IIC 2433 Minería de Datos

https://github.com/marcelomendoza/IIC2433

AUTOENCODERS

Auto-encoders

Motivación: Trabajar sobre una representación de baja dimensionalidad y con alta capacidad informativa para aprendizaje automático.

Los primeros autoencoders se construyeron a partir de redes neuronales entrenadas para reconstruir la entrada.

Formalmente, el problema corresponde a aprender dos funciones:

Encoder: $A : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}^p$

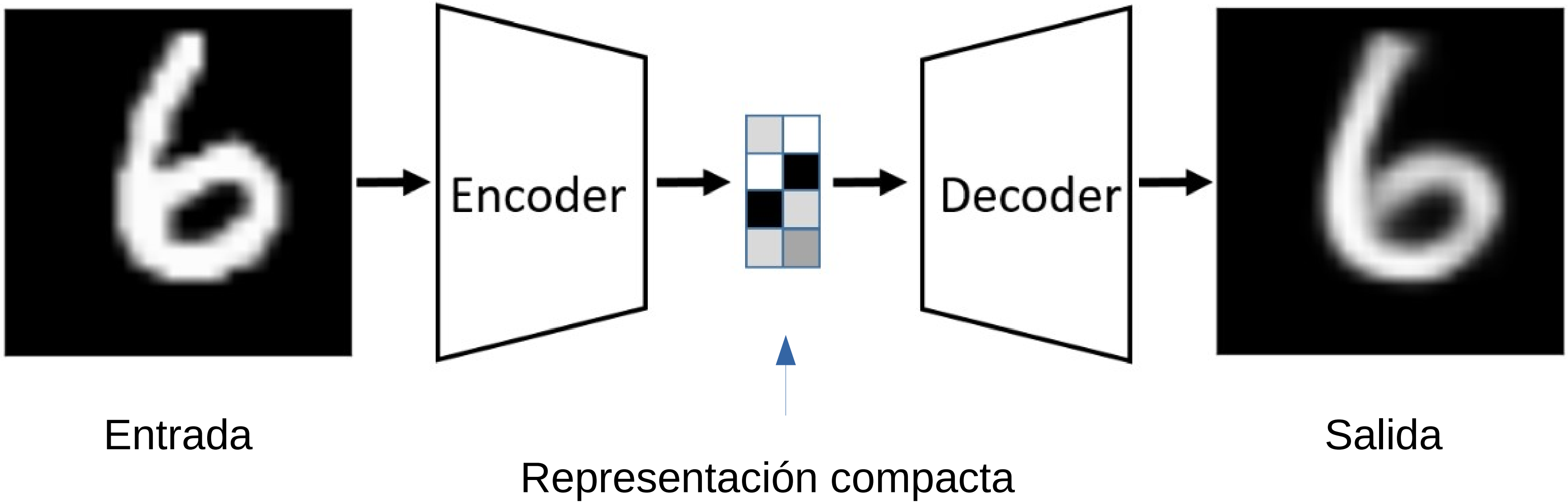
Decoder: $B : \mathbb{R}^p \longrightarrow \mathbb{R}^n$

Composición de funciones

de tal manera que: $\arg\min_{A,B} E[\Delta(\mathbf{x}, B \circ A(\mathbf{x})]$

Error de reconstrucción (usualmente norma L_2)

Auto-encoders



- Si A y B implementan redes feed-forward lineales (activación lineal), el autoencoder se denomina autoencoder lineal.

- Un autoencoder es una generalización de PCA.

Auto-encoders

- Reducir la dimensionalidad es útil para evitar over-fitting ¿Por qué?

- Surge un tradeoff: Por un lado queremos que la arquitectura obtenga un error de reconstrucción muy bajo. Por otro, queremos que la representación compacta descarte información no esencial.

- Una forma de abordar el tradeoff consiste en introducir sparsity en las activaciones de las capas ocultas. Existen dos estrategias, regularización L_1 o uso de divergencia KL.

Requiere ajustar este parámetro

Sparse autoencoder con regularización L_1:

$$\arg\min_{A,B} E[\Delta(\mathbf{x}, B \circ A(\mathbf{x}))] + \lambda \sum_i |a_i|$$

Activación de la *i*-th neurona oculta

Auto-encoders

Sparse autoencoder basada en divergencia KL: asumimos que la activación de cada neurona actua como una variable Bernoulli con probabilidad *p*. Se controla el parámetro *p*.

Para cada batch, se estima la probabilidad y se calcula la diferencia, la cual es usada como regularizador.

Para cada neurona *j* la probabilidad empírica es:

$$\hat{p}_j = \underbrace{\frac{1}{m}}_{\text{Tamaño del batch}} \sum_i \underbrace{a_i(x)}_{\text{Activación del dato } i \text{ en la neurona } j}$$

Luego, la función de pérdida es:

$$\arg\min_{A,B} E[\Delta(\mathbf{x}, B \circ A(\mathbf{x})] + \sum_j KL(p||\hat{p}_j)$$

Auto-encoders variacionales

El VAE es un modelo generativo (enfoque Bayesiano) que describe el proceso generativo de los datos.

Dado un dataset $\mathbf{X} = \{\mathbf{x}_i\}_{i=1}^{N}$, el VAE asume la generación de cada dato condicionada a una variable latente aleatoria $\mathbf{z}_i$. Este modelo describe al decoder (probabilístico).

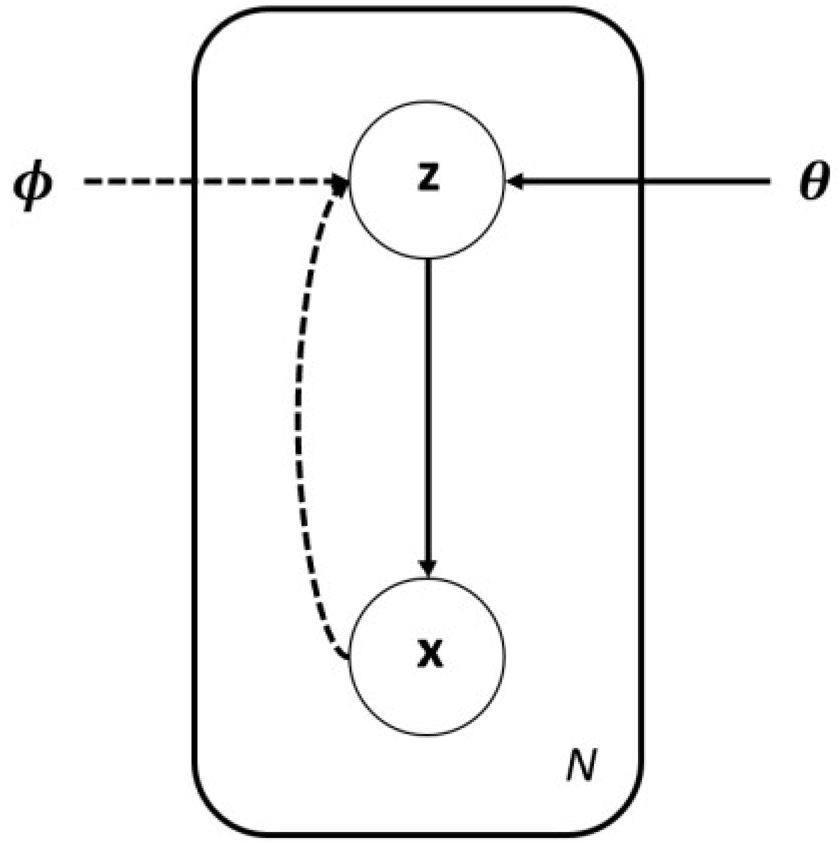
Análogamente, asumimos la existencia de una distribución a *posteriori* para generar las variables latentes a partir de los datos. Este modelo describe al encoder (probabilístico).

Las variables latentes tiene una distribución a priori denotada por $p_\theta(\mathbf{z}_i)$.

Diederik Kingma, Max Welling: Auto-Encoding Variational Bayes. ICLR 2014.

Auto-encoders variacionales

Parámetros del encoder



Parámetros del decoder

Auto-encoders variacionales

¿Qué hace el VAE?

Es un modelo de variable latente que usa redes neuronales (en específico perceptrón multicapa) para aproximar la *posterior* de

$q_\phi(z|x)$ y del modelo generativo $p_\theta(x, z)$.

Asumimos que la posterior aproximada es una Gaussiana multivariada. Los parámetros de esta distribución son calculados usando un MLP que toma los datos como entrada:

$$q_\phi(z|x) = \mathcal{N}(z; \mu_\phi(x), \sigma_\phi(x)\mathbf{I})$$

Auto-encoders variacionales

¿Qué hace el VAE?

Es un modelo de variable latente que usa redes neuronales (en específico perceptrón multicapa) para aproximar la *posterior* de

$q_\phi(z|x)$ y del modelo generativo $p_\theta(x, z)$.

Asumimos que la posterior aproximada es una Gaussiana multivariada. Los parámetros de esta distribución son calculados usando un MLP que toma los datos como entrada:

$$q_\phi(z|x) = \mathcal{N}(z; \mu_\phi(x), \sigma_\phi(x)\mathbf{I})$$

Para el *decoder*, se asume $p(z)$ fijo:

$$p(z) = \mathcal{N}(0, \mathbf{I})$$

El modelo generativo dependerá del tipo de datos con los que trabajamos. Por ejemplo:

- Datos reales: Gaussiana multivariada
- Datos booleanos: Bernoulli

Auto-encoders variacionales

Por ejemplo, decoder con datos reales en base a Gaussiana multivariada:

$$p_\theta(x|z) = \mathcal{N}(x; \mu_\theta(z), \sigma_\theta(z)\mathbf{I})$$

Auto-encoders variacionales

Por ejemplo, decoder con datos reales en base a Gaussiana multivariada:

$$p_\theta(x|z) = \mathcal{N}(x; \mu_\theta(z), \sigma_\theta(z)\mathbf{I})$$

En síntesis, VAE con Gaussianas opera según:

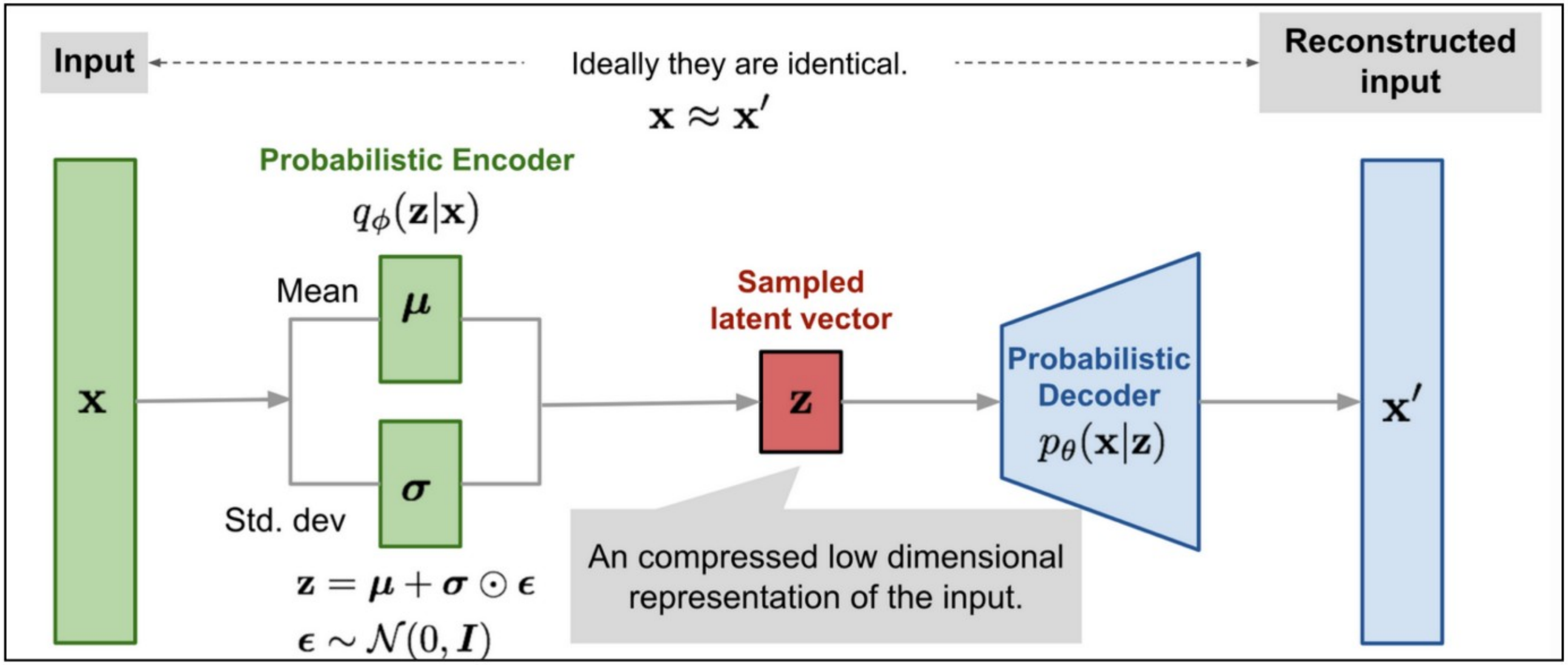
$$x \xrightarrow{q_\phi(z|x)} z \xrightarrow{p_\theta(x|z)} x$$

$$q_\phi(z|x) = \mathcal{N}(z; \mu_\phi(x), \sigma_\phi(x)\mathbf{I})$$

$$p(z) = \mathcal{N}(0, \mathbf{I})$$

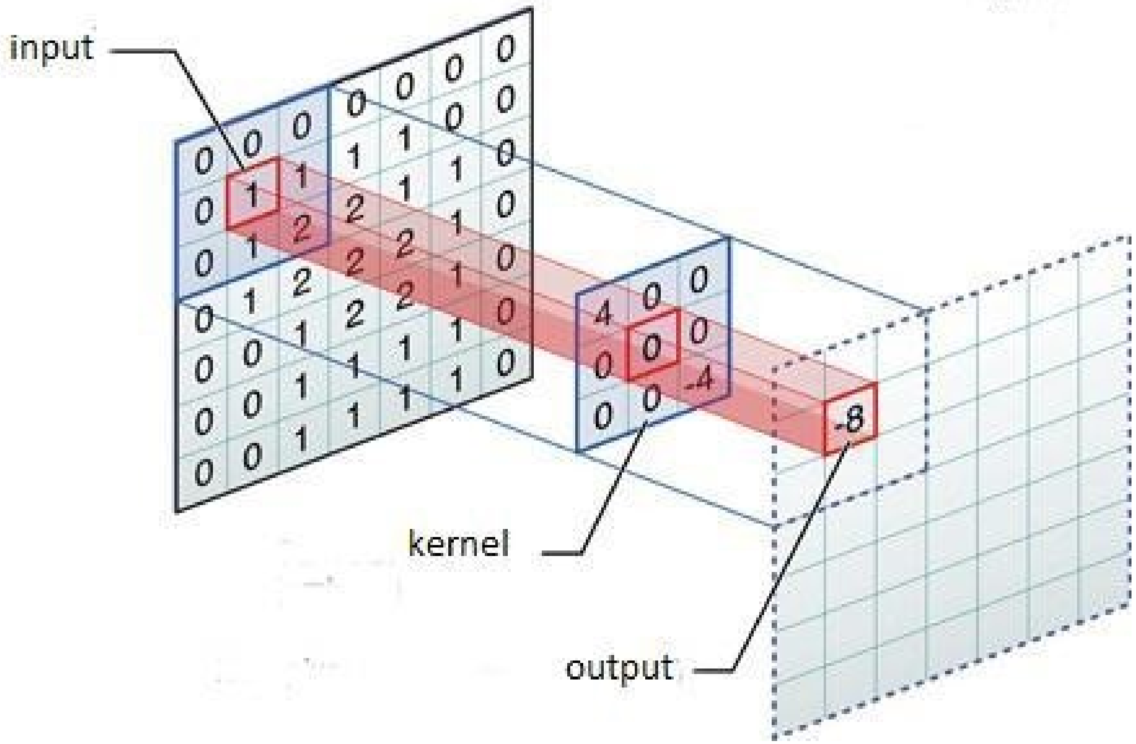
$$p_\theta(x|z) = \mathcal{N}(x; \mu_\theta(z), \sigma_\theta(z)\mathbf{I})$$

Auto-encoders variacionales



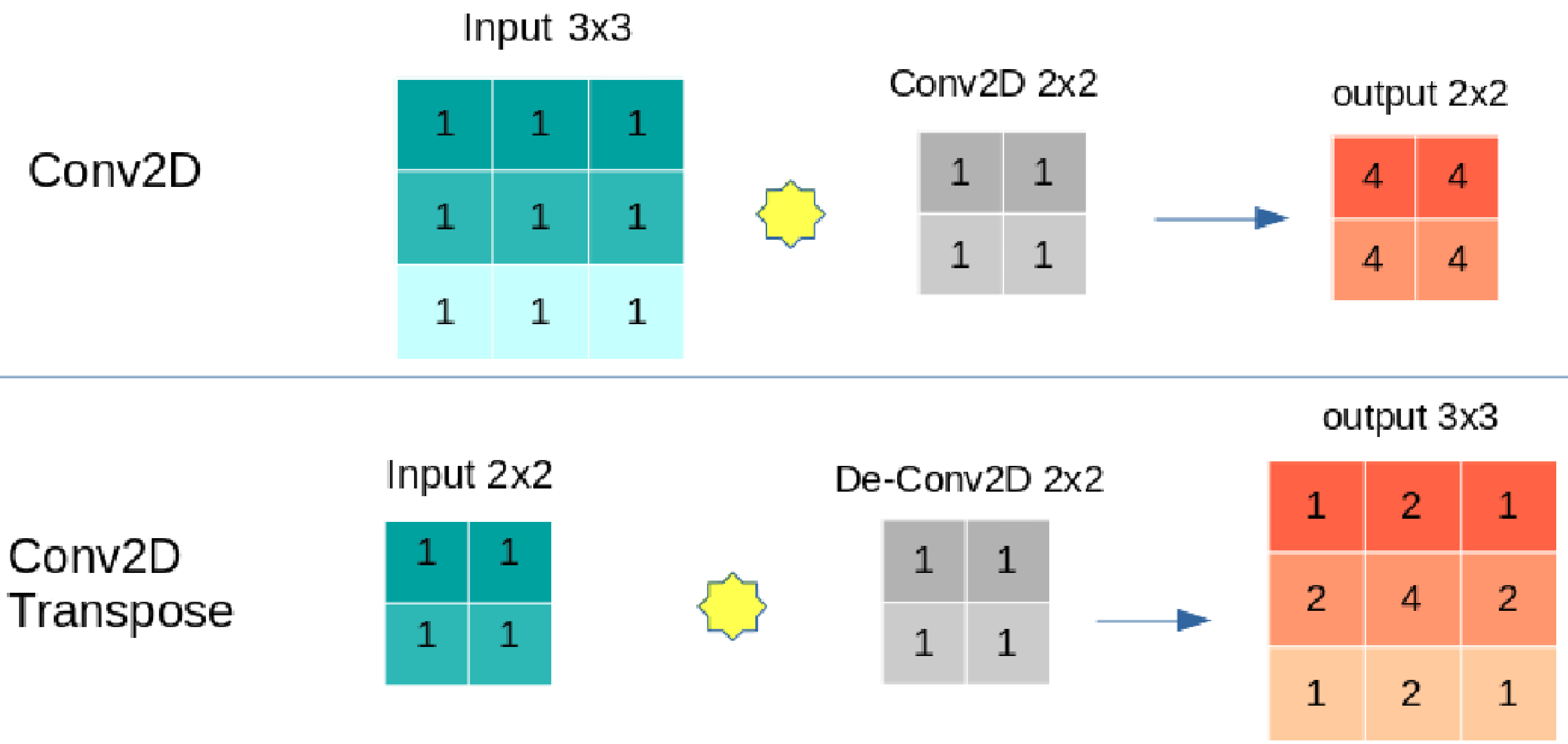
El VAE puede generar datos nuevos

Auto-encoders variacionales con imágenes



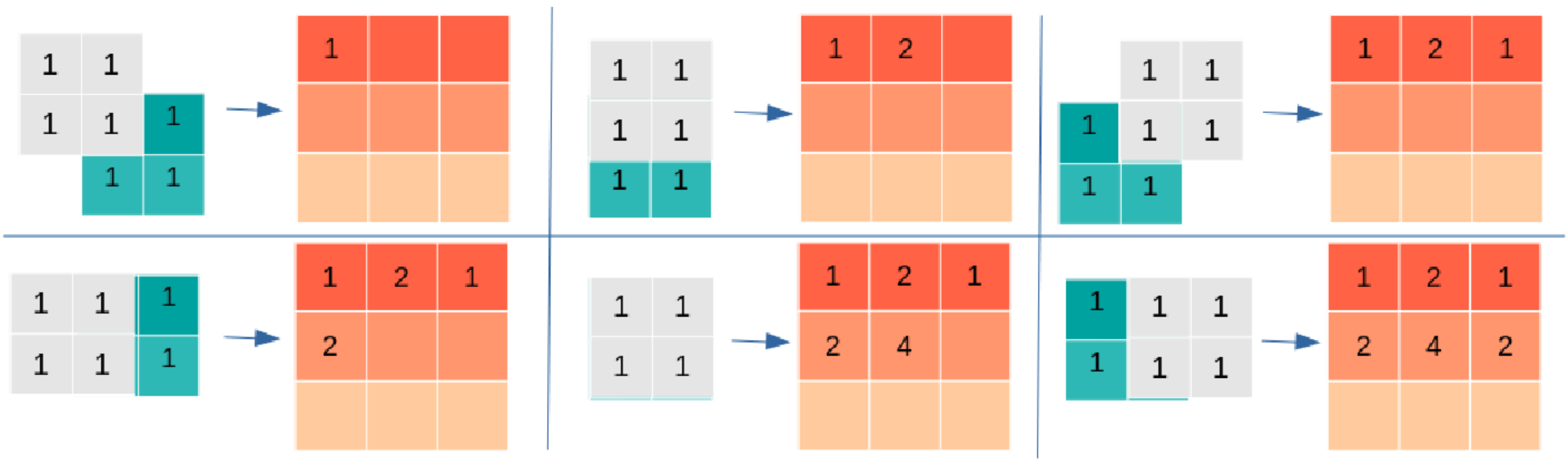
Auto-encoders variacionales con imágenes

Filtros convolucionales 2D



Auto-encoders variacionales con imágenes

Filtros convolucionales 2D transpose



Auto-encoders variacionales con imágenes