

Kisitli Boltzmann Makinalari (Restricted Boltzmann Machines -RBM-)

RBM aynen Boltzman Makinalarinda (BM) orneginde oldugu gibi bir dagilimdir. Verilen x, h icin bir olasilik degeri geri dondurebilir.

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

Standart RBM icin h, x ikiseldir (binary). Gizli (hidden) tabaka h , ve “gorunen (visible)” tabaka x vardir. Z aynen once gordugumuz BM’de oldugu gibi normalizasyon sabitidir. Spesifik bir RBM’i tanımlayan sey onun W matrisidir. Gizli degiskenler bazen karisiklik yaratabiliyor, bu degiskenler aynen gorunen degiskenler gibi degiskendirler. Yani belli h ’lerin “olasiligi” sorulabilir, ya da onlar uretilebilir. Fakat RBM’i egitirken sadece gorunen kısmi tarafından egitiriz. Gizli tabaka bu sirada orneklem ile arada sirada ici doldurulur, bu tabii ki W ’ye bagli olarak yapilacaktır. Gizli tabaka daha dusuk boyutlu oldugu, ve 0/1 degerlerine sahip olmasi mecbur oldugu icin bu git/gel bir tur ozetleme yapar ki ogrenim bu sirada ortaya cikar.

Devam edelim, E tanimina “enerji” olarak ta atif yapilabiliyor.

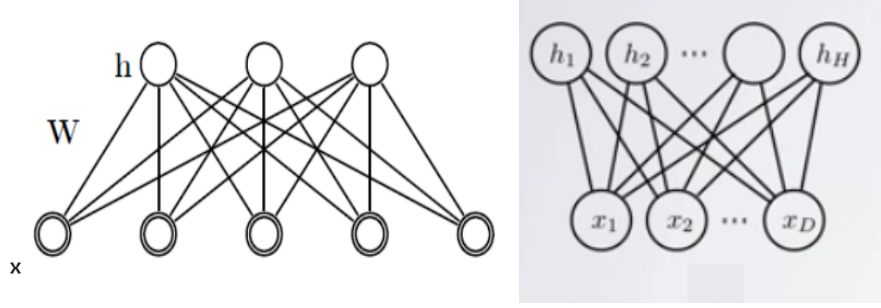
$$E(x, h) = -h^T W x - c^T x - b^T h$$

BM’lerden farkli olarak RBM’de c, b degiskenleri var. Bu degiskenler yanlilik (bias) icin, yani veri icindeki genel egilimi saptamaları icin modele konulmustur. Ayrica $h^T W x$ terimi var, bu BM’deki $x^T W x$ ’den biraz farkli, daha once belirttigimiz gibi, h uzerinden x ’ler arasinda baglanti yapiyor. BM ile tum x ogeleri birbirine baglanabiliyordu, RBM ile h katmaninda baglantilar paylasiliyor. Bu h uzerinden baglanti zorunlulugu RBM’in ozetleme alanini azaltarak bir tur genellemeyi gerceklestirebiliyor. Bu yuzden onlara “kisitli” Boltzmann makinalari adi veriliyor. Gizli degiskenlerin kendi aralarinda, ve gorunen degiskenlerin kendi aralarinda direk baglantiya izin verilmemistir, ki bu daha once bahsedilen kisitlemanin bir diger yonu. Baglantilara, W uzerinden sadece gizli ve gorunen degiskenler (tabakalar) arasinda izin verilmistir. Bu ayrica matematiksel olarak bazi kolayliklar sagliyor, bu konuyu birazdan isleyecegiz.

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.



Tekrar vurgulayalım, 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) alinince sonuc 1 olur, vs.

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

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

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

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

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 olacaktır. Bir diğer kolaylık x, h yerine tek değişken kullanmak, Eger $y \equiv (x, h)$ olarak alırsak (\equiv tabiri “tanım” anlamına gelir),

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

Aslında açık konuşmak gerekirse “enerji” gibi kavramlarla uğraşmak, ya da içinde eksi terimler içeren bir grup değişkenin tekrar eksisini almak ve eksilerin etkisini notralize etmiş olmaya gerek yok, bunun yerine bastan (2)’deki ifadeyle yola çıkmak daha kısa olur. İçinde enerji olan açıklamaları biraz da literatürde görülebilecek anlatımlara açıklık getirmek için yaptık.

Şimdi h üzerinden marjinalize edersek,

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

Ve $Z(W)$

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

(1) denkleminde bolumunden sonraki kısma $Z_x(W)$ dersek, sanki aynı exp denkleminin x ’ler üzerinden marjinalize edilmiş hali olarak gösterebiliriz onu, ve böylece daha kısa bir formül 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 üzerinden maksimum olurluk için, yine log üzerinden bir hesap yaparız, BM için yapmıştık bunu,

$$\begin{aligned}
\mathcal{L} &= \ln \left(\prod_{n=1}^N P(\mathbf{x}^n; W) \right) = \sum_{n=1}^N \ln P(\mathbf{x}^n; W) \\
&= \sum_{n=1}^N \ln \frac{Z_{\mathbf{x}^{(n)}}(W)}{Z(W)} = \sum_{n=1}^N (\ln Z_{\mathbf{x}^{(n)}} - \ln Z) \\
\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial w_{ij}} &= \sum_{n=1}^N \left(\frac{\partial \ln Z_{\mathbf{x}^{(n)}}}{\partial w_{ij}} - \frac{\partial \ln Z}{\partial w_{ij}} \right)
\end{aligned} \tag{3}$$

Parantez icindeki 1. turevi alalım,

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \ln Z_{\mathbf{x}^{(n)}}}{\partial w_{ij}} &= \frac{\partial}{\partial w_{ij}} \ln \left[\sum_h \exp \left(\frac{1}{2} \mathbf{y}^{n\top} W \mathbf{y}^n \right) \right] \\
&= \frac{1}{Z_{\mathbf{x}^{(n)}}} \left[\sum_h \frac{\partial}{\partial w_{ij}} \exp \left(\frac{1}{2} \mathbf{y}^{n\top} W \mathbf{y}^n \right) \right] \\
&= \frac{1}{Z_{\mathbf{x}^{(n)}}} \left[\sum_h \exp \left(\frac{1}{2} \mathbf{y}^{n\top} W \mathbf{y}^n \right) \frac{\partial}{\partial w_{ij}} \mathbf{y}^{n\top} W \mathbf{y}^n \right] \\
&= \frac{1}{Z_{\mathbf{x}^{(n)}}} \sum_h \exp \left(\frac{1}{2} \mathbf{y}^{n\top} W \mathbf{y}^n \right) y_i y_j \\
&= \sum_h \frac{1}{Z_{\mathbf{x}^{(n)}}} \exp \left(\frac{1}{2} \mathbf{y}^{n\top} W \mathbf{y}^n \right) y_i y_j
\end{aligned}$$

$Z_{\mathbf{x}^{(n)}}$ 'nin ne olduğunu hatırlarsak, exp ifadesinin h üzerinden marjinalize edilmiş hali,

$$= \sum_h \frac{\exp \left(\frac{1}{2} \mathbf{y}^{n\top} W \mathbf{y}^n \right)}{\sum_h \exp \left(\frac{1}{2} \mathbf{y}^{n\top} W \mathbf{y}^n \right)} y_i y_j$$

Eğer bolumun üstünü ve altını Z ile bösek,

$$= \sum_h \frac{\exp \left(\frac{1}{2} \mathbf{y}^{n\top} W \mathbf{y}^n \right) / Z}{\sum_h \exp \left(\frac{1}{2} \mathbf{y}^{n\top} W \mathbf{y}^n \right) / Z} y_i y_j$$

Üst kısım $P(\mathbf{y}; W)$ yani $P(\mathbf{x}, h; W)$ alt kısım $P(\mathbf{x}; W)$ olmaz mı? Evet! Ve,

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

olduguna gore,

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

elde ederiz. Bunu da $\langle y_i y_j \rangle_{P(h|x^n; W)}$ olarak yazabiliriz.

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

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

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

$$\sum_{n=1}^N \left(\frac{\partial \ln Z_{x^{(n)}}}{\partial w_{ij}} - \frac{\partial \ln Z}{\partial w_{ij}} \right) = \sum_{n=1}^N \langle y_i y_j \rangle_{P(h|x^n; W)} - \langle y_i y_j \rangle_{P(y; W)} \quad (4)$$

Bu formulu de BM icin yaptigimiz gibi bir gradyan guncelleme formulune donusturebiliriz. Guncelleme formulunun hangi hesapları gerektirdigine gelince; İlk 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, ozellikle x, h sarti icin; 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 teknigi anlatmadan 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 kapatınca x 'ler "baglantısız" hale gelir.

Bu bagimsizlikten yola cikarak, daha once BM icin yaptigimiz gibi, olasiliklar su basit formulere donusur,

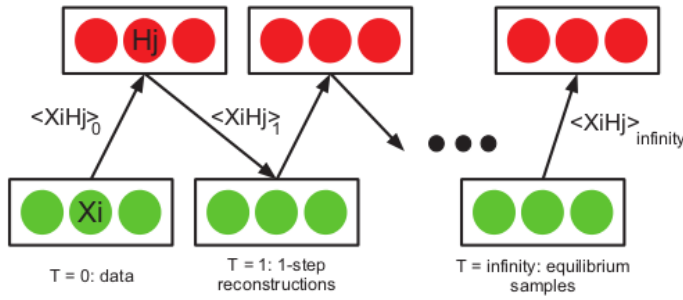
$$P(h_i = 1|x) = \sigma\left(\sum_{j=1}^m w_{ij} x_j\right)$$

$$P(x_i = 1|h) = \sigma\left(\sum_{j=1}^n w_{ij} h_j\right)$$

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 ornekleme zincirini "yeterince uzun sure" isletmek gerekir ki dagilimin olasi noktaları gezilmiş olsun. Fakat, özellikle yüksek boyutlu durumlarda, tüm x, h kombinasyonlarını düşünürsek bu çok büyük bir alandır ve gezme işlemi çok, çok uzun zaman alabilir. Bunun yerine, ve üstteki bağımsızlık formüllerinden hareketle CD yöntemi bulunmuştur, bu yonteme gore ornekleme verinin *kendisinden* baslatilir (kiyasla pur Gibbs rasgele bir noktadan), dongunun mesela ilk adiminda x^0 (ki bu tum verinin tamamı), baz alınarak $p(h^0|x^0)$ hesaplanır (üstteki sigmoid), onun üzerinden h^0 ornekleme alınir, sonra h^0 baz alınir ve x^1 uretilir, bu boyle devam eder. Boylece mumkun h ve x 'ler gezilmiş olur. Not: Surekli verinin kendisine donmenin de bazi dezavantajlari var, ki bunu yapmadan pur Gibbs orneklemesine daha yakin bir yaklasim Kalici (Persistent) CD adli yontemdir (tabii baska yaklasiksal numaralar kullanarak).

Literaturde su sekildeki resim bolca gorulebilir,



Bu yontem pur Gibbs orneklemesine kiyasla çok daha hizli isler ve iyi sonuclar verir. Teorik olarak niye isledigi [1,2,4] makalelerinde bulunabilir. CD aslında (4) hedef formülünü degil baska bir hedefi optimize ediyor, fakat sonuc orijinal gradyan adimlariinin yapmak istedigine yakin. [3] baz alınarak, su sekilde kodlanabilir,

```
import numpy as np
import itertools

class RBM:

    def __init__(self, num_hidden, learning_rate, max_epochs, num_visible=10):
        self.num_hidden = num_hidden
        self.num_visible = num_visible
        self.learning_rate = learning_rate
        # Agirlik matrisi W'yi yarat (buyukluk num_visible x num_hidden),
        # bunun icin Gaussian dagilimi kullan, ortalama=0, standart sapma 1.
        self.weights = 0.1 * np.random.randn(self.num_visible, self.num_hidden)
        # Egilim (bias) icin ilk satir ve ilk kolona 1 degeri koy
        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):
    """
    Makinayi egit

    Parametreler
    -----
    data: Her satirin "gorunen" veri oldugu bir matris
    """

    num_examples = data.shape[0]

    # Ilk kolona egilim / meyil (bias) olarak 1 ekle
    data = np.insert(data, 0, 1, axis = 1)

    for epoch in range(self.max_epochs):
        # Veriyi baz alarak gizli veriyi uret.
        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:])

        # Dikkat, baglantilari hesaplarken h tabakasinin aktivasyon
        # olasiliklerini kullaniyoruz h'nin kendi degerlerini (0/1)
        # kullanmiyoruz. Bunu da yapabildik, daha fazla detay icin
        # Hinton'un "A Practical Guide to Training Restricted Boltzmann
        # Machines" makalesine bakilabilir
        pos_associations = np.dot(data.T, pos_hidden_probs)

        # Simdi gorunen veriyi gizli veriyi baz alip tekrar uret
        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)

        # Yine ayni durum, aktivasyon olasiliklari kullaniliyor
        neg_associations = np.dot(neg_visible_probs.T, neg_hidden_probs)

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

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

    def run_visible(self, data):
        """
        RBM'in egitilmis olduguna farz ederek, gorunen veri uzerinde
        RBM'i islet, ve h icin bir orneklem al

```

```

Parametreler
-----
data: Her satirin gorunen veri oldugu bir matris

Returns
-----
hidden_states: data icindeki her satira tekabul eden gizli h verisi
"""
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 run_hidden(self, data):
    """
    run_visible'a benzer, sadece gizli veri icin gorunen veri uret
    """

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

```

RBM ve Siniflama

Siniflama (classification) islemi yapmak icin BM orneginde bir normalizasyon sabiti hesaplamistik. Burada degisik bir yoldan gidecegiz; ki bu yol ileride Derin Ogrenim icin faydali olacak.

Egittikten sonra bir RBM, icindeki W 'ye gore, herhangi bir "gorunur" veri nok-tasi x icin bir gizli bir h uretebilir. Bunu ustteki formulasyondan zaten biliyoruz. Ayrica, h genellikle daha az boyutta olduguna gore (hatta olmasa bile) bu h ureti-minin bir tur transformasyon oldugu, veri uzerinde bir "ozetleme" yaptigi iddia

edilebilir. O zaman teorik olarak, görünür veri yerine, görünür veriden üretilen gizli veriyi kullanırsak ve bu veriyi alıp başka bir sınıflayıcıya verirsek, mesela lojistik regresyon gibi, bu h'ler ve etiketler üzerinden takip edilen bir (supervised) eğitim yapabiliriz. Yani, önce RBM eğitiyoruz, tüm verinin h karşılığını alıyoruz, sonra bunları lojistik regresyona veriyoruz. Alttaki kodda bunun örneğinin görülebiri.

Bu kod, ayrıca, k-Katlama (k-fold) tekniğini uyguluyor, veriyi 3 parçaya bölüp sırasıyla tüm parçaları birer kez test, diğerlerini eğitim verisi yapıyor, böylece verinin tamamı üzerinden eğitim/test yapmış olunuyor. Sonuç,

```
import cPickle, numpy as np, rbm
from sklearn.linear_model import LogisticRegression

from sklearn.base import BaseEstimator
from sklearn.base import TransformerMixin

class SKRBM(BaseEstimator, TransformerMixin):
    """
    Bu sınıf bizim RBM kodu ile sklearn arasında bağlantıyı kurmak
    için yazıldı, tek yaptığı parametreleri alıp RBM'i çağırmak, bu
    bağlantı aslında KFold için muhakkak lazım değil (run_visible ile
    de bu işi halledebilirdik), fakat GridSearch kullanmak gerekirse
    class'ın içinde transform() çağırışının olması lazım.
    """
    def __init__(self, n_components=-1, learning_rate=-1, n_iter=-1, num_visible=-1):
        self.n_components = n_components
        self.learning_rate = learning_rate
        self.n_iter = n_iter
        self.num_visible = num_visible
        self.rbm_ = rbm.RBM(num_hidden=self.n_components,
                             learning_rate=self.learning_rate,
                             max_epochs=self.n_iter, num_visible=num_visible)

    def transform(self, X):
        return self.rbm_.run_visible(X)

    def fit(self, X, y=None):
        self.rbm_.fit(X)
        return self

X = np.loadtxt('../stat/stat_mixbern/binarydigits.txt')
Y = np.ravel(np.loadtxt('../stat/stat_mixbern/binarydigitlabels.txt'))

np.random.seed(0)

from sklearn.cross_validation import KFold
scores = []
cv = KFold(n=len(X), n_folds=3)
for train, test in cv:
    X_train, Y_train = X[train], Y[train]
    X_test, Y_test = X[test], Y[test]
    r = SKRBM(n_components=40, learning_rate=0.3, n_iter=500, num_visible=64)
    r.fit(X_train)
```

```

clf = LogisticRegression(C=1000)
clf.fit(r.transform(X_train), Y_train)
res3 = clf.predict(r.transform(X_test))
scores.append(np.sum(res3==Y_test) / float(len(Y_test)))

print np.mean(scores)

```

! python test_rbmfold.py
1.0

Basari yuzde 100! Alta karsilastirma icin KNN teknigi kullandik,

```

import cPickle, numpy as np, gzip
from sklearn import neighbors
from sklearn import svm
from sklearn.tree import DecisionTreeClassifier
from sklearn.cross_validation import train_test_split
from sklearn.linear_model import LogisticRegression

X = np.loadtxt('../stat/stat_mixbern/binarydigits.txt')
Y = np.ravel(np.loadtxt('../stat/stat_mixbern/binarydigitlabels.txt'))

from sklearn.cross_validation import KFold
scores = []
cv = KFold(n=len(X), n_folds=3)
for train, test in cv:
    X_train, Y_train = X[train], Y[train]
    X_test, Y_test = X[test], Y[test]
    clf = neighbors.KNeighborsClassifier(n_neighbors=1)
    clf.fit(X_train, Y_train)
    scores.append(clf.score(X_test, Y_test))

print np.mean(scores)

```

! python test_knnfold.py
0.98009506833

Kaynaklar

- [1] Hinton, G., *Training Products of Experts by Minimizing Contrastive Divergence*
- [2] Louppe, G., *Collaborative filtering, Scalable approaches using restricted Boltzmann machines*, Master Tezi, 2010
- [3] <https://github.com/echen/restricted-boltzmann-machines>
- [4] Tieleman, Hinton, *Using Fast Weights to Improve Persistent Contrastive Divergence*