Sistemas de Inteligencia Artificial
Autoencoders

Centro de Inteligencia Computacional

2024

Autoencoders

Autoencoders

- Arquitectura de Redes Neuronales No Supervisadas.
- Reducción de la Dimensionalidad.
- Son la base de algunos modelos de redes neuronales generativas.

¿Que pasa si la salida final de una MLP es una entrada para otra MLP inversa?

Autoencoder

Arquitectura

- Dos redes neuronales artificiales de perceptrones multicapa, donde la salida de la primera red se conecta con la entrada de la segunda.
- La segunda red tiene la distribución invertida de neuronas en las capas y como salida tiene la misma dimensión que la entrada de la primera red.

Formulación General

- $Z = f(X) = h(XW + b)$
- $X' = g(Z) = h(ZV + p)$

Esto debe satisfacerse de manera que $L(X, X') = ||X - X'||^2$.

Autoencoder

Aprendizaje

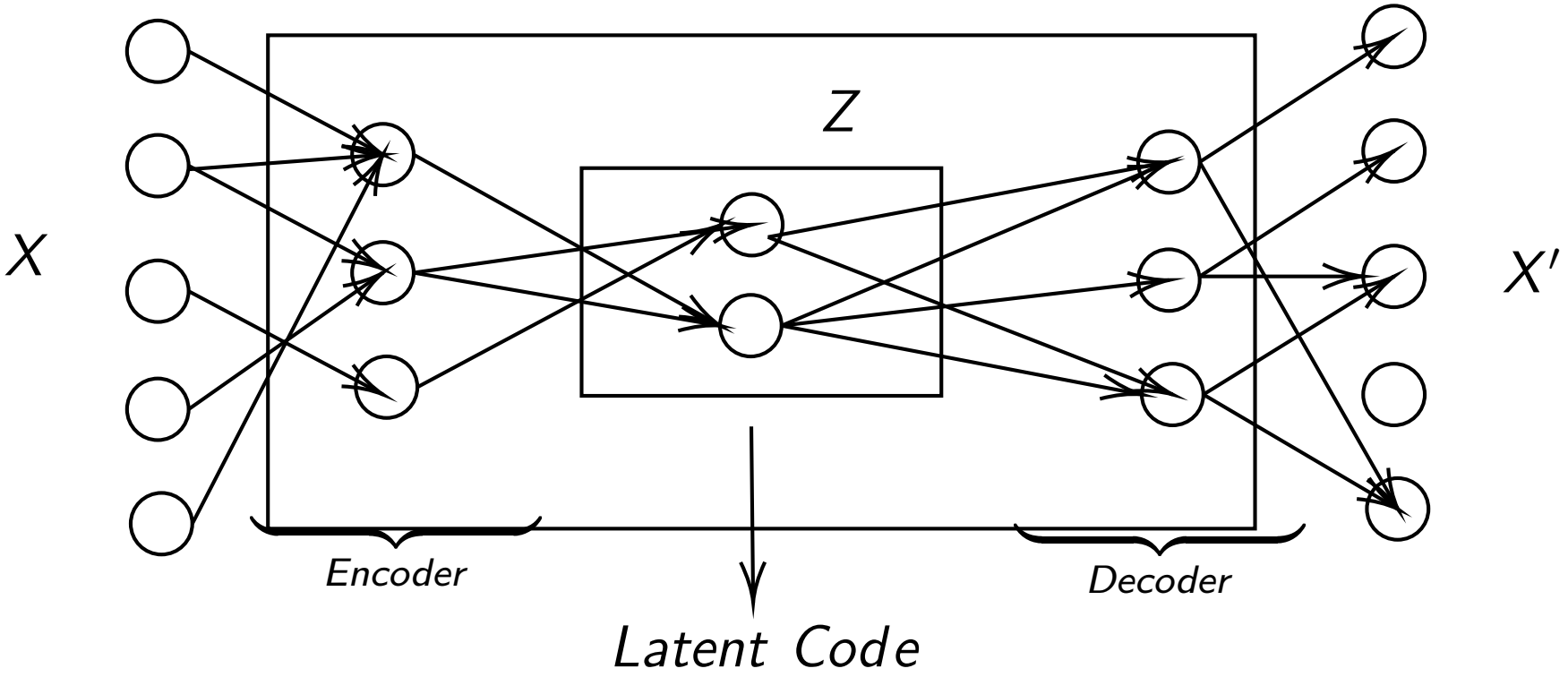
- La red es entrenada por cualquier método de aprendizaje que sirva para un Multi-Layer Perceptron, pero para cada patrón de entrada X se pone como salida esperada el mismo patrón X.
- La red por lo tanto aprende los pesos sinápticos que generan en la salida X', el mismo valor presentado a la entrada.

Formulación General

- $Z = f(X) = h(XW + b)$
- $X' = g(Z) = h(ZV + b)$

Esto debe satisfacerse de manera que $L(X, X') = ||X - X'||^2$.

Función identidad



Autoencoder

¿Qué utilidad puede representar en definitiva una función identidad?

Restricciones

El chiste está justamente en que es posible agregar restricciones que fuercen al autoencoder a aprender algo útil de la distribución del set de datos. La restricción natural que tiene por la arquitectura es que al utilizar menos neuronas en la capa central, fuerza a encontrar una codificación más eficiente del conjunto de datos.

Autoencoder lineal

Descomposición Espectral

Repasando la clase de Aprendizaje No supervisado y PCA, si una matriz X es invertible y sus autovalores son reales, entonces la matriz puede ser diagonalizable y factorizarse

$$X = ELE^T \tag{1}$$

Donde L es la matriz diagonal formada por los autovalores y E es la matriz de filas formada por sus autovectores.

Autoencoder lineal

Descomposición en valores singulares

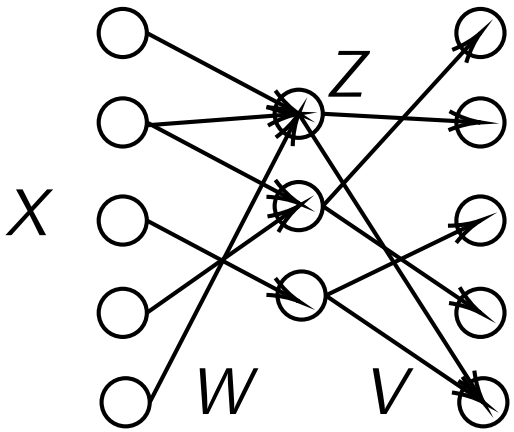
Para el caso de matrices no cuadradas, existe una operación similar pero más general que es la descomposición en valores singulares, SVD. Dada una matriz X de $n \times d$,

$$SVD(X) = \tilde{Z}\Sigma V^T \tag{2}$$

Donde $\tilde{Z}$ son los vectores columnas singulares de izquierda, Σ es una matriz diagonal positiva y V son los vectores singulares derechos. El cálculo de SVD se realiza minimizando

$$||X - \tilde{Z}\Sigma V^T||. \tag{3}$$

Autoencoder lineal



Una vez que el autoencoder aprende minimiza

$$J = ||X - ZV^T|| \tag{4}$$

$$X \approx ZV^T \tag{5}$$

- X: La matriz de datos de $n \times d$. Hay n datos de dimensión d.
- Z: La salida de la capa interna del autoencoder, del código de $n \times k$.
- V: La matriz de pesos sinápticos asociada al Decodificador de $k \times d$.

Autoencoder lineal

Lemma: PCA

La salida del código interno Z del autoencoder lineal son las salidas de las proyecciones de lo datos en los componentes principales.

Autoencoder lineal

$$J = ||X - ZV^T||$$
$$J = ||X - (\tilde{Z}\Sigma)V^T||$$

SVD

Si V^T, que tiene los pesos del decoder del Autoencoder, es ortonormal, entonces $X \approx ZV^T$ del Autoencoder puede verse como la descomposición en valores singulares $X \approx SVD(X) = \tilde{Z}\ \Sigma\ V^T$ con $\tilde{Z}\Sigma = Z$, ya que la descomposición de SVD surge de resolver la minimización de la Ecuación 4.

Autoencoder lineal

PCA

A su vez, por la descomposición espectral, con los autovectores de la matriz de covarianza $\frac{X^T X}{n-1}$, se puede obtener $\frac{X^T X}{n-1} = E\ L\ E^T$ donde E es la matriz de transformación de PCA con los autovectores.

Autoencoder lineal

Entonces, reemplazando X como la factorización por $X \approx SVD(X) = \tilde{Z}\,\Sigma\,V^T$:

Matriz de covarianza de X

$$\frac{X^TX}{n-1} = (\tilde{Z}\,\Sigma\,V^T)^T(\tilde{Z}\,\Sigma\,V^T)\frac{1}{n-1}$$
$$\frac{X^TX}{n-1} = (V^T)^T\Sigma^T\tilde{Z}^T\tilde{Z}\,\Sigma V^T\,\frac{1}{n-1}$$
$$\frac{X^TX}{n-1} = V\Sigma^T\Sigma V^T\frac{1}{n-1} = V\Sigma^2V^T\,\frac{1}{n-1}$$

Autoencoder lineal

Matriz de covarianza de X

$$\frac{X^T X}{n-1} = V\Sigma^2 V^T \ \frac{1}{n-1} = V\left(\frac{\Sigma^2}{n-1}\right) V^T$$

Pero por la descomposición espectral, esto es también igual a $E\ (L)\ E^T = \frac{X^T X}{n-1} = V\left(\frac{\Sigma^2}{n-1}\right) V^T$ por lo que si X tiene media cero,

- $\lambda_i = S_i^2/n-1$, con S_i los valores singulares de Σ.
- $V = E$

Entonces al transformar los datos con PCA
$T_{PCA}(X) = X\ E = (\tilde{Z}\ \Sigma\ \underbrace{V^T}_{I})\ E = \tilde{Z}\ \Sigma = Z$ que corresponde a la salida del espacio latente.

Autoencoder lineal

Lemma: PCA

La salida del código interno Z del autoencoder lineal son las salidas de las proyecciones de lo datos en los componentes principales.

$$T_{PCA}(X) = X\ E = Z \tag{6}$$

Autoencoder lineal

Reducción no lineal de la dimensionalidad

Esto no es una manera muy eficiente de obtener las proyecciones en los componentes principales, pero lo que permite es pensar al autoencoder como una extensión no lineal de la descomposición en componentes principales (cuando se usan funciones de activación no lineales). Es una asumpción fuerte.

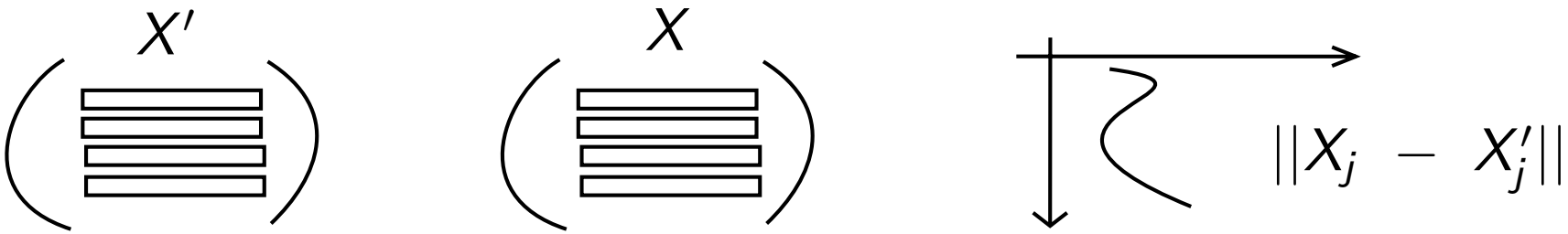
Autoencoder como herramienta

Compresión

Mecanismo de Compresión

Este fue el uso original que se le dio a los autoasociadores, como mecanismos de compresión de información.

Detección de Outliers



Detección de outliers

- Se entrena al autoencoder con el conjunto de entrenamiento.
- Luego se lo somete a nuevas muestras que no necesariamente se encuentran en el conjunto.
- Se mide con alguna medida la diferencia entre cada valor de entrada del autoencoder y los valores obtenidos en la salida.

DAE - Denoising autoencoder

Usos

El anglicanismo **Denoising** hace referencia a la eliminación del ruído. Como el autoencoder genera una aproximación de la matriz de datos X en base a $X \approx X' = Z\ V^T$ entonces esto permite utilizarse para eliminar cualquier ruído sobre la entrada X y recuperar en X' el original.

DAE - Denoising autoencoder

Eliminación de ruido

Ruido se le llama a perturbaciones sobre los datos que contaminan el contenido de información que se quiere recuperar. Hay muchos tipos diferentes de ruidos y son inherentes a cualquier proceso de obtención de información. Es el mal de todos, imposible de eliminar por completo.

Eliminación de ruido

Los DAE pueden utilizarse para eliminar ruido ya que la estructura interna del Encoder/Decoder intenta preservar el contenido de información más relevante en el conjunto de datos.

DAE - Denoising autoencoder

Procedimiento

La idea entonces es una vez aprendido un conjunto de datos, cuando aparecen nuevas muestras que pueden estar contaminadas con ruido, reemplazar la muestra ruidosa por la muestra obtenida en la salida del Decodificador.
Para esto, en vez de entrenar con los elementos obtenidos directamente del conjunto de datos, se modela el ruido, es decir, se lo caracteriza numericamente (e.g. salt-and-pepper) o en general con una función de distribución de probabilidad (e.g. Gaussiano, Rayleigh) y se agrega a los datos X generando una nueva instancia $\tilde{X}$. Sin embargo, la salida que se pone en la red corresponde al dato X sin alterar.

Regularización

Regularizar implica agregar una condición extra R sobre la función objetivo L que limita el espacio de búsqueda de las soluciones.

$$J = L + \lambda R = \min_{\phi} \frac{1}{N} ||Y - X\phi|| \quad \underbrace{(+\lambda ||f(\phi)||)}_{\text{Término Regularizador}} \tag{7}$$

Desalienta las soluciones complejas o extremas en un problema de optimización. El parámetro de regularización λ se usa justamente para ajustar la importancia que se le da a al término regularizador (Tikhonov Regularization).

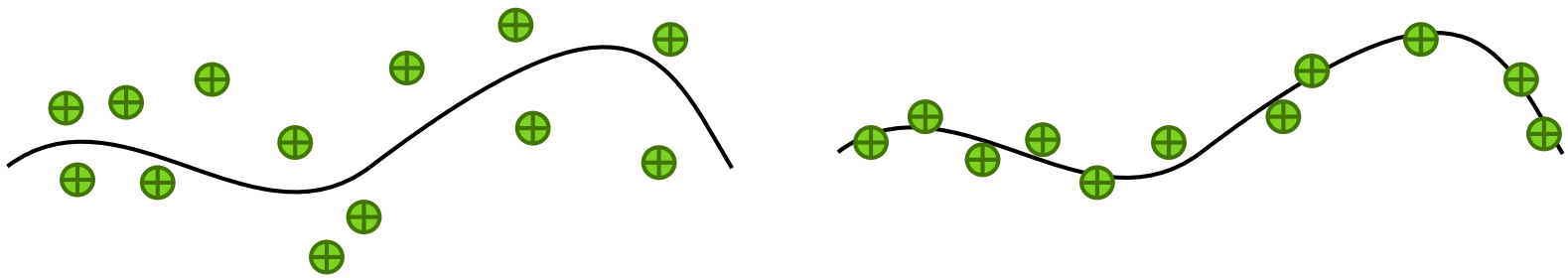
CAE - Contractive Autoencoder

Los CAE agregan un término regularizador a las funciones de costo, que le resta sensibilidad a la entrada, intentando aprender representaciones más simples y crudas de los datos.

$$\|J_h(X)\|_F^2 = \sum_{ij} \left(\frac{\partial h_j(X)}{\partial X_i} \right)^2$$

CAE - Contractive Autoencoder

De esa manera por ejemplo, datos en dos dimensiones pueden reducirse a una dimensión, como una representación de una función de dos dimensiones, que pasa a una representación paramétrica (con un solo parámetro t).



SAE - Sparse Autoencoder

Los SAE por otro lado, utilizan una arquitectura donde el espacio latente tiene más dimensiones de la entrada. Para lograr imponer restricciones que permitan adquirir información de la estructura de los datos, imponen un término regularizador que favorece la presencia de esparcicidad, esto es, que un número de neuronas del espacio latente estén en 0 anuladas.
Los SAE se pueden utilizar para realizar **Feature Learning**, es decir para identificar caracterizaciones o transformaciones de los datos que son útiles para discriminarlos.
La Esparcididad se impone mediante una restricción umbralizada, que de no superarse desactiva todas las neuronas involucradas.

Deep Generative Model

Deep Generative Model

Modelado Generativo o Discriminativo

- **Modelo Discriminativo**: es crudo en los datos. Por ejemplo, una ANN busca la hiper-sábana que separa los datos en dos clases sin importarle cómo se generan (o como se podrían) generar esos datos.
- **Modelo Generativo**: establece cierta relación causal. El modelo hipotetiza cómo se generan los datos en sí.

Deep Generative Model

Modelo Generativo

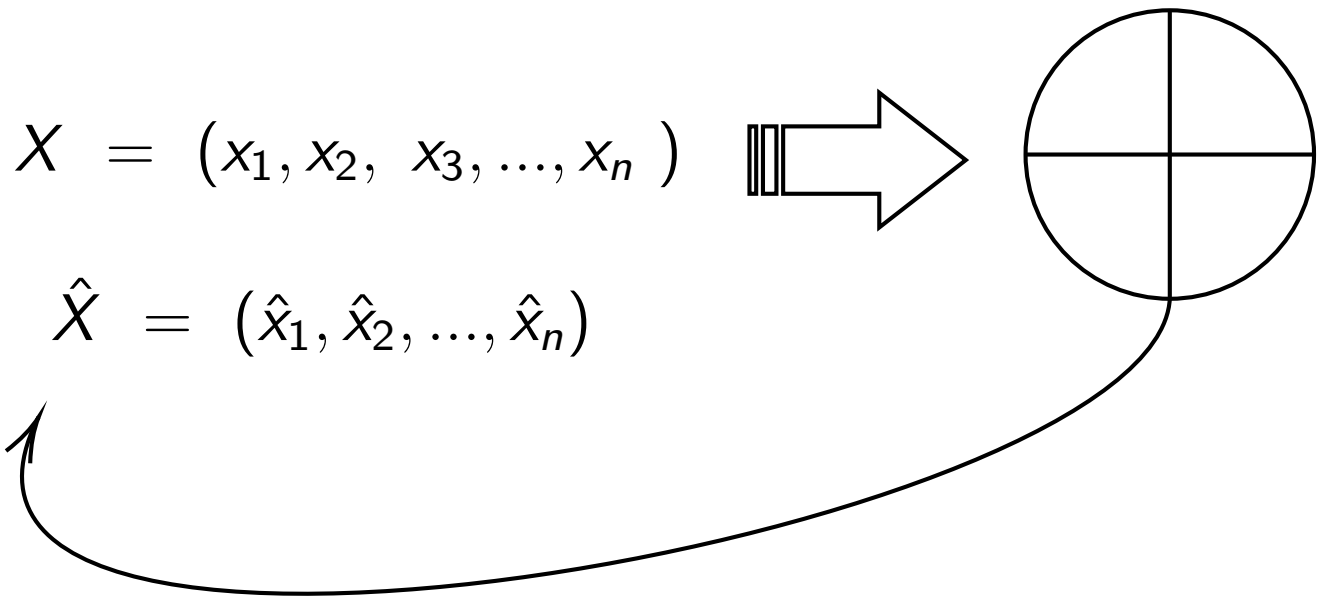
La pregunta que surge entonces es si es posible utilizando una red neuronal, implementar un mecanismo generativo causal, que me permita obtener muestras que comparten características representativas de un conjunto de datos.

¿Con lo que vieron hasta ahora, cómo se imaginan un mecanismo así?

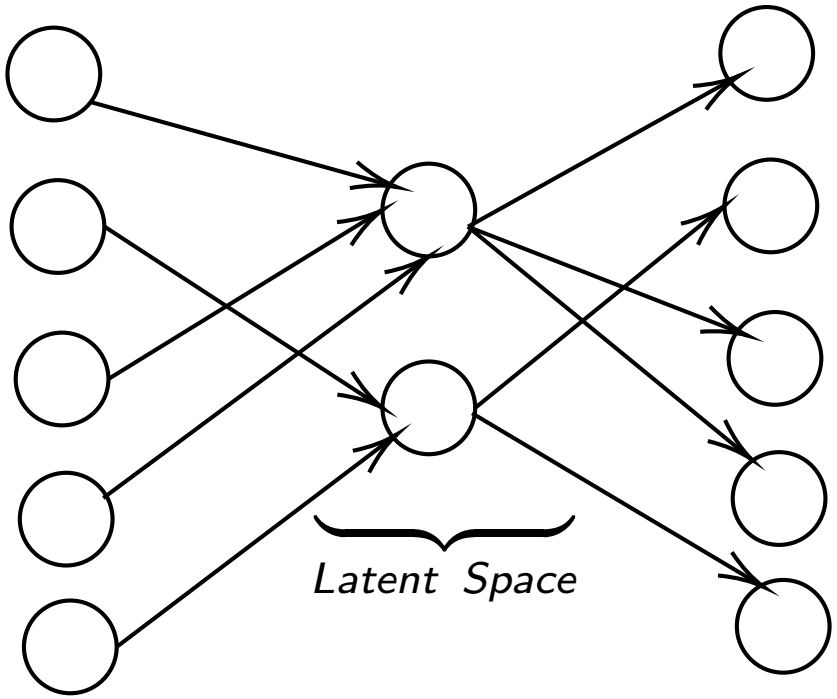
Modelo Generativo

$$X = (x_1, x_2, x_3, ..., x_n)$$

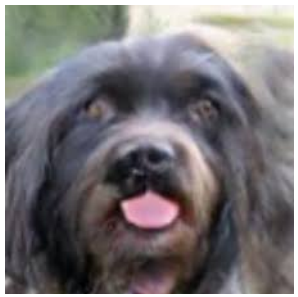
$$\hat{X} = (\hat{x}_1, \hat{x}_2, ..., \hat{x}_n)$$

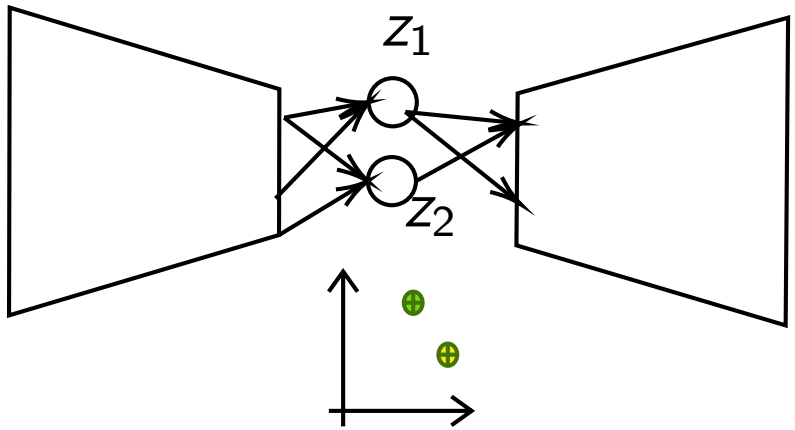


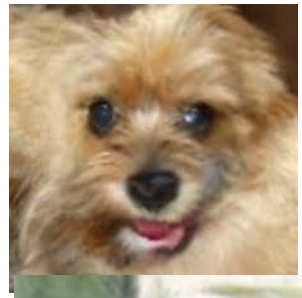
Generative Autoencoder

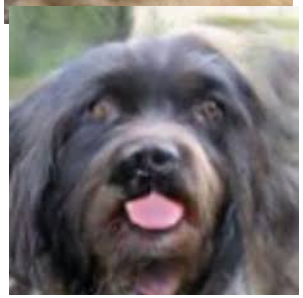


Generative Autoencoder

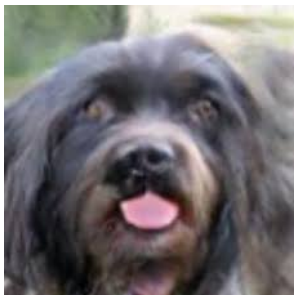








Generative Autoencoder: Concept Vector

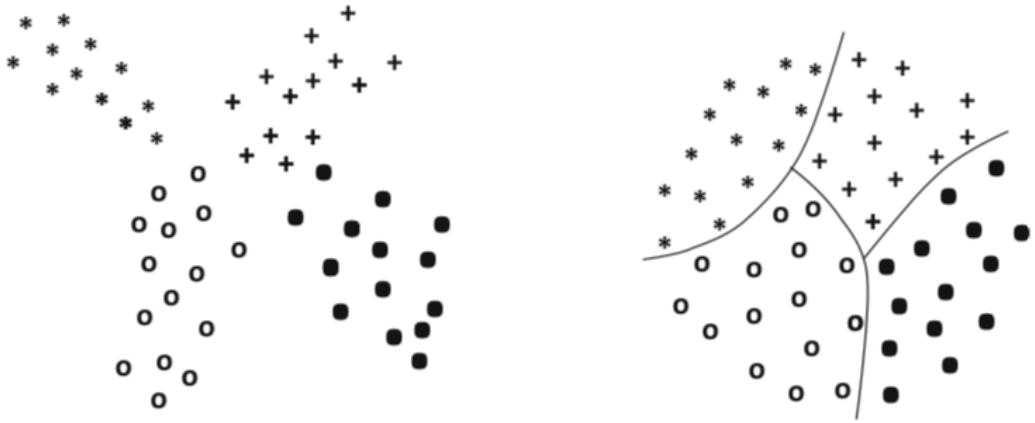


Generative Autoencoder

Algoritmo del Autoencoder Generativo

- Utilizamos un Autoencoder para codificar en el Espacio Latente todos los patrones.
- Luego dejamos de lado el Encoder, para movernos dentro de un vector de representación.
- Generamos muestras sucesivas especificando de manera directa los valores de z_1 y z_2.
- Para cada tupla de valores de z_i obtenemos una nueva muestra generada por el Decodificador.

Generative Autoencoder



Generative Autoencoder

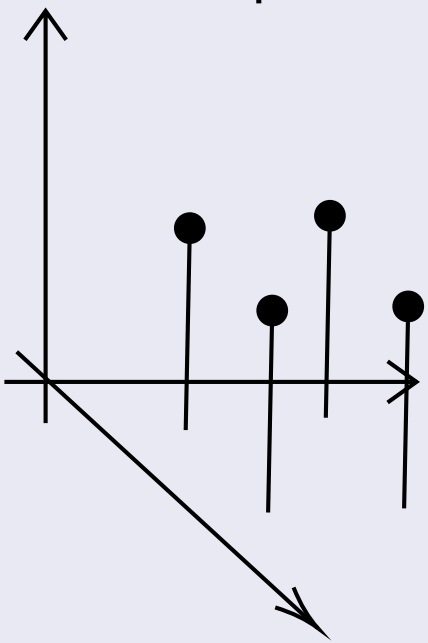
La conquista del espacio latente

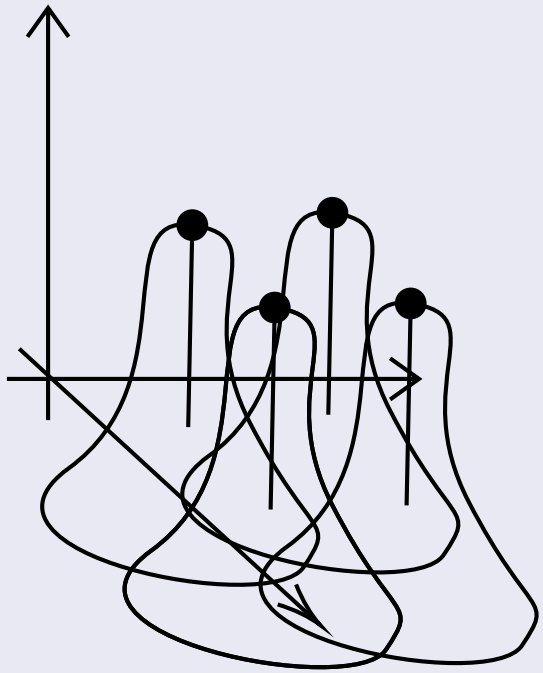
Necesitamos entonces algo más que nos permita **capturar** lo que pasa en el espacio latente, para poder generar nuevas muestras **válidas** a medida que nos movemos en ese espacio latente.

Generative Autoencoder

La conquista del espacio latente

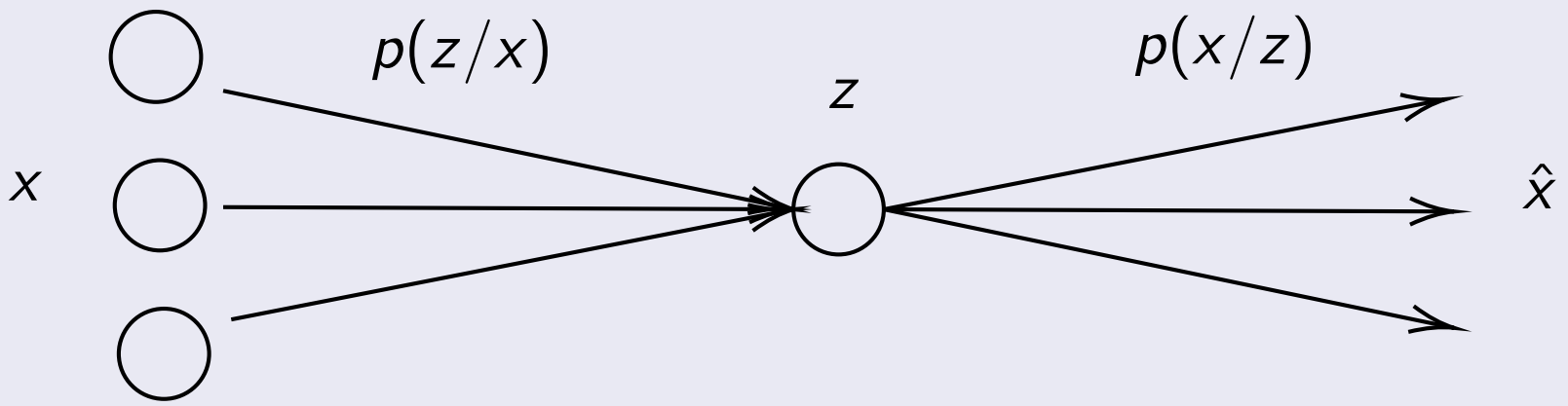
Una manera de resolver esto, es darle una estructura estadística al espacio latente. Es decir en vez de ver la salida que se obtiene para un único punto de z, ver las salidas que se obtienen para un conjunto de puntos.





Generative Autoencoder

La conquista del espacio latente



Repaso: Aproximación de una pdf

¿Si tengo un generador de números pseudoaleatorios que se corresponde con una distribución de probabilidad uniforme, y tengo una p.d.f., ¿ Cómo puedo usar el generador para generar números aleatorios que se corresponden con la p.d.f. ?

Inverse Sampling Theorem

$$Y\ U[0,1], F \text{ invertible y } F = CDF(pdf()),$$
$$X = F^{-1}(Y) \text{ tiene } CDF(X) = F$$

$$Y\ U[0,1], F = CDF(pdf()), X = \inf_x\{x : F(x) \geq Y\}$$

Aproximación de una pdf

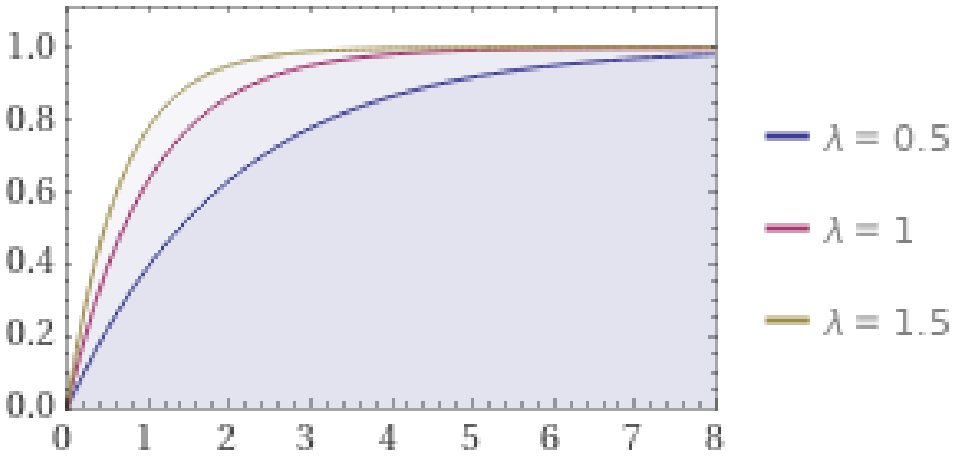
Eligen un valor de $Y\ U[0,1]$, se fijan que les da en $X = F^{-1}(Y)$. La distribución de esos X va a corresponder con la *pdf* en cuestión.

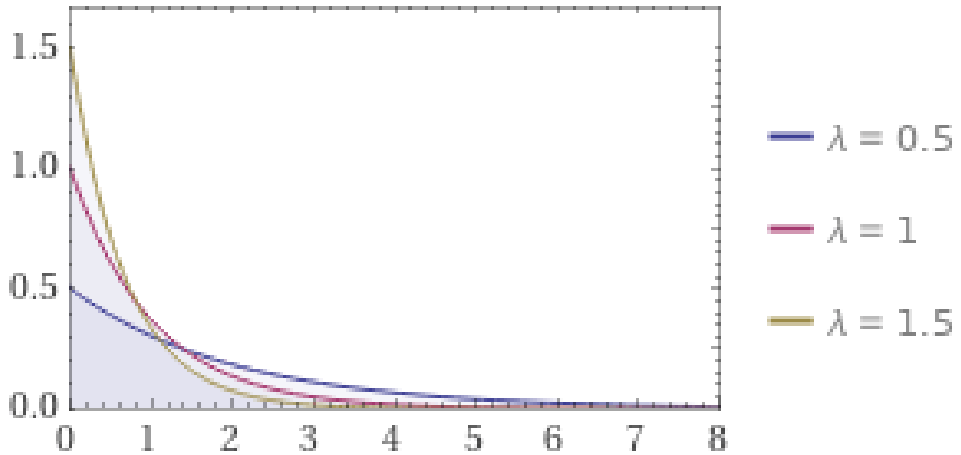
Inverse Sampling Theorem

$$Y\ U[0,1], F \text{ invertible y } F = CDF(pdf()),$$
$$X = F^{-1}(Y) \text{ tiene } CDF(X) = F$$

$$Y\ U[0,1], F = CDF(pdf()), X = \inf_x\{x : F(x) \geq Y\}$$

Aproximación de una p.d.f.





Aproximación de una p.d.f.

Teorema Central del Limite

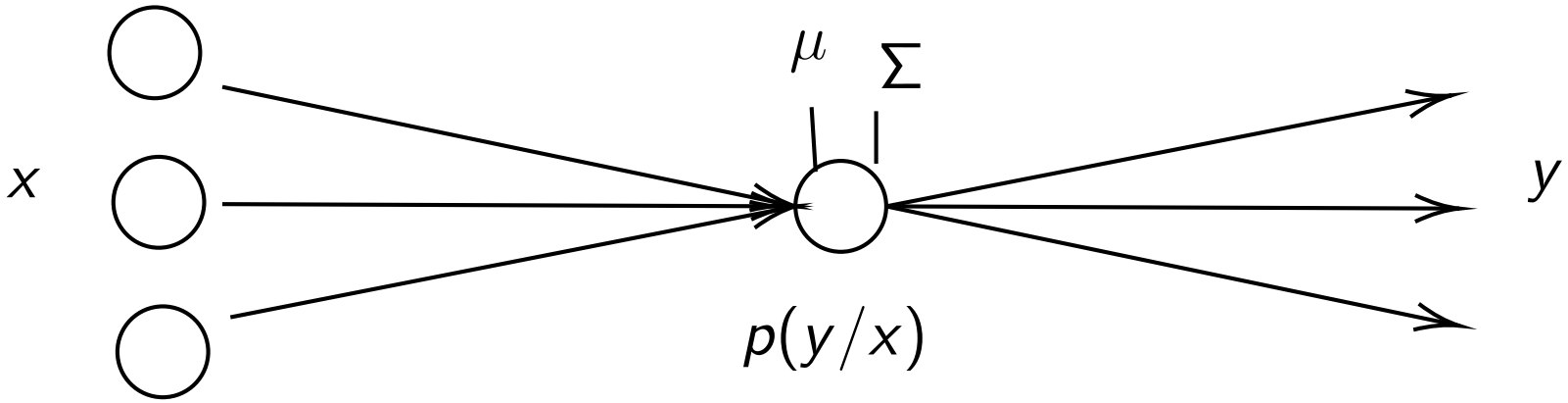
Para el caso de Gaussianas, se puede utilizar el TCL, obtener un número grande de $y \in U[0,1]$ y con eso generar correspondiente $N(\frac{n}{2}, \frac{n}{12})$.

Stochastic Feedforward Neural Networks [17]

Ahora, ¿ Cómo podríamos hacer eso con una red neuronal ?

Una red de una capa oculta es un aproximador universal[17] puede representar cualquier función computable (Arbitrary Continuos Functions, Cybenki's Theorem). Entre otras cosas, puede representar una función estocástica, regida por una p.d.f.

Stochastic Feedforward Neural Networks



Reparametrization Trick

Ahora, ¿ Cómo se construye la capa estocástica ?

La clave está en el **reparametrization trick** haciendo que el valor de z se calcula en función de $\bar{\mu}$ y de $\bar{\Sigma}$.

$$z = h(\bar{X}) = \epsilon \odot \bar{\Sigma}(\bar{X}) + \bar{\mu}(\bar{X}) \tag{8}$$

Colab - Reparametrization Trick

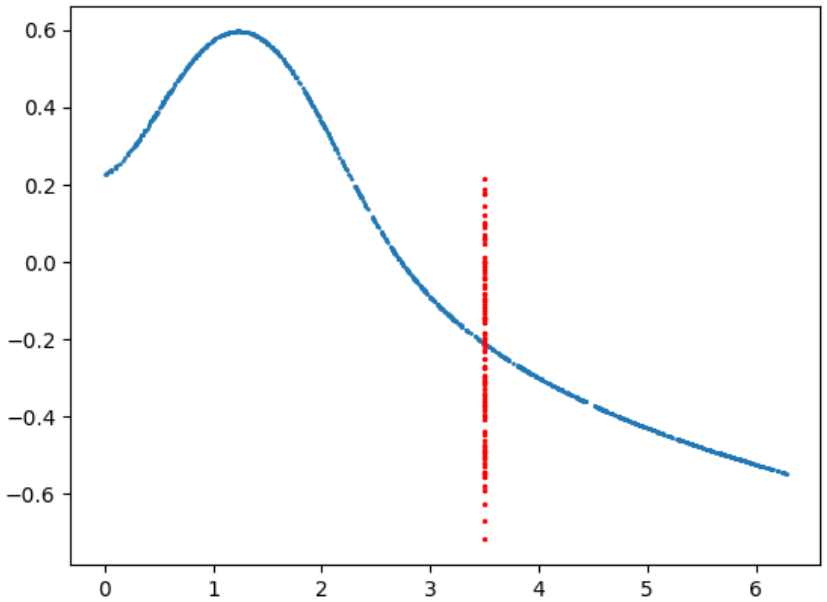
https://colab.research.google.com/drive/1N8HMJTNgCX0flDEwbx9Um6hD1D1vS1Ha?usp=sharing

Stochastic Functions[19]

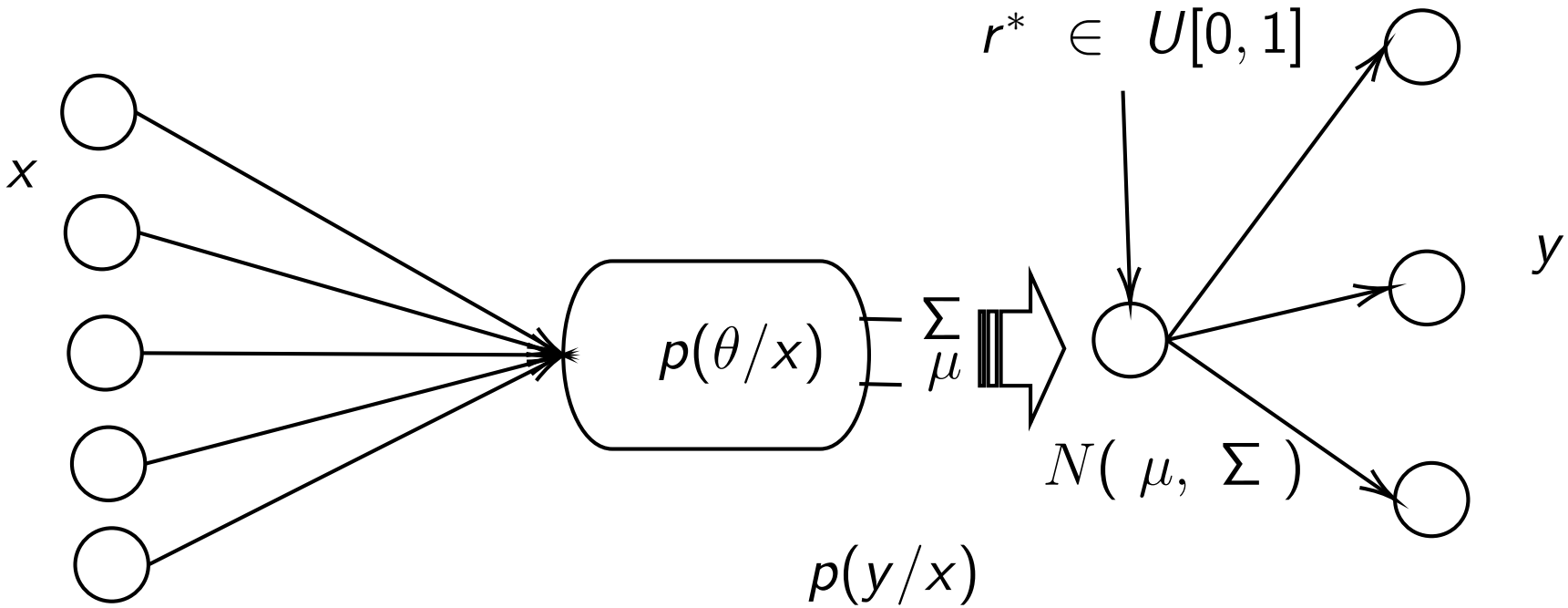
Una función donde la asignación de x a y es estocástica, regida por una p.d.f. condicional.

$$f(x) = L(x) + \epsilon(x)$$

$y = f(x)$ tal que, dado x, $y = f(x)$ según $p(y/x)$.



Stochastic Feedforward Neural Networks



Repaso: Teoría de la Información

Variable aleatoria: $X = x_i$

Información: $I = -\log p(x_i)$

Entropía: Más o menos, cuanta info tienen todos los estados posibles que puede tomar x. Promedio ponderado.

$H = \mathbb{E}_{p(x_i)} I(x_i) = -\sum p(x_i) \log p(x_i)$

Información Mutua:

$I(x, y) = H(y) - H(y/x) = \sum_x \sum_y p(x, y) log \frac{p(x,y)}{p(x)p(y)}$

$H(x) = I(x, x)$, y se tiene que,

- $I = 0$ implica que $p(x) = 1$ Certeza !
- $I > 0$ algo de información
- $I(x_k) > I(x_i) \Rightarrow P_k < P_i$, lo más raro (menos probable) aporta más información.

Repaso: Teoría de la Información

La entropía es mínima, cero, cuando es una situación de total certeza (teniendo en cuenta que $\lim_{p \to 0^+} p \log p = 0$), y es máxima, cuando todos los eventos son equiprobables (probabilidad uniforme).
$0 <= H(x) <= log(2k+1)$
Entropía condicional: $H(x/y) = H(x,y) - H(y)$
Entropía conjunta: $H(x,y) = \sum_{i=1}^{m} \sum_{j=1}^{m} p(x_i, y_i) \log \frac{1}{p(x_i, y_i)}$

Repaso: Teoría de la Información

Cross Entropy

$$H_p(q) = -\sum_{k=1} q(y_k) \log p(y_k)$$

Binary Cross Entropy

$$H_p(q) = -\frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} \{(y_i) \log p(y_i) + (1 - y_i) \log(1 - p(y_i))\}$$

$q(y_k) = y_i = 0|1$, y representa el label, $p(y_i), 1..N$ es la probabilidad asignada a ese label para la muestra i. Binary Cross Entropy sirve como una función para estimar cuál es la efectividad de un clasificador que asigna el label y a cada elemento de $1..N$ con probabilidad $p(y_k)$. Un clasificador perfecto que estima y_i con probabilidad 1, genera un valor de binary cross entropy de cero.

KL: Kullback-Leibler Divergencia ó Entropía relativa

Es una "norma"(en rigor no) que permite ver la distancia entre distribuciones de probabilidad, i.e. si tiende a cero implica que las distribuciones son parecidas. Una medida de similaridad.

KL

$$KL(q||p) = -\sum_{x_i} q(x) log \frac{q(x)}{p(x)}$$

donde $p(x)$ es la referencia a la que se compara $q(x)$.

KL: Kullback-Leibler Divergencia ó Entropía relativa

$$KL(q||p) = -\sum_{x_i} q(x) log \frac{q(x)}{p(x)}$$

Propiedades:

- $KL(q||p) \neq KL(p||q)$
- $KL(q||q) = 0$
- $KL(q||p) \geq 0$
- $KL(q||p) = H_p(q) - H(q) \geq 0$

Deep Generative Model
Variational Autoencoder

Deep Generative Model

VAE - Variational Autoencoder

Los VAE son la convergencia de dos ideas.

- Una estimación variacional de un modelo generativo[14, 9, 6, 11].
- Una solución a esa estimación basada en dos redes neuronales feedforward acopladas, un Encoder y un Decoder, que conforman un Autoencoder.

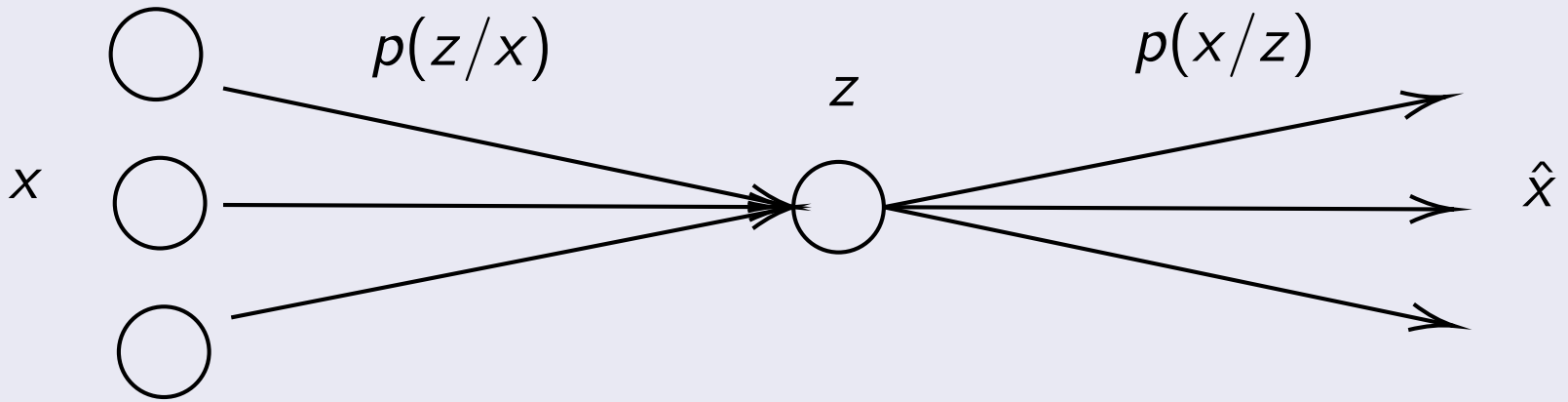
Inferencia Variacional

Inferencia Variacional

Los métodos variacionales son estrategias de la física estadística que se basa en establecer una función de costo la cual es mínima en la solución verdadera hipotética, pero que al plantear soluciones alternativas, generalmente paramétricas, es posible minimizando la función evaluar y encontrar una solución posible cada vez más buena.
Peterson, Anderson 1987 (Mean Field Theory) [2]
Jordan 1999 [18]
Hinton, Van Camp 1993 [8]

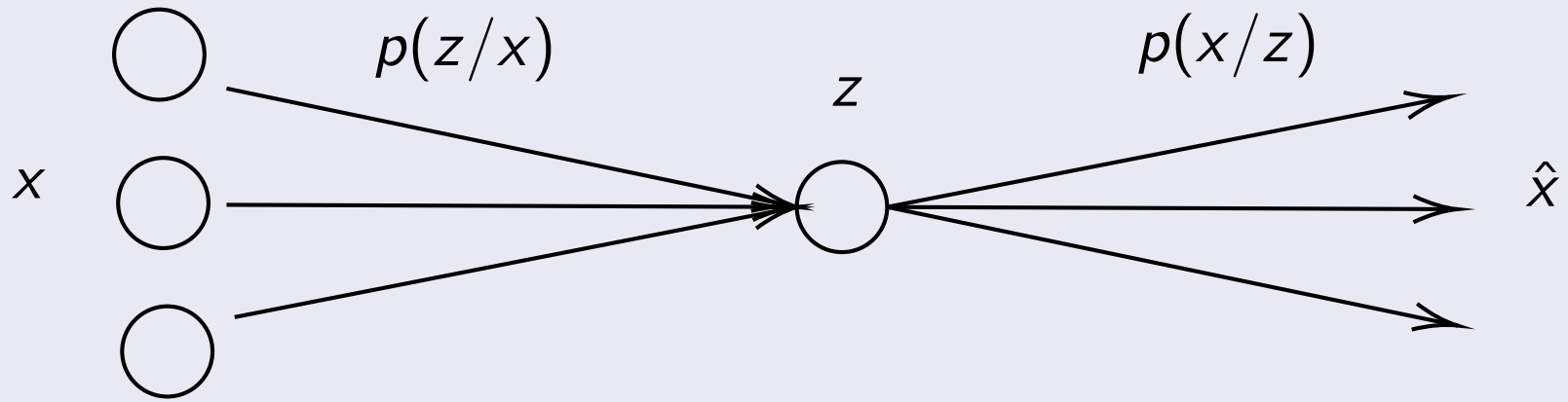
Generative Autoencoder

Función estocástica



Inferencia

Función estocástica



Inferencia Variacional

La inferencia variacional intenta resolver el problema de estimar una función de densidad de probabilidad (p.d.f.) aproximandola con funciones conocidas, y optimizando los parámetros de esa función mediante la solución de un problema de optimización.

Optimización del Problema de Inferencia

Objetivo

Tratar de aproximar $p(z/x)$ con una $q(z/x)$, siendo $q(z)$ una función que queremos (e.g. una Gaussiana) y **controlamos**.

Optimización del Problema de Inferencia

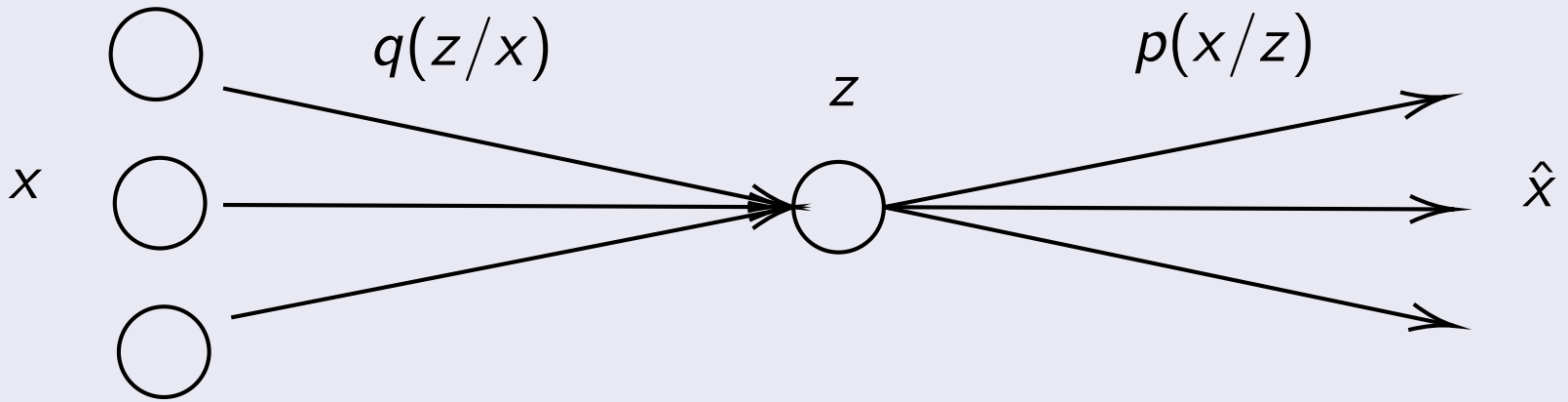
Objetivo

Tratar de aproximar $p(z/x)$ con una $q(z/x)$.

- $p(z/x)$: es la pdf de los datos que desconocemos, y que la vamos a aproximar por $q(z/x)$
- $q(z/x)$: es la pdf que vamos a **plantear** (a gusto) para aproximar $p(z/x)$.
- $q(z)$: vamos a asumir que los datos tienen una distribución normal alrededor de cada z.
- $p(z)$: vamos a asumir que efectivamente probabilisticamente cada x mapea multidimensionalmente normal a z. Que sea **normal** es una restricción sobre la $p(\cdot)$. Podría ser otra.

Generative Autoencoder

Función estocástica



Optimización del Problema de Inferencia

Objetivo

Tratar de aproximar $p(z/x)$ con una $q(z/x)$, siendo $q(z)$ una función que queremos (e.g. una Gaussiana) y **controlamos**.

Mimización

$$\text{mín } KL(q||p) = -\sum q(x) \log \frac{p(x)}{q(x)}$$

Optimización del Problema de Inferencia

$$
\begin{aligned}
KL(q(z)||p(z/x)) &= -\sum q(z) \log \frac{p(z/x)}{q(z)} \\
&= -\sum q(z) \log \frac{\frac{p(z,x)}{p(x)}}{\frac{q(z)}{1}} \\
&= -\sum q(z) \log \frac{p(z,x)}{q(z)} \frac{1}{p(x)} \\
&= -\sum q(z) \{\log \frac{p(z,x)}{q(z)} - \log p(x)\}
\end{aligned}
$$

Optimización del Problema de Inferencia

$$KL(q(z)||p(z/x))$$

$$= -\sum q(z)\{\log \frac{p(z,x)}{q(z)} - \log p(x)\}$$

$$= -\sum_z q(z) \log \frac{p(x,z)}{q(z)} + \sum_z q(z) \log p(x)$$

$$= -\sum_z q(z) \log \frac{p(x,z)}{q(z)} + \log p(x) \underbrace{\sum q(z)}_{1}$$

Optimización del Problema de Inferencia

$$KL(q(z)||p(z/x)) = -\sum_z q(z) \log \frac{p(x,z)}{q(z)} + \log p(x) \quad (9)$$

$$\log p(x) = KL(q(z)||p(z/x)) + \sum_z q(z) \log \frac{p(x,z)}{q(z)} \quad (10)$$

Optimización del Problema de Inferencia

$$\underbrace{\log p(x)}_{\text{fijo para x}} = \underbrace{KL(q(z)||p(z/x))}_{\text{lo más pequeño posible}} + \underbrace{\sum_{z} q(z) \log \frac{p(x,z)}{q(z)}}_{\mathcal{L}\text{, lo más grande posible}} \qquad (11)$$

Optimización del Problema de Inferencia

$$\mathcal{L} \leq \log p(x) \tag{12}$$

Variational Lower Bound, tiene que ser lo más grande posible y cuando $KL \rightarrow 0$ entonces es exactamente el $\log p(x)$.

Optimización del Problema de Inferencia

$$
\begin{aligned}
\mathcal{L} &= \sum q(z) \log \frac{p(x,z)}{q(z)} \\
&= \sum q(z) \log \frac{p(x/z)p(z)}{q(z)} \\
&= \sum q(z) \{\log p(x/z) + \log \frac{p(z)}{q(z)}\} \\
&= \sum q(z) \log p(x/z) + \sum q(z) \log \frac{p(z)}{q(z)}
\end{aligned}
$$

Optimización del Problema de Inferencia

$$\mathcal{L} = \sum q(z) \log p(x/z) \qquad + \sum q(z) \log \frac{p(z)}{q(z)}$$

$$\mathcal{L} = \mathbb{E}_{q(z)} \log p(x/z) \qquad -KL(q(z)||p(z))$$

Optimización del Problema de Inferencia

Ingredientes:
$p_\theta(z)$, $q_\phi(z)$

$$\theta^*, \phi^* = \text{arg máx}\, \mathcal{L}(\theta, \phi, x)$$

Podemos asumir una distribución para $p_\theta(z)$ simple, y elegir otra distribución para $q_\phi(z)$, que determinará la estructura del espacio latente. Con esto aproximamos $p_\theta(z/x)$ con $q_\theta(z/x)$. Al optimizar $\mathcal{L}$ se encontraron los valores para los parámetros de esas distribuciones, ϕ^*, θ^*.

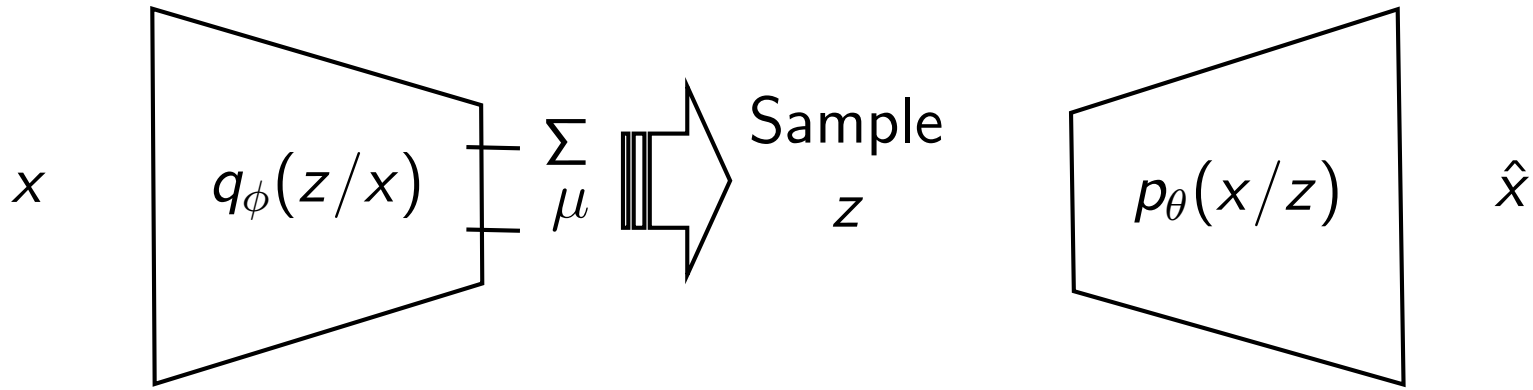
Resolución de un problema de optimización

Ingredientes:
$p_\theta(z)$, $q_\phi(z)$

$$\theta^*, \phi^* = \arg\max \mathcal{L}(\theta, \phi, x)$$

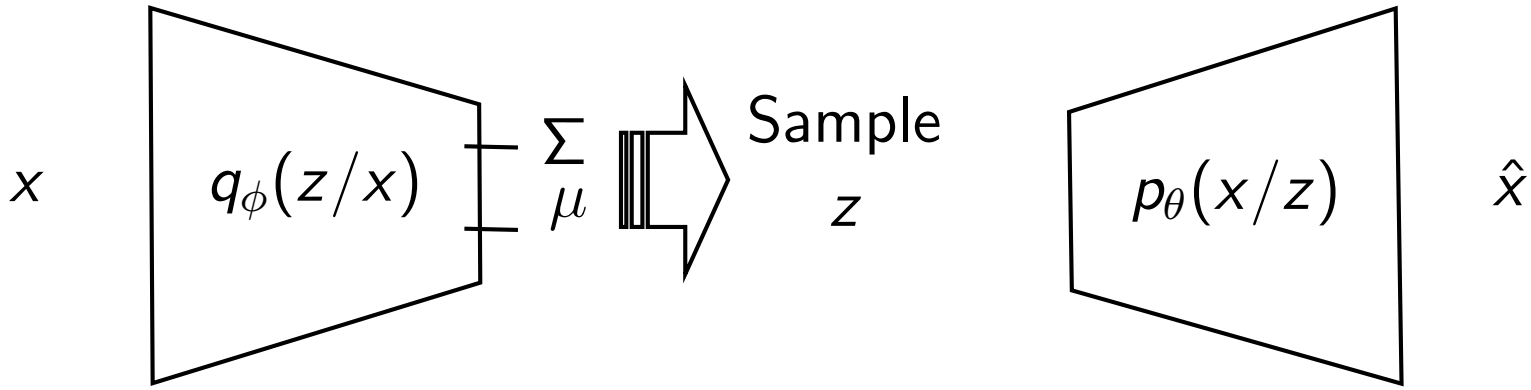
Es decir, necesito en $\mathcal{L}$ optimizar al mismo tiempo $p_\theta(x/z)$ para que dado un z sampleado cualquiera, me genere un valor de x válido, y necesito optimizar $q_\phi(z/x)$ para que dada un valor de x real me genere parámetros para poder samplear z. Todo a la vez.

Autoencoder Variacional



Puedo entonces usar un Encoder para dado un x real, generar parametros para una $q(z)$. De ahí sampleo z estocásticamente que luego se usa en el Decoder, que los tiene que volver a convertir en un $\hat{x}$. Esos parámetros que se estiman θ^*, ϕ^* son los pesos de las dos redes.

Autoencoder Variacional[5]



Lo bueno es que el funcional $\mathcal{L}$ ya incluye ambas cosas que se necesitan para optimizar la red.

$$-\mathcal{L} = \underbrace{-\,\mathbb{E}_{q(z)} \log p(x/z)}_{\text{Error de reconstrucción}} \qquad \underbrace{+\,KL(q(z)||p(z))}_{\text{Término regularizador}}$$

(maximizar $\mathcal{L}$ es equivalente a minimizar $-\mathcal{L}$).

Variational Autoencoder

Asumimos que:

- $p_\theta(z) = \mathcal{N}(0, \mathcal{I})$
- $q_\phi(z) = \mathcal{N}(\mu(x), \Sigma(x))$, con $\Sigma(x)$ diagonal.

Variational Autoencoder

Error de Reconstrucción:

$$p_\theta(x/z) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^k}\sqrt{\Sigma(z)}} exp\{(x-\mu(z))^T\Sigma(z)^{-1}(x-\mu(z))\}$$

$$\log p_\theta(x/z) \;\; \alpha \;\; (x-\underbrace{\mu(z)}_{\hat{x}})^T\Sigma(z)^{-1}(x-\underbrace{\mu(z)}_{\hat{x}})$$

Variational Autoencoder

Término Regularizador:

$$KL(q_\phi(z) = \mathcal{N}(\mu(x), \Sigma(x)) || p_\theta(z) = \mathcal{N}(0, \mathcal{I}))$$

$$\begin{aligned} KL &= \frac{1}{2}\{trace(\Sigma(x)) + \mu^T\mu(x) - k - \log(|\Sigma(x)|)\} \\ &= \frac{1}{2}\{\sum_k \Sigma(x) + \sum_k (\mu(x))^2 - \sum_k 1 - \log(\Pi_k \Sigma(x))\} \\ &= \frac{1}{2}\{\sum_k \Sigma(x) + \sum_k (\mu(x))^2 - \sum_k 1 - \sum_k (\log \Sigma(x))\} \\ &= \frac{1}{2}\sum_k (\Sigma(x) + (\mu(x))^2 - 1 - \log \Sigma(x)) \end{aligned}$$

Variational Autoencoder

Término Regularizador:

$$KL = \frac{1}{2}\sum_{k}(\Sigma(x) + (\mu(x))^2 - 1 - \log\Sigma(x))$$

Por razones numéricas, se reemplaza $\Sigma(x) = \exp(\Sigma(x))$.

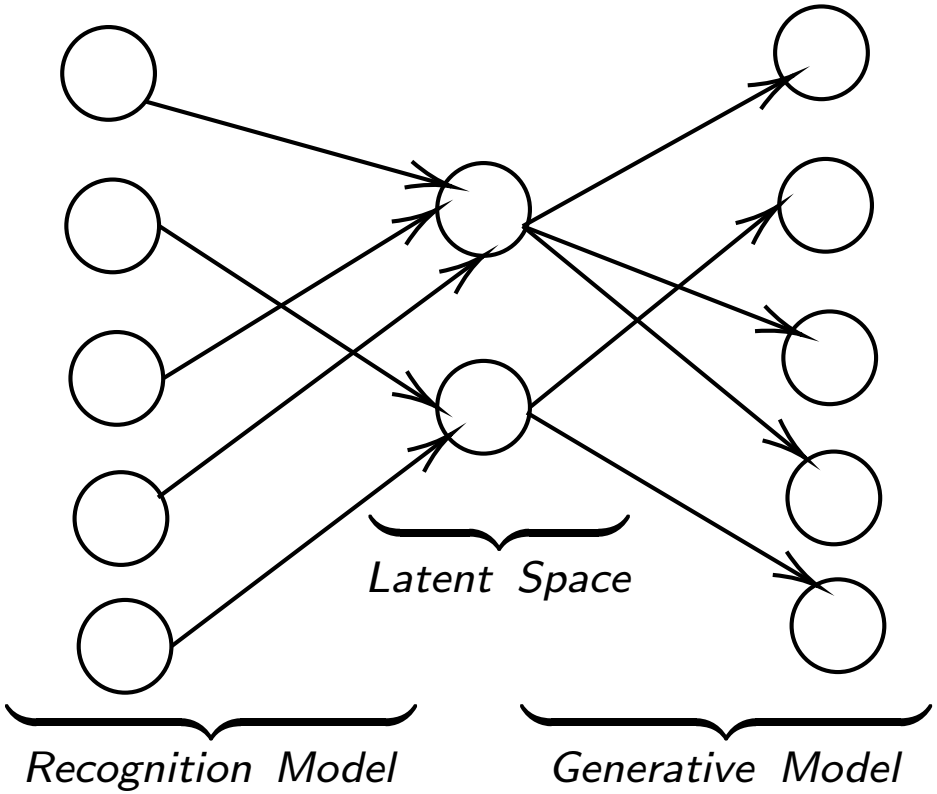
$$KL = \frac{1}{2}\sum_{k}(\exp\Sigma(x) + (\mu(x))^2 - 1 - \Sigma(x))$$

Variational Autoencoder [15]

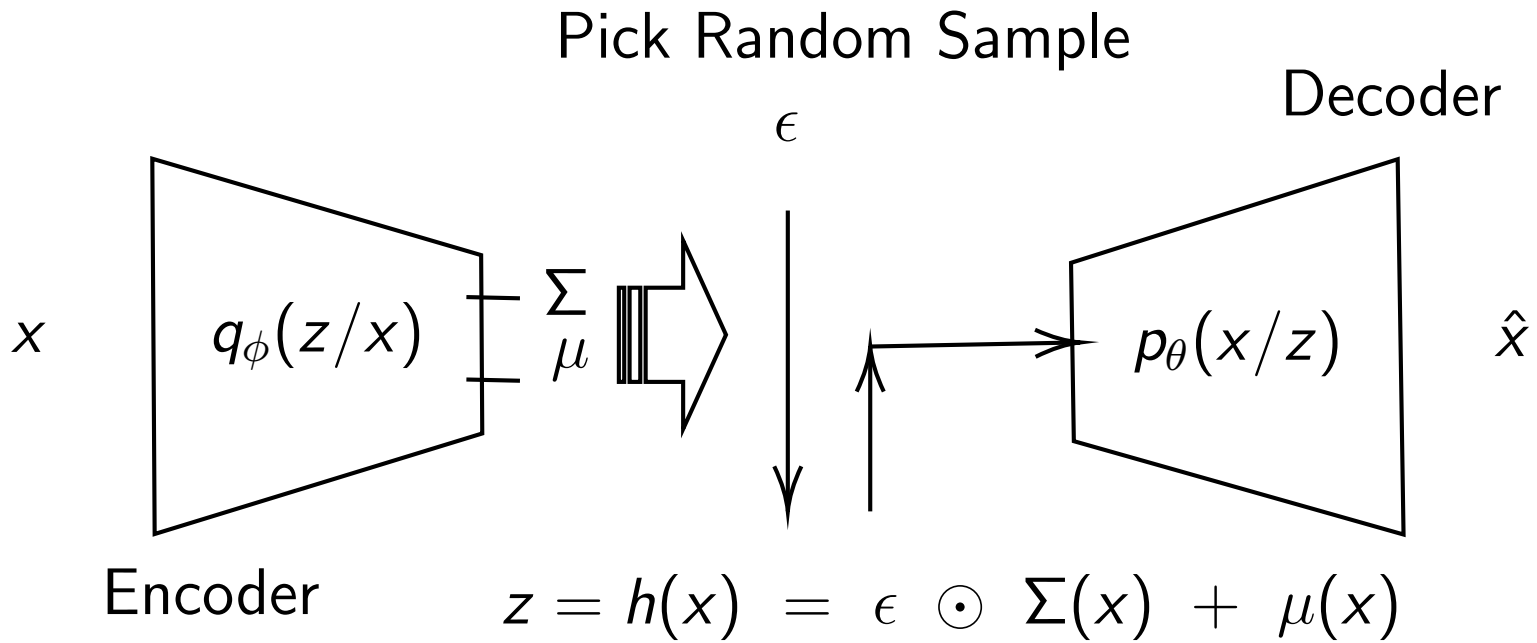
$$J = L + \lambda R \tag{13}$$

$$\begin{aligned}
\text{máx}\, \mathcal{L} &= \mathbb{E}_{q(z)} \log p(x/z) - KL(q(z)||p(z)) \\
\text{mín}\, \mathcal{L} &= -\mathbb{E}_{q(z)} \log p(x/z) + KL(q(z)||p(z)) \\
\text{mín}\, \mathcal{L} &= ||\bar{X} - \bar{X}'|| + \frac{1}{2} \sum_k (\exp \Sigma(x) + (\mu(x))^2 - 1 - \Sigma(x)) \\
\text{mín}\, \mathcal{L} &= ||\bar{X} - \bar{X}'|| - \frac{1}{2} \sum_k (1 + \Sigma(x) - (\mu(x))^2 - \exp \Sigma(x))
\end{aligned}$$

Variational Autoencoder

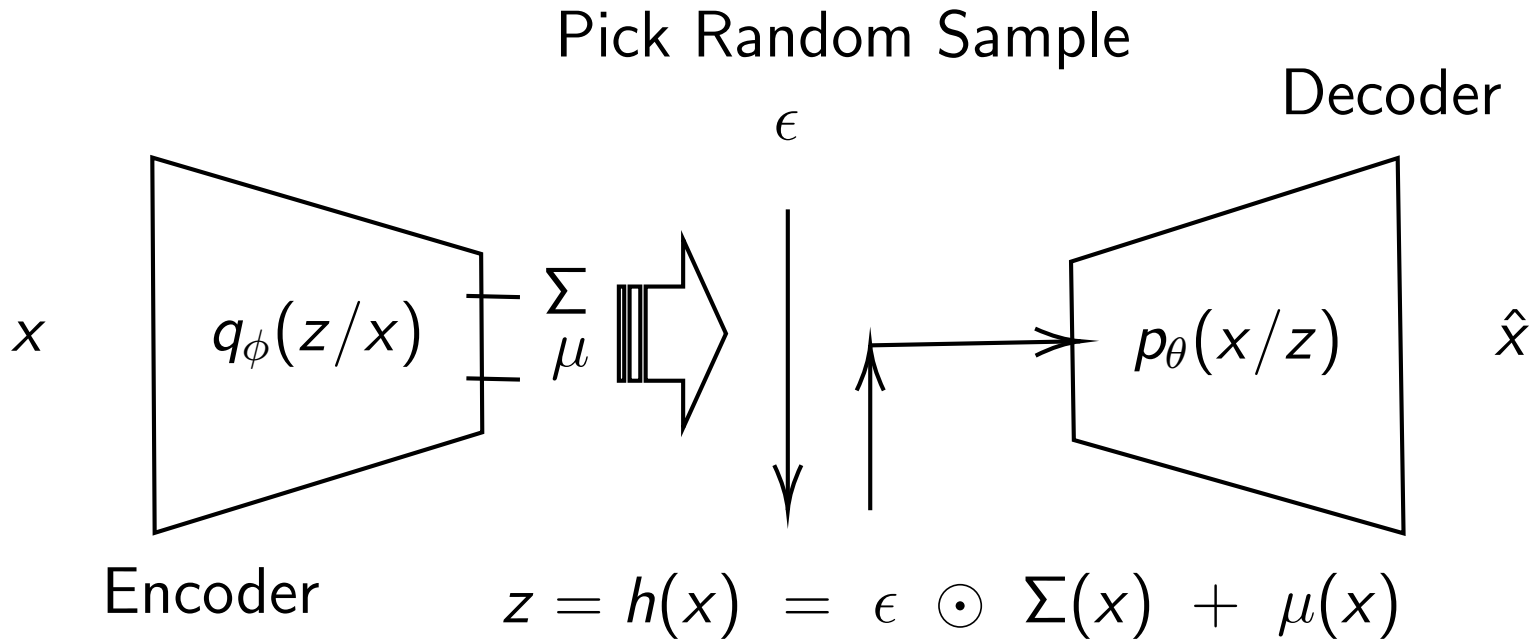


Algoritmo del Autoencoder Variacional



Recapitulando(1/2): Tomamos un x y lo ponemos en la entrada de la red. Con ese x vemos que valores de Σ y μ obtenemos en la salida del Encoder. Luego sampleamos un z de $p(z) = \mathcal{N}(0, \mathcal{I})$ (esto es equivalente a obtener un ϵ multiplicarlo por la varianza p.a.p. y sumarle la media).

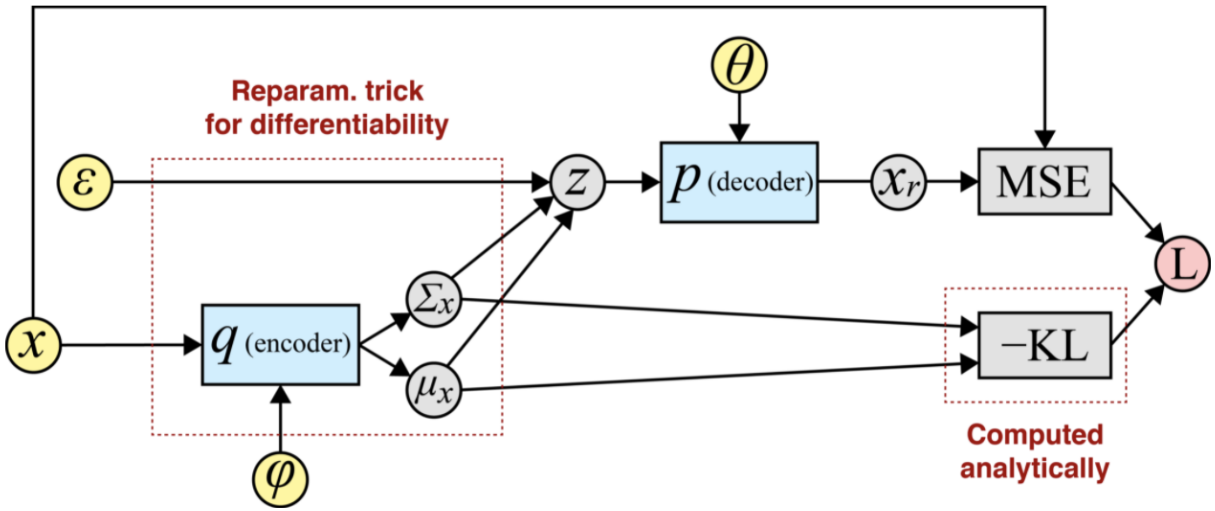
Algoritmo del Autoencoder Variacional



Recapitulando(2/2): Con ese z lo pasamos por el Decoder y obtenemos un $\hat{x}$. Entrenamos al Autoencoder ahora para que minimice $\mathcal{L}$ actualizando primeros los pesos del Decoder, luego pasando por la función $h(x)$ y de ahí retropropagando el error obtenido en μ y Σ hacia los pesos del Encoder.

Variational Autoencoder

El *Parametrization Trick* de la capa estocástica de la red, permite poder retropropagar el error manejando esa capa que tiene una entrada extra que es una variable aleatoria [7]:

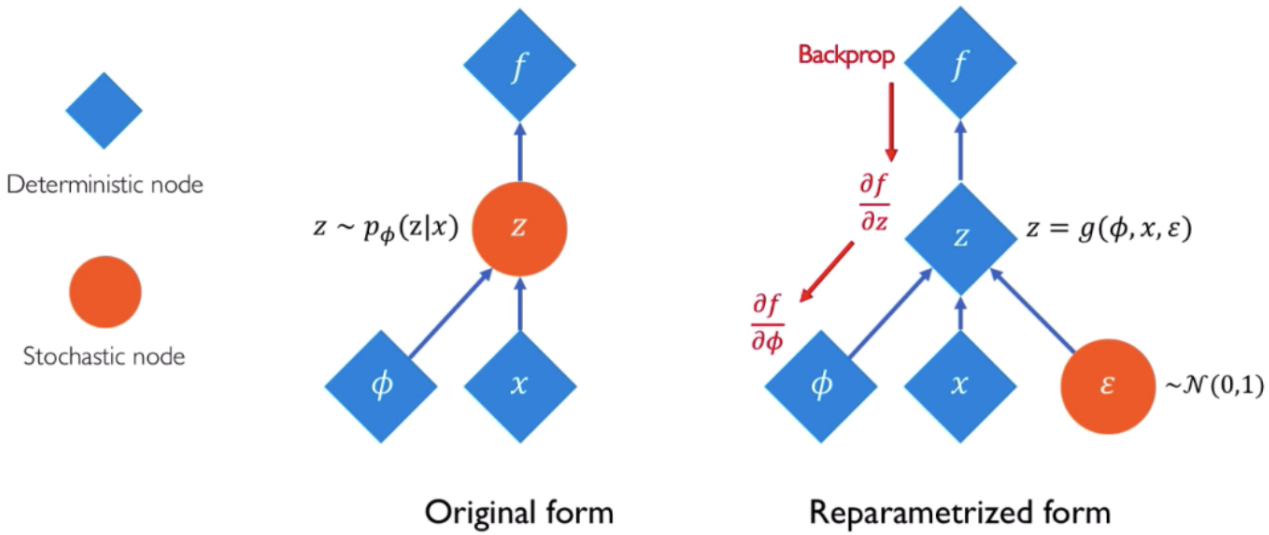


Fijense que el término regularizador, NO depende de la salida del decoder ($\bar{X}$). Depende de variables internas (Σ y μ) que llegan a la capa latente.

Variational Autoencoder

El valor de z se calcula en función de $\bar{\mu}$ y de $\bar{\Sigma}$.

$$z = h(\bar{X}) = \epsilon \odot \bar{\Sigma}(\bar{X}) + \bar{\mu}(\bar{X}) \tag{14}$$



Las dos salidas del encoder, actúan como entradas a la capa "z" donde está el truco de la reparametrización, que a su vez, actúa como un perceptrón lineal con función de activación identidad.

Reparametrization Trick

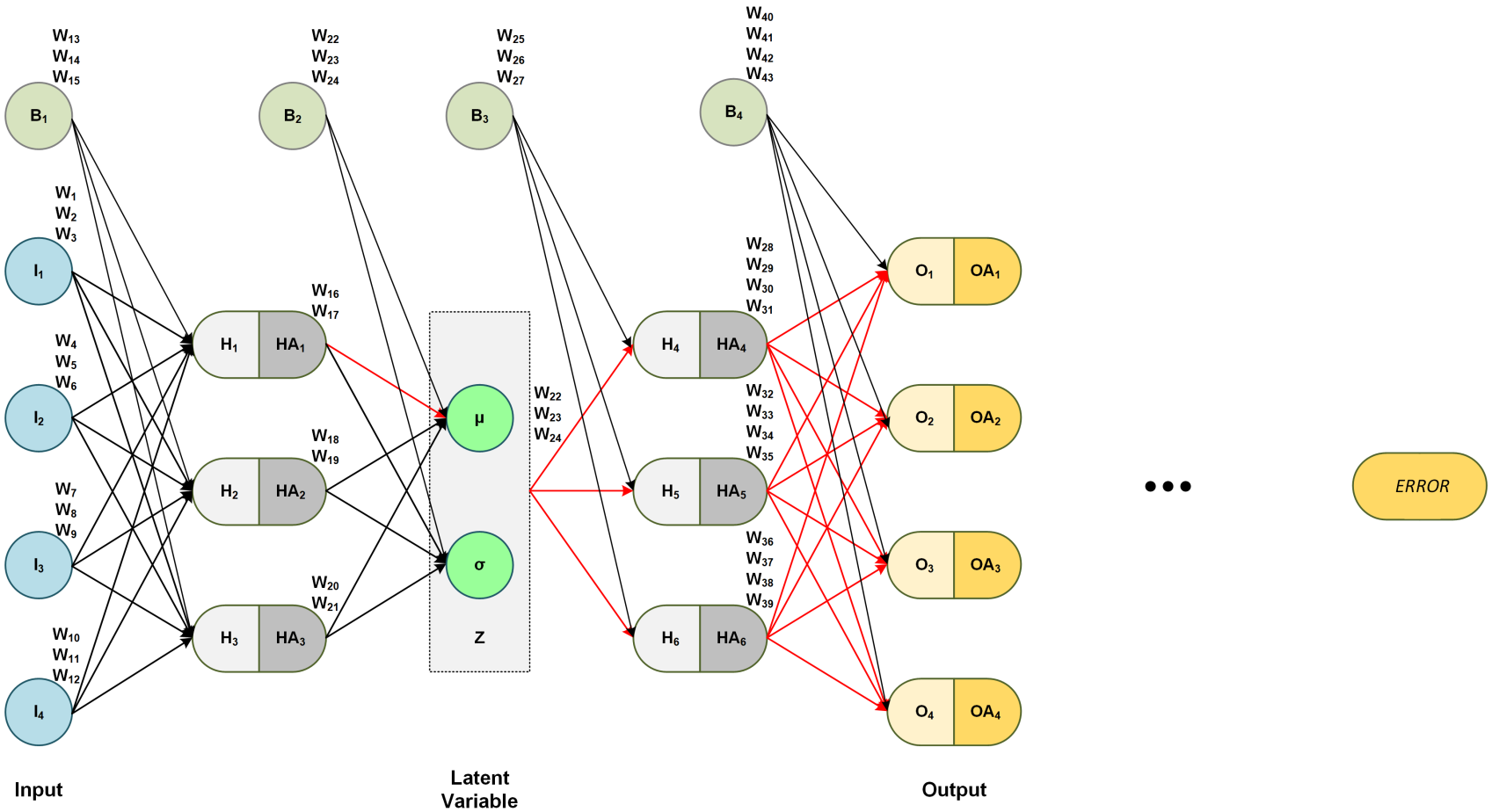
¿Cómo propagar[16] el error por el nodo estocástico?
Supongamos que queremos actualizar un peso particular del encoder ω_e en base a la función de cost:

$$J = L + \lambda R$$

Lo que queremos calcular es $\frac{\partial J}{\partial \omega_e}$ para poder usarlo en la

$$\omega_e^{t+1} = \omega_e^t - \eta \frac{\partial J}{\partial \omega_e}$$

Reparametrization Trick



Reparametrization Trick

¿Cómo propagar[16] el error por el nodo estocástico?

$$\frac{\partial J}{\partial \omega_e} = +(\frac{\partial L}{\partial z}\frac{\partial z}{\partial \mu}\frac{\partial \mu}{\partial \omega_e} + \lambda\frac{\partial R}{\partial \mu}\frac{\partial \mu}{\partial \omega_e})...$$
$$= +(\frac{\partial L}{\partial z}\frac{\partial z}{\partial \sigma}\frac{\partial \sigma}{\partial \omega_e} + \lambda\frac{\partial R}{\partial \sigma}\frac{\partial \sigma}{\partial \omega_e})$$

La $\frac{\partial L}{\partial z}$ corresponde a la retropropagación del error en el decoder, en tanto que $\frac{\partial z}{\partial \mu}$ es 1, y $\frac{\partial \mu}{\partial \omega_e}$ es la retropropagación hacia el encoder. $\frac{\partial R}{\partial \mu}$ corresponde a la derivada de Eq. 13.

Reparametrization Trick

¿Cómo propagar[16] el error por el nodo estocástico?

$$\frac{\partial J}{\partial \omega_e} = +(\frac{\partial L}{\partial z}\frac{\partial z}{\partial \mu}\frac{\partial \mu}{\partial \omega_e} + \lambda\frac{\partial R}{\partial \mu}\frac{\partial \mu}{\partial \omega_e})...$$
$$= +(\frac{\partial L}{\partial z}\frac{\partial z}{\partial \sigma}\frac{\partial \sigma}{\partial \omega_e} + \lambda\frac{\partial R}{\partial \sigma}\frac{\partial \sigma}{\partial \omega_e})$$

El segundo término corresponde a los cambios x el lado del μ, donde la $\frac{\partial z}{\partial \sigma}$ es ϵ, la $\frac{\partial R}{\partial \sigma}$ corresponde a la derivada de Eq. 13 (ahora con respecto a σ), y la $\frac{\partial \sigma}{\partial \omega_e}$ es la retropropagación hacia el encoder.

Reparametrization Trick

1. Hay dos gradientes a retropropagar, uno es el de reconstrucción y el otro de regularización.
2. Los pesos del DECODER se actualizan exclusivamente con la contribución del gradiente de reconstrucción. Esto es igual a un perceptrón multicapa.

Reparametrization Trick

1. Hay dos gradientes a retropropagar, uno es el de reconstrucción y el otro de regularización.
2. Los pesos del ENCODER se actualizan con la contribución de los dos gradientes.
3. Los gradientes de reconstrucción del ENCODER se obtienen multiplicando el gradiente que viene del decoder por la derivada de la función del truco de la reparametrización respecto de media y la variance.
4. Los gradientes del término de regularización del ENCODER se obtienen de la derivada de la divergencia KL respecto de la media y la varianza.
5. Se suman estos valores anteriores en cada paso del ENCODER.

Colab

https://colab.research.google.com/drive/1Hobi6plfrrUQ9DCiFPZ6vaztOu5Q05ND

Referencias

- Inferencia Variacional [3].
- Metodos Variacionales [13].
- VAE [4].
- Autoencoders [1, 12, 10].

Referencias I

[1] Charu C. Aggarwal. *Neural Networks and Deep Learning*. Springer, Cham, 2018.

[2] James R Anderson and Carsten Peterson. A mean field theory learning algorithm for neural networks. *Complex Systems*, 1:995–1019, 1987.

[3] David M. Blei, Alp Kucukelbir, and Jon D. McAuliffe. Variational inference: A review for statisticians. *Journal of the American Statistical Association*, 112(518):859–877, Feb 2017.

[4] Carl Doersch. Tutorial on variational autoencoders, 2021.

[5] ErmonGroup. *Variational Autoencoder*, 2020 (accessed April 3, 2021). `https://ermongroup.github.io/cs228-notes/extras/vae/`.

[6] Charles W Fox and Stephen J Roberts. A tutorial on variational bayesian inference. *Artificial intelligence review*, 38(2):85–95, 2012.

Referencias II

[7] Gregoy Gundersen. *Reparamatrization Trick*, 2021 (accessed October 2, 2021). https://gregorygundersen.com/blog/2018/04/29/reparameterization/.

[8] Geoffrey E Hinton and Drew Van Camp. Keeping the neural networks simple by minimizing the description length of the weights. In *Proceedings of the sixth annual conference on Computational learning theory*, pages 5–13, 1993.

[9] jhu edu. *Variational Tutorial*, 2011 (accessed September 3, 2018). http://www.cs.jhu.edu/~jason/tutorials/variational.html.

[10] Jeremy Jordan. *Autoencoders*, 2022 (accessed Novemenber 1, 2022). https://www.jeremyjordan.me/autoencoders/.

[11] Mohammad Emtiyaz Khan and Guillaume Bouchard. Variational em algorithms for correlated topic models. Technical report, Technical report, University of British Columbia, 2009.

Referencias III

[12] Diederik P Kingma and Max Welling. Auto-encoding variational bayes, 2014.

[13] Diederik P. Kingma and Max Welling. An introduction to variational autoencoders. *Foundations and Trends in Machine Learning*, 12(4):307–392, 2019.

[14] Kevin P Murphy. *Machine learning: a probabilistic perspective*. MIT press, 2012.

[15] Stephen Odaibo. Tutorial: Deriving the standard variational autoencoder (vae) loss function, 2019.

[16] Baptise Rocca. *Stack Exchange, Machine Learning*, 2021 (accessed October 2, 2021). `https://stats.stackexchange.com/questions/420974/backpropagation-on-variational-autoencoders`.

Referencias IV

[17] Charlie Tang and Russ R Salakhutdinov. Learning stochastic feedforward neural networks. *Advances in Neural Information Processing Systems*, 26, 2013.

[18] Martin J Wainwright and Michael Irwin Jordan. *Graphical models, exponential families, and variational inference*. Now Publishers Inc, 2008.

[19] Eric W. Weisstein. *Stochastic Function*, 2023 (accessed November 17, 2023). `https://mathworld.wolfram.com/StochasticFunction.html`.