h biliniyor ise x bagimsiz hale gelir. Bunu gorsel olarak bile anlamak cok kolay, elimizle tum x'leri kapatalim mesela ve h dugumlerine bakalim, aralarinda hicbir baglanti yoktur degil mi? Ayni sekilde h kapatinca x'ler "baglantisiz" hale gelir.

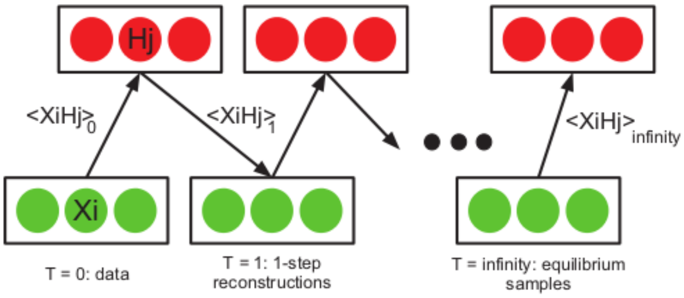
Bu bagimsizliktan yola cikarak, daha once BM icin yaptigimiz gibi, olasiliklar su basit formullere donusur,

$$p(h_i|x) = \sigma\bigg(\sum_{j=1}^{m} w_{ij} x_j \bigg)$$

$$p(x_i|h) = \sigma\bigg(\sum_{i=1}^{n} w_{ij} h_i \bigg)$$

ve tabii ki $\sigma(x) = 1/(1 + e^{-x})$. Daha once 1 olma olasiligini nasil ornekleme cevirecegimizi de gormustuk zaten.

Simdi CD'nin ne olduguna gelelim. Eger RBM icin gereken orneklemeyi klasik Gibbs ile yaparsak orneklemeyi "yeterince uzun sure" yapmak gerekir ki dagilimin olasi noktalari gezilmis olsun. Fakat, ozellikle yuksek boyutlu durumlarda, tum x, h kombinasyonlarini dusunursek bu cok buyuk bir alandir. Bunun yerine, ve ustteki bagimsizlik formullerinden hareketle CD yontemi bulunmustur, bu yonteme gore ornekleme operasyonu verinin kendisini baz alarak baslatilir, dongunun mesela ilk adiminda x^0 (ki bu tum verinin tamami), o baz alinarak $p(h^0|\nu^0)$ hesaplanir (ki bu ustteki sigmoid, ve onun uzerinden h^0 orneklemi toplanir yani). Sonra h^0 baz alinir ve x^1, bu boyle devam eder. Literaturde su sekildeki resim bolca gorulebilir,



Bu yontem pur Gibbs orneklemesine kiyasla cok daha hizli isler ve iyi sonuclar verir. Teorik olarak niye isledigi [1,2] makalelerinde bulunabilir. CD aslinda (4) hedef formulunu degil baska bir hedefi optimize ediyor, fakat sonuc (4)'un yapmak istedigine yakin.

Kod [3] su sekilde,

```
import numpy as np
import itertools

class RBM:

  def __init__(self, num_visible, num_hidden, learning_rate = 0.1,\
               max_epochs = 1000):
    self.num_hidden = num_hidden
    self.num_visible = num_visible
    self.learning_rate = learning_rate
    self.norm_dict = {}
    self.weights = 0.1 * np.random.randn(self.num_visible, self.num_hidden)
    self.weights = np.insert(self.weights, 0, 0, axis = 0)
    self.weights = np.insert(self.weights, 0, 0, axis = 1)
    self.max_epochs = max_epochs

  def fit(self, data):
    num_examples = data.shape[0]

    data = np.insert(data, 0, 1, axis = 1)

    for epoch in range(self.max_epochs):
      pos_hidden_activations = np.dot(data, self.weights)
      pos_hidden_probs = self._logistic(pos_hidden_activations)
      pos_hidden_states = pos_hidden_probs > \
          np.random.rand(num_examples, self.num_hidden + 1)

      tmp = np.array(pos_hidden_states).astype(float)
      pos_visible_states = self.run_hidden(tmp[:,1:])

      pos_associations = np.dot(data.T, pos_hidden_probs)

      neg_visible_activations = np.dot(pos_hidden_states, self.weights.T)
      neg_visible_probs = self._logistic(neg_visible_activations)
      neg_visible_probs[:,0] = 1 # Fix the bias unit.
```

```
      neg_hidden_activations = np.dot(neg_visible_probs, self.weights)
      neg_hidden_probs = self._logistic(neg_hidden_activations)

      neg_associations = np.dot(neg_visible_probs.T, neg_hidden_probs)

      self.weights += self.learning_rate * \
          ((pos_associations - neg_associations) / num_examples)

      error = np.sum((data - neg_visible_probs) ** 2)

  def run_hidden(self, data):

    num_examples = data.shape[0]

    visible_states = np.ones((num_examples, self.num_visible + 1))

    data = np.insert(data, 0, 1, axis = 1)

    visible_activations = np.dot(data, self.weights.T)
    visible_probs = self._logistic(visible_activations)
    visible_states[:,:] = visible_probs > \
        np.random.rand(num_examples, self.num_visible + 1)

    visible_states = visible_states[:,1:]
    return visible_states

  def run_visible(self, data):
    num_examples = data.shape[0]

    hidden_states = np.ones((num_examples, self.num_hidden + 1))

    data = np.insert(data, 0, 1, axis = 1)

    hidden_activations = np.dot(data, self.weights)
    hidden_probs = self._logistic(hidden_activations)
    hidden_states[:,:] = hidden_probs > \
        np.random.rand(num_examples, self.num_hidden + 1)
    hidden_states = hidden_states[:,1:]
    return hidden_states

  def predict_proba(self, X):
    hs = self.run_visible(X)
    hs = np.insert(hs, 0, 1,axis=1)
    res = []
    for i in range(len(X)):
      tmp = np.dot(hs[i],self.weights.T)
      res.append(np.dot(tmp.T,np.insert(X[i], 0, 1)))
    return np.array(res) / self.norm_c

  def _logistic(self, x):
    return 1.0 / (1 + np.exp(-x))
```

Kaynaklar

[1] Hinton, G., Training Products of Experts by Minimizing Contrastive Diver-

gence

[2] Louppe, G., Collaborative filtering, Scalable approaches using restricted Boltzmann machines, Master's Thesis, 2010

[3] `https://github.com/echen/restricted-boltzmann-machines`