clusterAI
ciencia de datos en ingeniería industrial
UTN BA
curso l5521

clase_10: Autoencoders

docente: martin palazzo

Autoencoders

- Reducción de la dimensionalidad
- Autoencoders
- Autoencoders multi-modales

¿que es una red neuronal artificial?

$$y = f_w(x)$$

$$w = \operatorname*{argmin}_{w} L(y, \hat{y}) = \operatorname*{argmin}_{w} L(y, \hat{f}_w(x))$$

Una red neuronal, es una función **f(x) = z** lineal o no lineal caracterizada por un conjunto de parámetros "**W**". Esta función toma como entrada un vector **x** d-dimensional para generar una respuesta/salida unidimensional 'y' o multidimensional 'z'. Para obtener los parámetros **w** se medirá mediante una función de costo **L** distintos aspectos como la calidad de las variables de salida de la función **f** (y o z).

Input space

$x \in \mathbb{R}^d$

x_1 x_2 x_i x_n
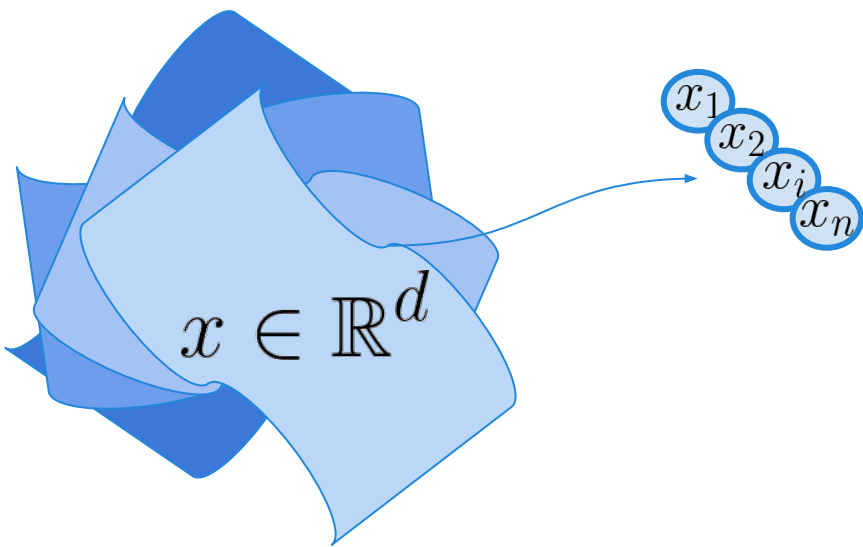
"d" features

"n" samples

$$\mathbf{X}_{(n,d)} = \begin{bmatrix} x_{00} & x_{01} & \ldots & x_{0d} \\ x_{10} & x_{11} & \ldots & x_{1d} \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ x_{n0} & x_{n1} & \ldots & x_{nd} \end{bmatrix}$$
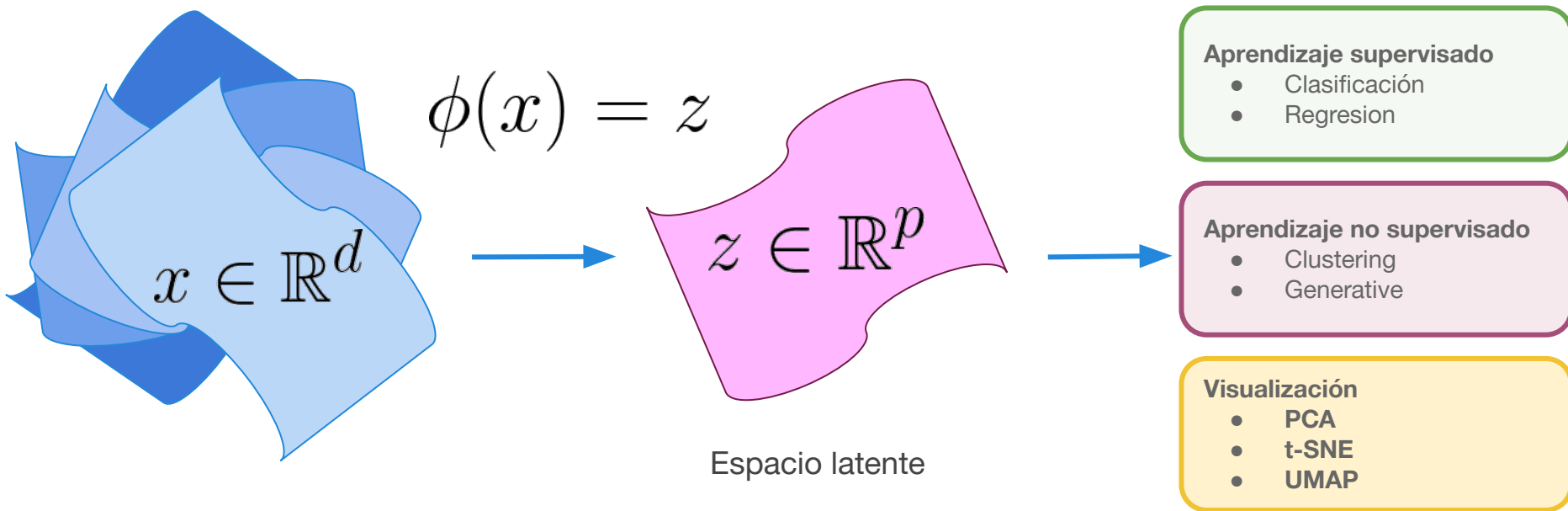
Dim. Reduction: Feature extraction

$$\phi(x) = z \qquad \begin{aligned} \mathcal{X} &\in \mathbb{R}^d \\ \mathcal{Z} &\in \mathbb{R}^p \\ p &< d \end{aligned}$$

Se busca aprender una función de transformación **phi** que proyecta los datos de **X** al sub-espacio **Z** de menor dimensión. En este curso todas las transformaciones que estudiamos son no-supervisadas aunque existen supervisadas.

Dim. Reduction: Feature extraction

$$\phi(x) = z$$

$$x \in \mathbb{R}^d$$

$$z \in \mathbb{R}^p$$

Espacio latente

Aprendizaje supervisado
- Clasificación
- Regresion

Aprendizaje no supervisado
- Clustering
- Generative
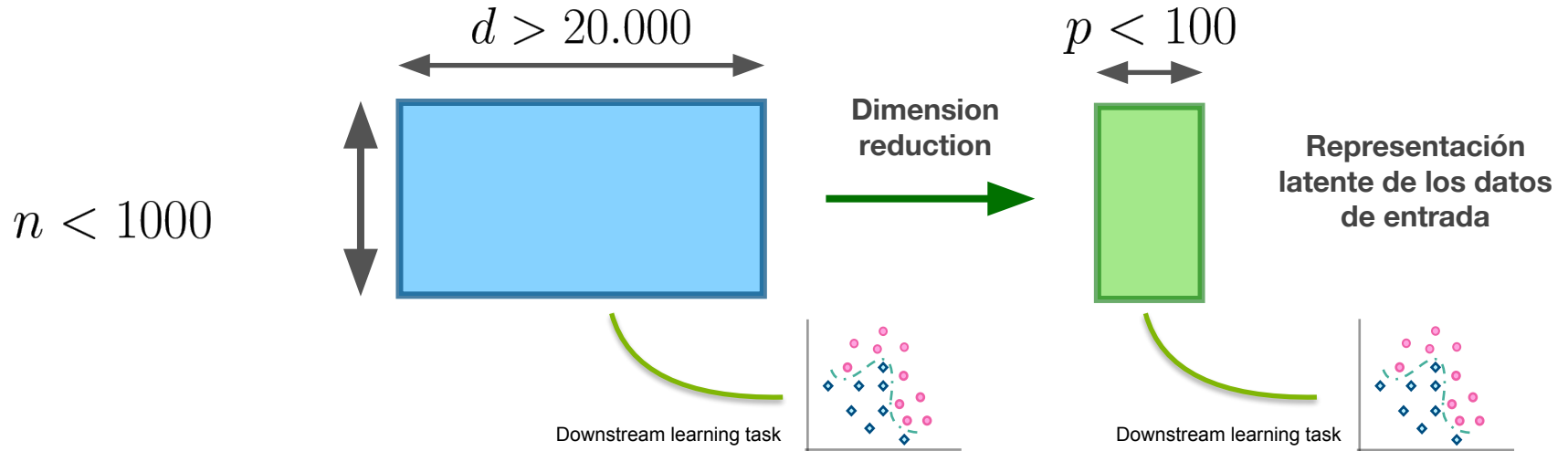
Visualización
- **PCA**
- **t-SNE**
- **UMAP**

Se busca aprender una función de transformación **phi** que proyecta los datos de **X** al sub-espacio **Z** de menor dimensión. En este curso todas las transformaciones que estudiamos son no-supervisadas aunque existen supervisadas.

Reducción de la dimensionalidad

"d" variables

"n" muestras

Xnd

"p" variables

Znp
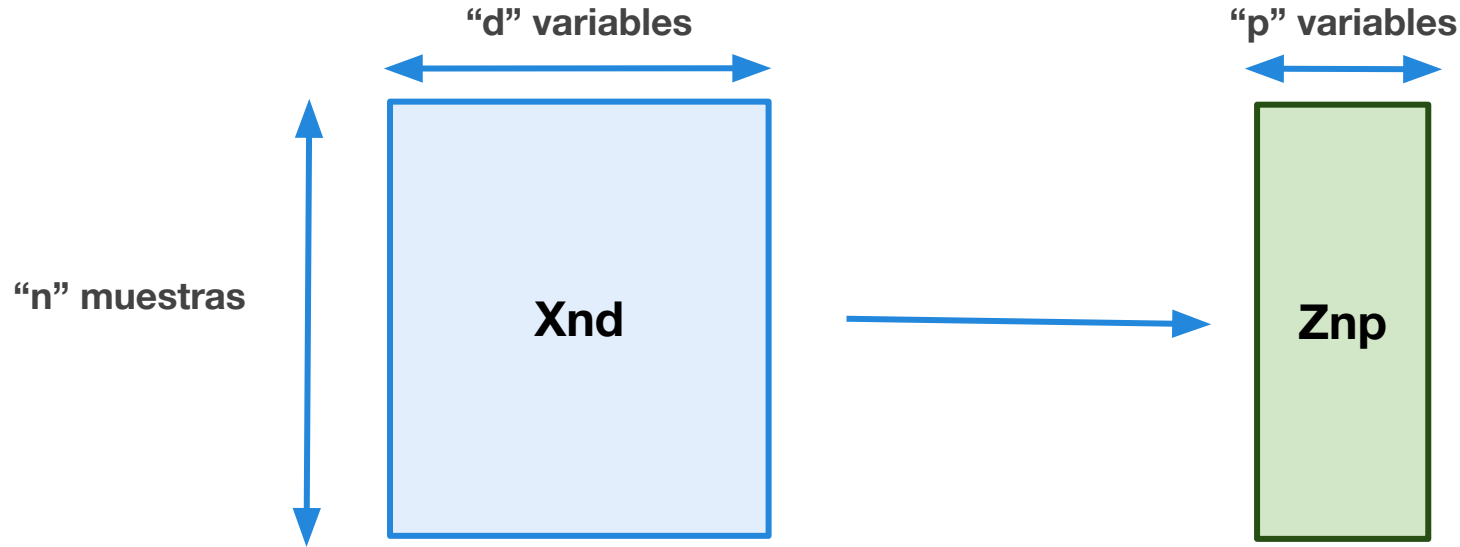
Por reducción de dimensionalidad transformaremos nuestra matriz de datos **Xnd** a una matriz de datos **Znp** de menor dimensión. Reducir la dimensionalidad implica encontrar un **espacio latente** que explica mejor mis datos y por ende puede ayudar en el entrenamiento de un modelo de aprendizaje supervisado o no supervisado.

High dimensional data (a.k.a. "fat" data)

$$d > 20.000$$

$$p < 100$$

$$n < 1000$$

Dimension reduction

Representación latente de los datos de entrada

Downstream learning task

Downstream learning task

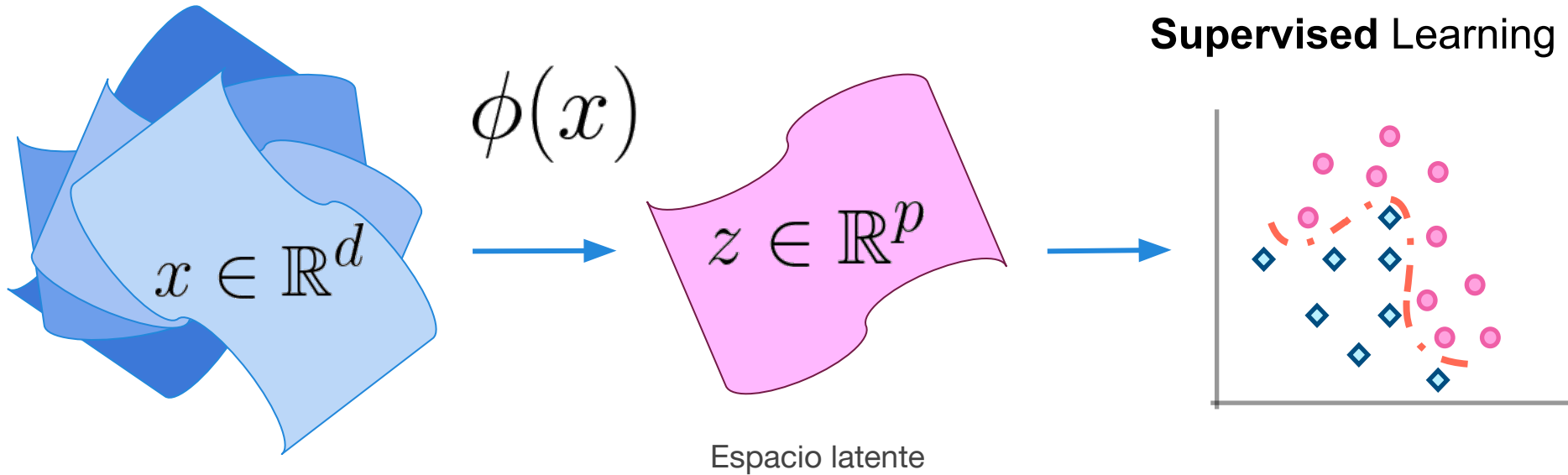Dimension reduction methods aims to obtain a small subset of features/variables to do both:

• **make the data easy to interpret**
• **improve a downstream task machine learning model**

There are two approaches for dimensionality reduction:

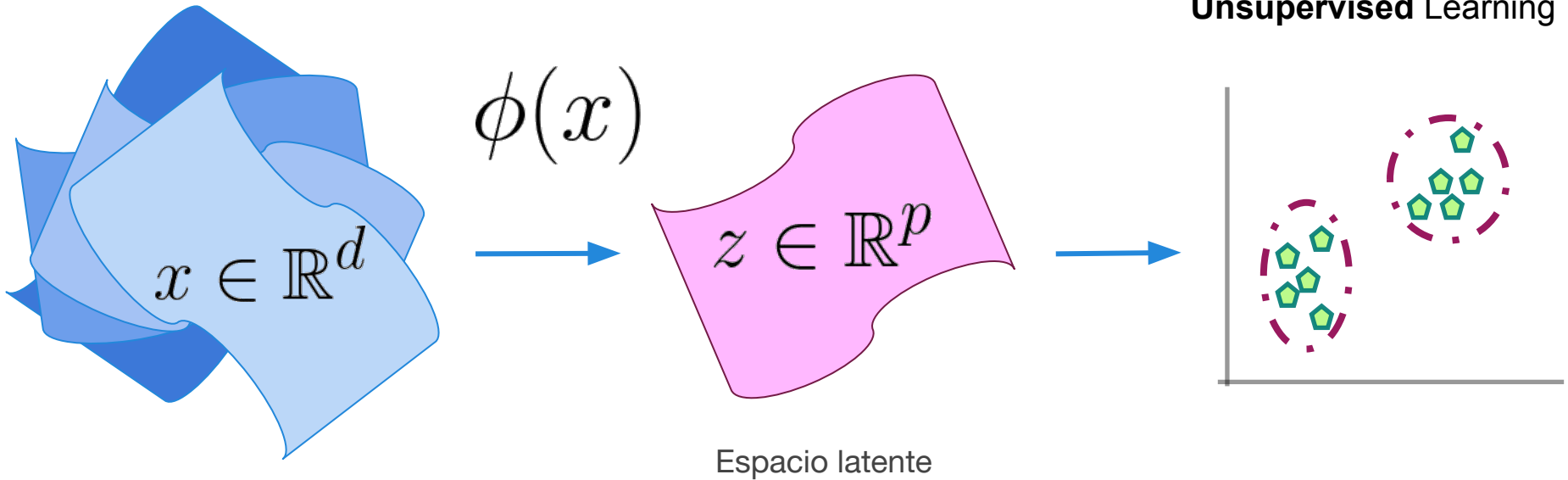• **Feature extraction**
• **Feature selection**

Reduccion de la dimensionalidad: visualizacion

$\phi(x)$

$x \in \mathbb{R}^d$

$z \in \mathbb{R}^p$

Espacio latente

Supervised Learning

Se busca aprender una función de transformación **phi** que proyecta los datos de **X** al sub-espacio **Z** de menor dimensión. En este curso todas las transformaciones que estudiamos son no-supervisadas aunque existen supervisadas.
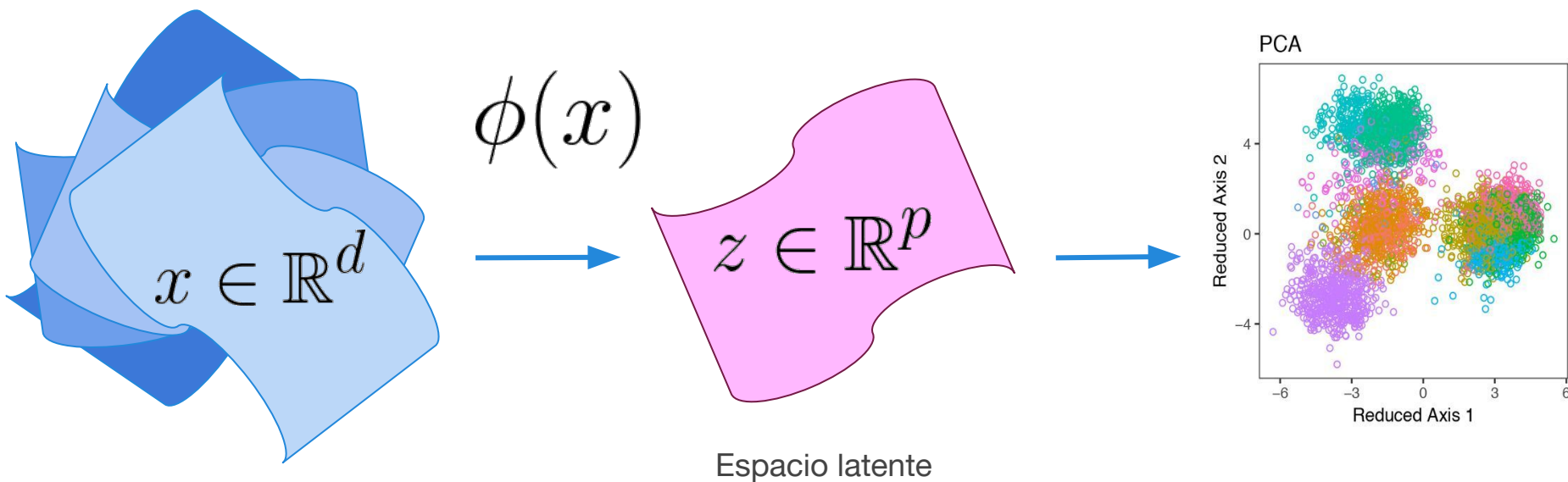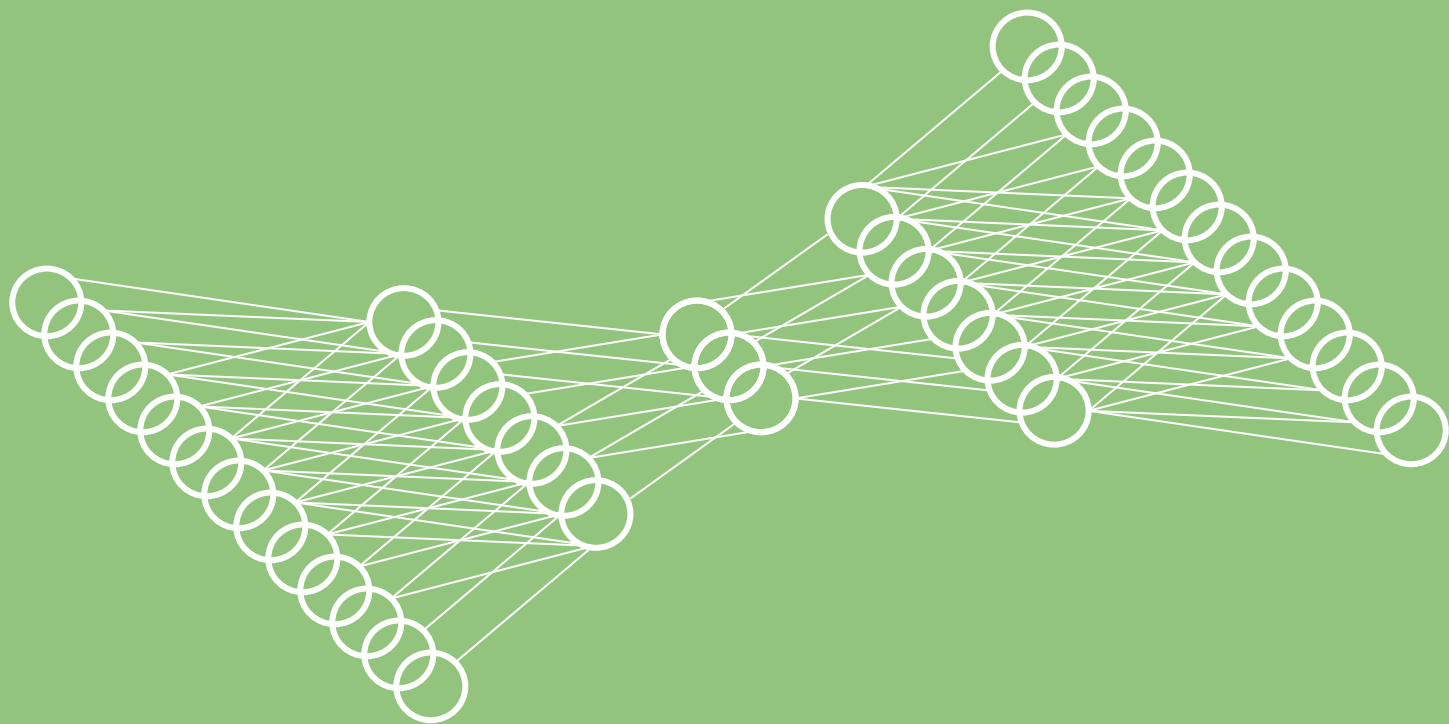
Reduccion de la dimensionalidad: visualizacion

$\phi(x)$

$x \in \mathbb{R}^d$
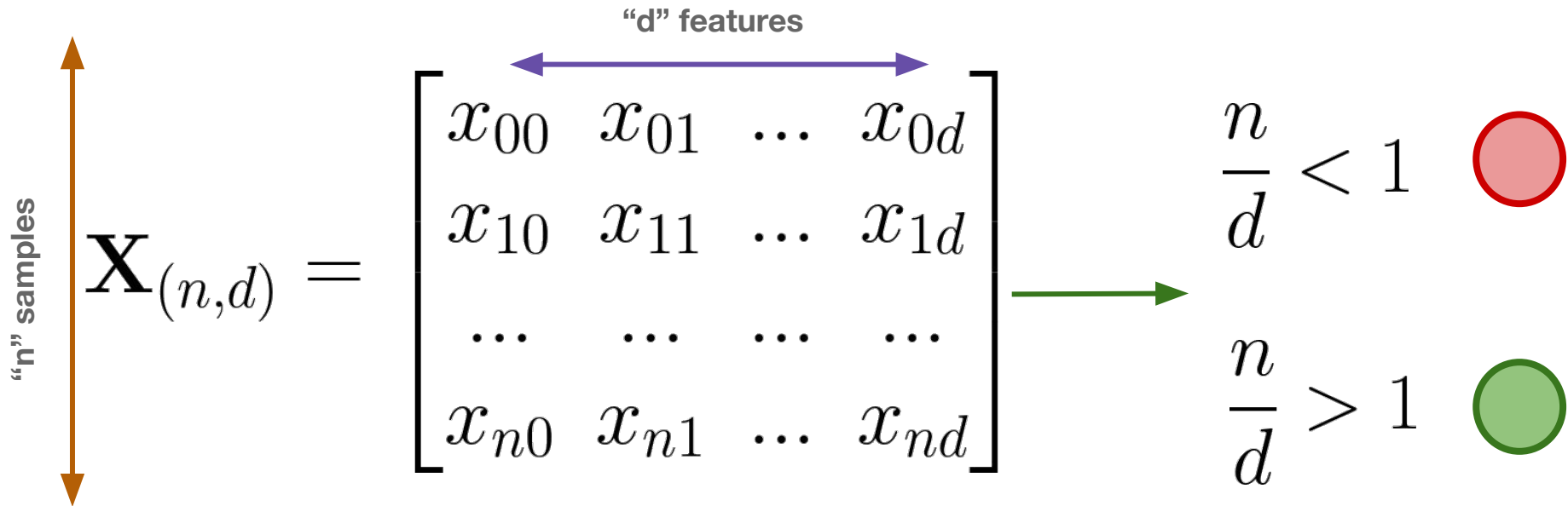
$z \in \mathbb{R}^p$

Espacio latente

Se busca aprender una función de transformación **phi** que proyecta los datos de **X** al sub-espacio **Z** de menor dimensión. En este curso todas las transformaciones que estudiamos son no-supervisadas aunque existen supervisadas.

Reduccion de la dimensionalidad: visualización

$\phi(x)$

$x \in \mathbb{R}^d$

$z \in \mathbb{R}^p$

Espacio latente

PCA

Se busca aprender una función de transformación **phi** que proyecta los datos de **X** al sub-espacio **Z** de menor dimensión. En este curso todas las transformaciones que estudiamos son no-supervisadas aunque existen supervisadas.
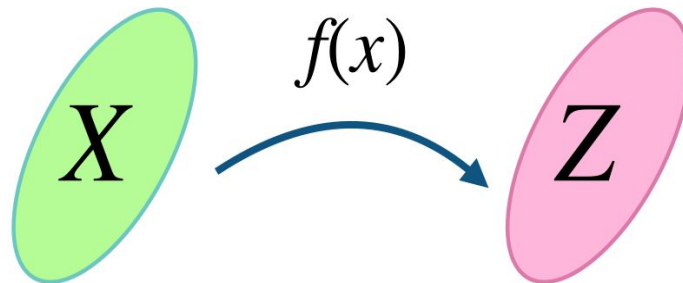
Autoencoders

Sample-to-feature ratio

"d" features

$$\mathbf{X}_{(n,d)} = \begin{bmatrix} x_{00} & x_{01} & \dots & x_{0d} \\ x_{10} & x_{11} & \dots & x_{1d} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ x_{n0} & x_{n1} & \dots & x_{nd} \end{bmatrix}$$

"n" samples

$$\frac{n}{d} < 1$$

$$\frac{n}{d} > 1$$

When the number n of samples < number of features d, the relationship between instances and dimensions is less than one and that implies greater difficulty in being able to explain and describe the space where our instances live.

[*]Indyk, P., & Motwani, R. (1998, May). Approximate nearest neighbors: towards removing the curse of dimensionality. In *Proceedings of the thirtieth annual ACM symposium on Theory of computing* (pp. 604-613).

Dim. Reduction: Feature extraction

$$\mathcal{X} \in \mathbb{R}^d$$
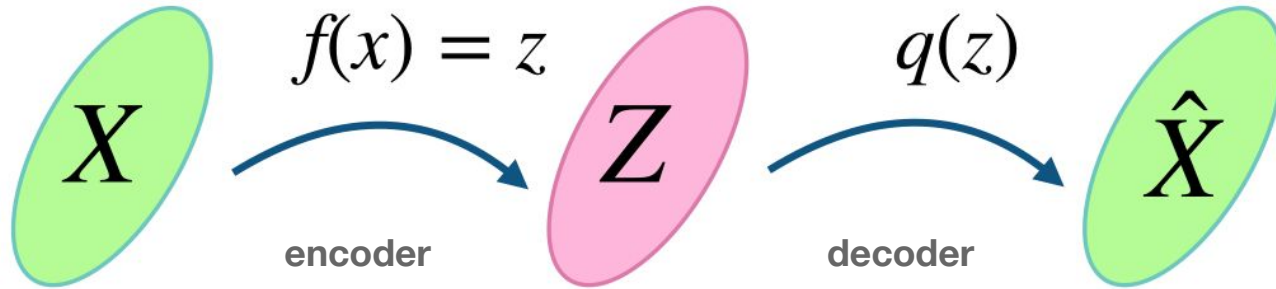$$\mathcal{Z} \in \mathbb{R}^p$$
$$p < d$$

$f(x)$

$X \qquad Z$

A way to reduce dimensionality is by feature extraction methods (PCA, kPCA, Autoencoders). This method learn a transformation f(x)=z where **Z** is a low dimensional subspace where data **X** is projected. Then on the reduced subspace clustering can be performed.
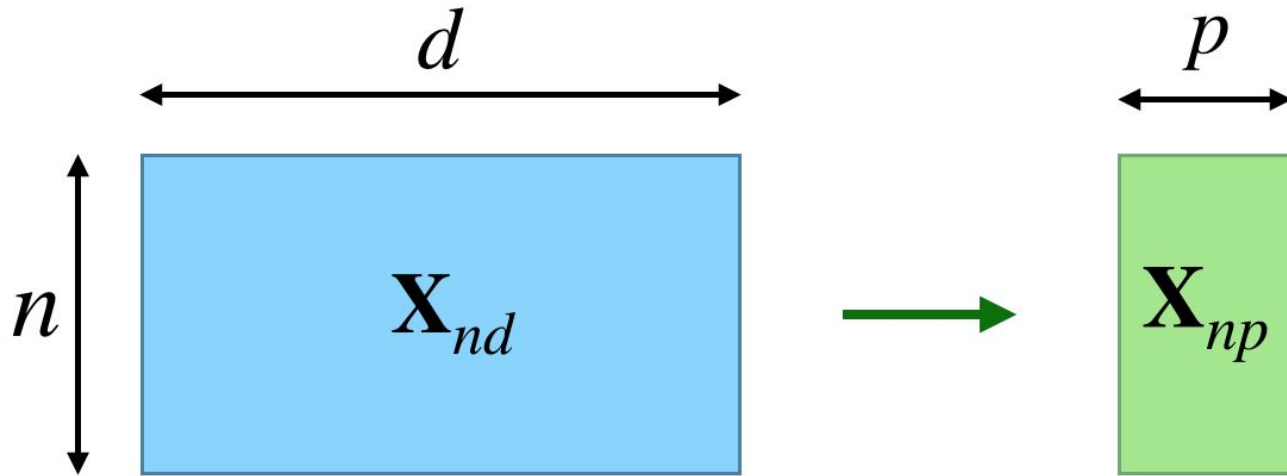
A way to reduce dimensionality is by feature extraction methods (PCA, kPCA, Autoencoders). This method learn a transformation f(x)=z where **Z** is a low dimensional subspace where data **X** is projected. Then on the reduced subspace clustering can be performed.
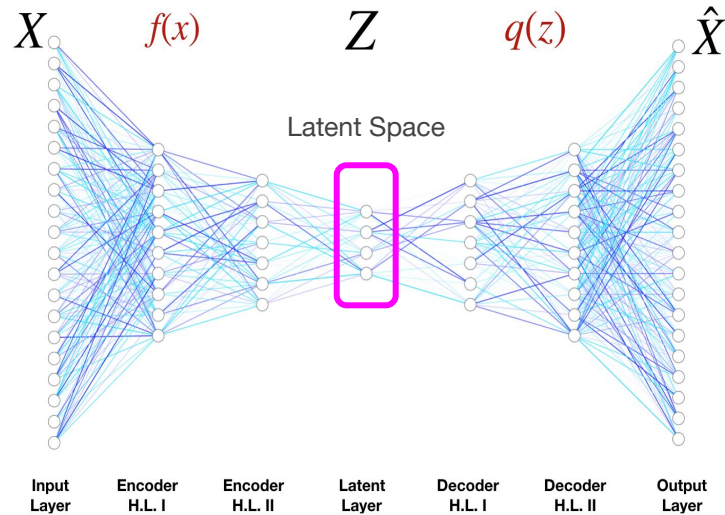
Autoencoder

The objective is to learn two functions:
- encoder f(x) = z maps the high dimensional input vectors **X** in a low dimensional latent space **z**
- decoder q(z) = x maps the latent vectors **z** to the original high dimensional input space.

Palazzo, M. (2021). *Dimensionality Reduction of Biomedical Tumor Profiles: a Machine Learning Approach* (Doctoral dissertation, Université de Technologie de Troyes; Universidad Tecnológica Nacional. Facultad Regional Buenos Aires (Buenos Aires, Argentine)).

Autoencoders

$$\boldsymbol{z} = f\left(\boldsymbol{x}, \mathbf{W}_f\right) = \sigma\left(\mathbf{W}_f \boldsymbol{x} + \mathbf{b}_f\right)$$
$$\tilde{\boldsymbol{x}} = q\left(\boldsymbol{z}, \mathbf{W}_q\right) = \sigma\left(\mathbf{W}_q \mathbf{z} + \mathbf{b}_q\right)$$
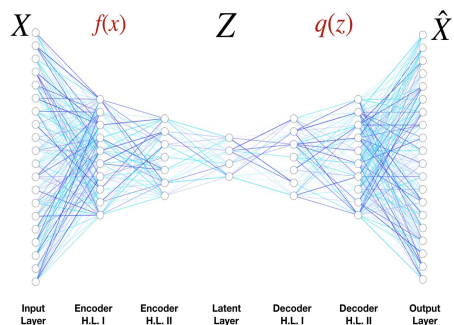
Using autoencoders it is possible learn low-dimensional representations of the data (latent space). These representations help to find clusters although they are not interpretable in biological terms.

[1] Hinton, G. E., & Salakhutdinov, R. R. (2006). Reducing the dimensionality of data with neural networks. *science*, *313*(5786), 504-507.
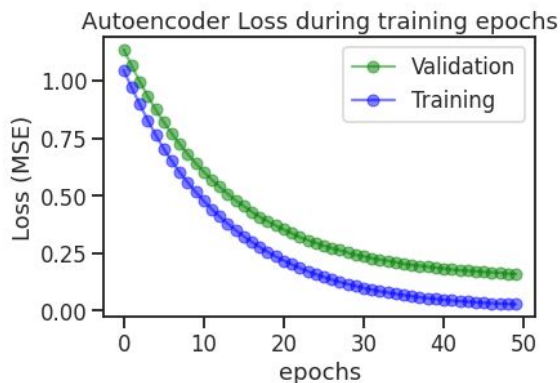[2] Goodfellow, I., Bengio, Y., Courville, A., & Bengio, Y. (2016). Deep learning Book. Cambridge: MIT press. (Chapter 14)
Figure: Dimension Reduction of tumor profiles using autoencoders (Palazzo M.)
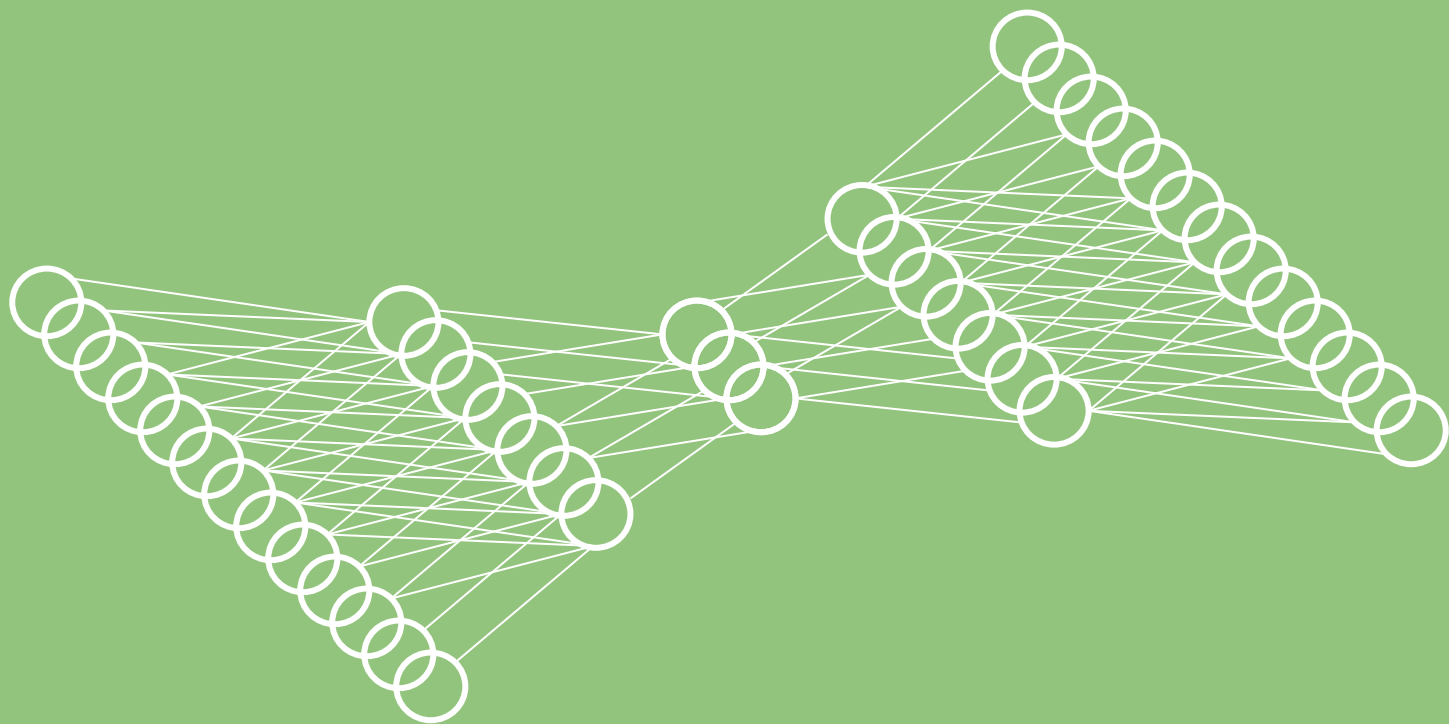
Autoencoder Loss Function: MSE

$$\boldsymbol{z} = f\left(\boldsymbol{x}, \mathbf{W}_f\right) = \sigma\left(\mathbf{W}_f \boldsymbol{x} + \mathbf{b}_f\right)$$
$$\tilde{\boldsymbol{x}} = q\left(\boldsymbol{z}, \mathbf{W}_q\right) = \sigma\left(\mathbf{W}_q \mathbf{z} + \mathbf{b}_q\right)$$
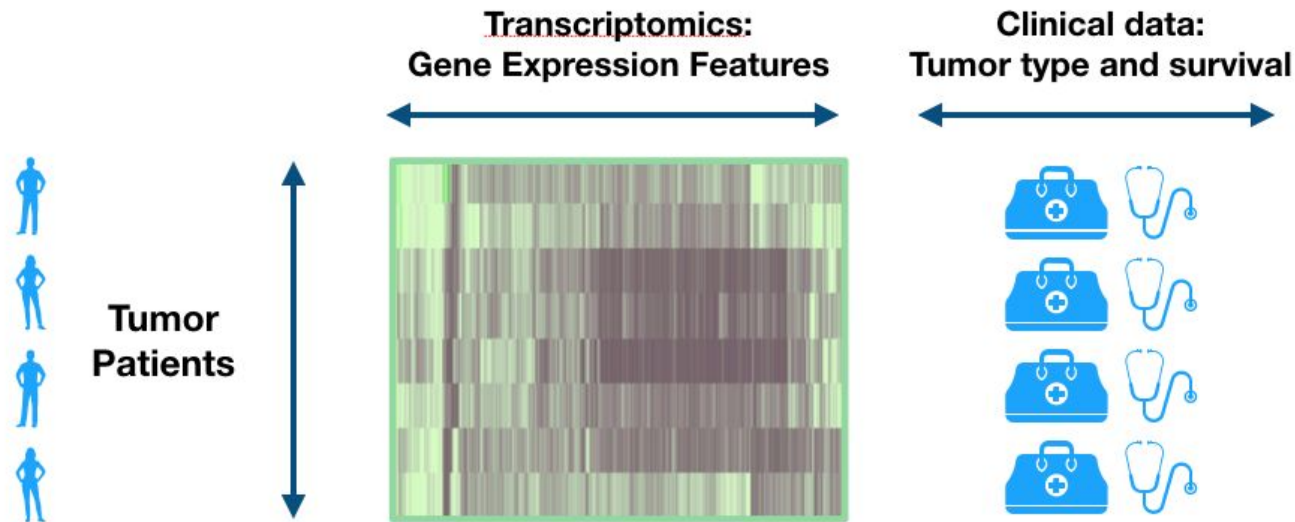

$$L(x, \hat{x}) = L(x, q(f(x))) = \|x - \hat{x}\|^2$$

Palazzo, M. (2021). *Dimensionality Reduction of Biomedical Tumor Profiles: a Machine Learning Approach* (Doctoral dissertation, Université de Technologie de Troyes; Universidad Tecnológica Nacional. Facultad Regional Buenos Aires (Buenos Aires, Argentine)).

Autoencoders en biomedicina

Biomedical data from cancer patients

Each patient's tumor is characterized by thousands of bio-molecular features such as Genetic expression. In addition, each patient is labeled with clinical information such as tumor type or subtype, survival, and tumor stage.

Figure: Dimension Reduction of tumor profiles using autoencoders (Palazzo M., 2020)
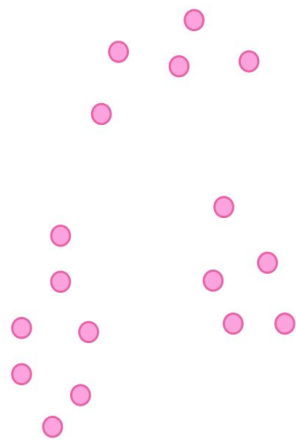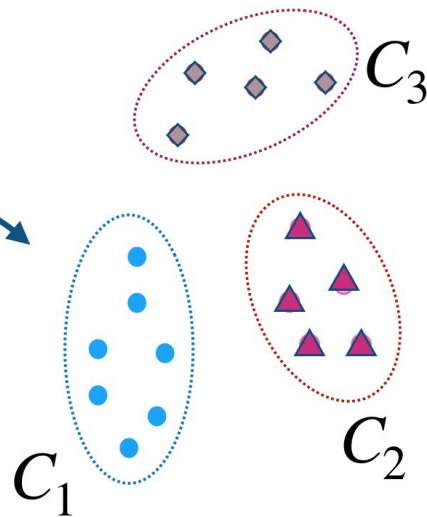
Tumor types, subtypes and stages
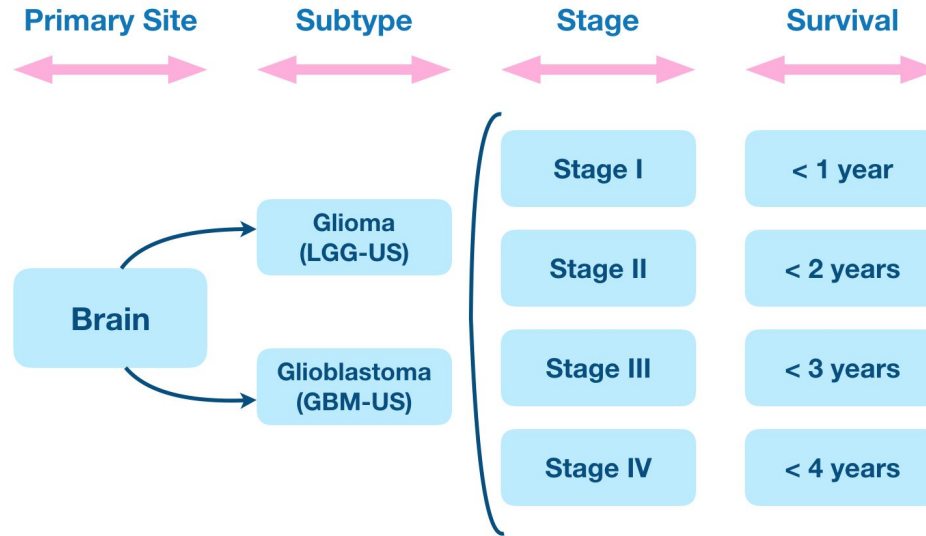
Tumor types presents inner heterogeneity that can be subdivided in tumor subtypes, stage or survival.

Tumor subtype discovery

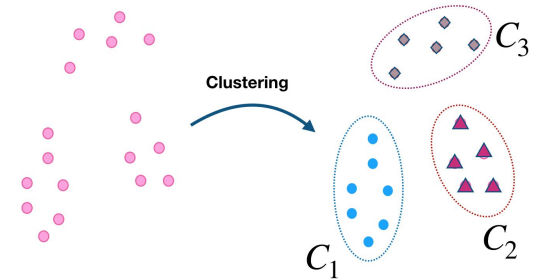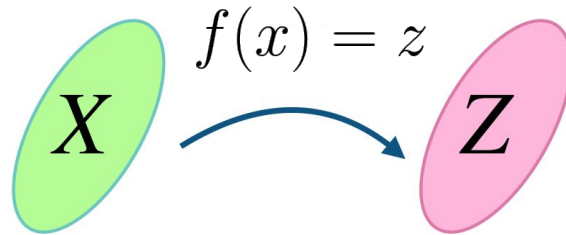**Unlabeled dataset**

Clustered dataset

Clustering

C_3

C_1

C_2

Tumors can be clustered to discover new subgroups (subtypes) with relevant clinical differences.

Dim. Reduction: Feature extraction

$$\mathcal{X} \in \mathbb{R}^d$$
$$\mathcal{Z} \in \mathbb{R}^p$$
$$p < d$$

$$f(x) = z$$

X

Z

Clustering

C_3

C_1

C_2

A way to reduce dimensionality is by feature extraction methods (PCA, kPCA, Autoencoders). This method learn a transformation f(x)=z where **Z** is a low dimensional subspace where data **X** is projected. Then on the reduced subspace clustering can be performed.

Autoencoders for tumor subtype discovery
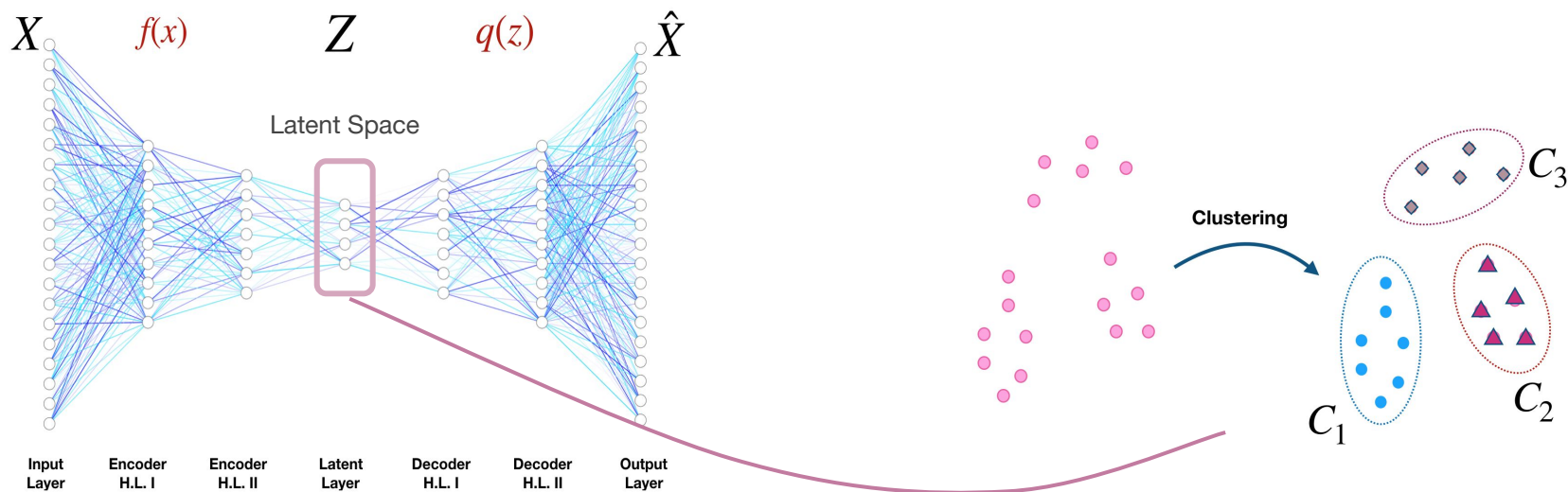
Using autoencoders it is possible learn low-dimensional representations of the data (latent space). These representations help to find clusters although they are not interpretable in biological terms.
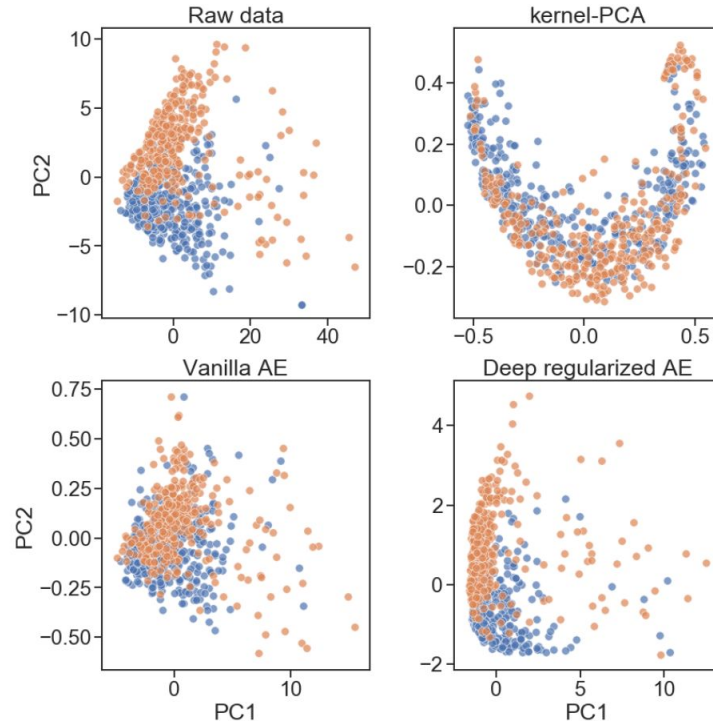
[1] Hinton, G. E., & Salakhutdinov, R. R. (2006). Reducing the dimensionality of data with neural networks. *science*, *313*(5786), 504-507.
[2] Goodfellow, I., Bengio, Y., Courville, A., & Bengio, Y. (2016). Deep learning Book. Cambridge: MIT press. (Chapter 14)
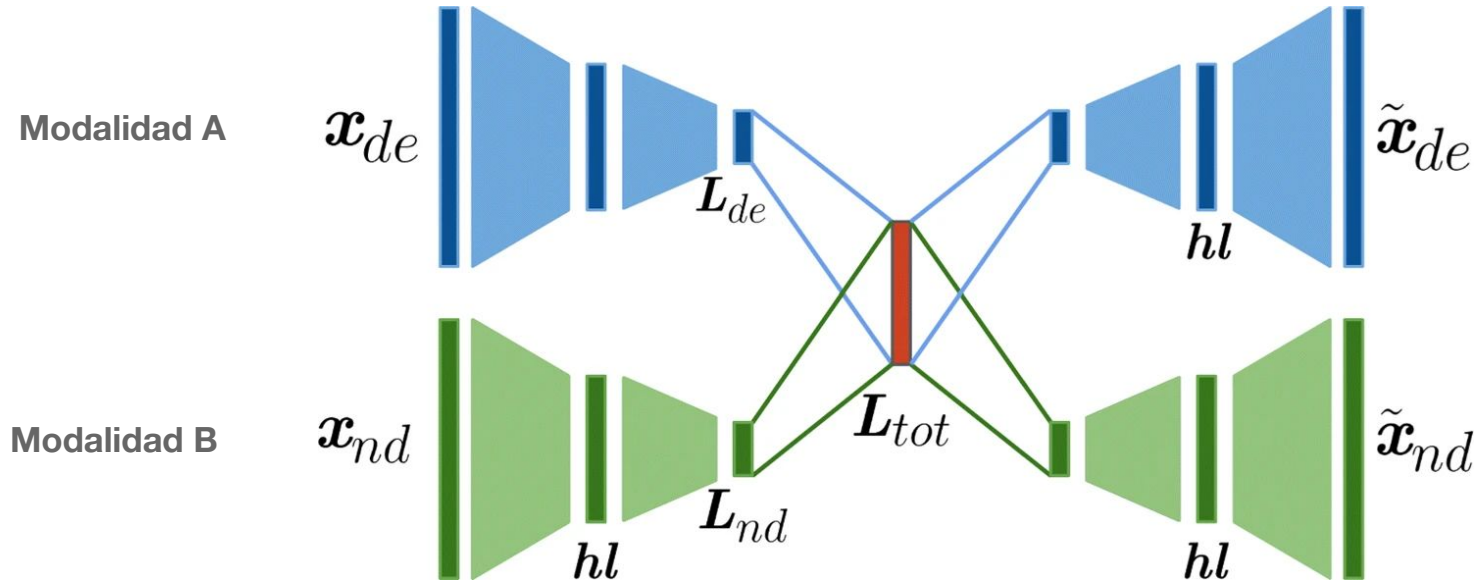Figure: Dimension Reduction of tumor profiles using autoencoders (Palazzo M.)
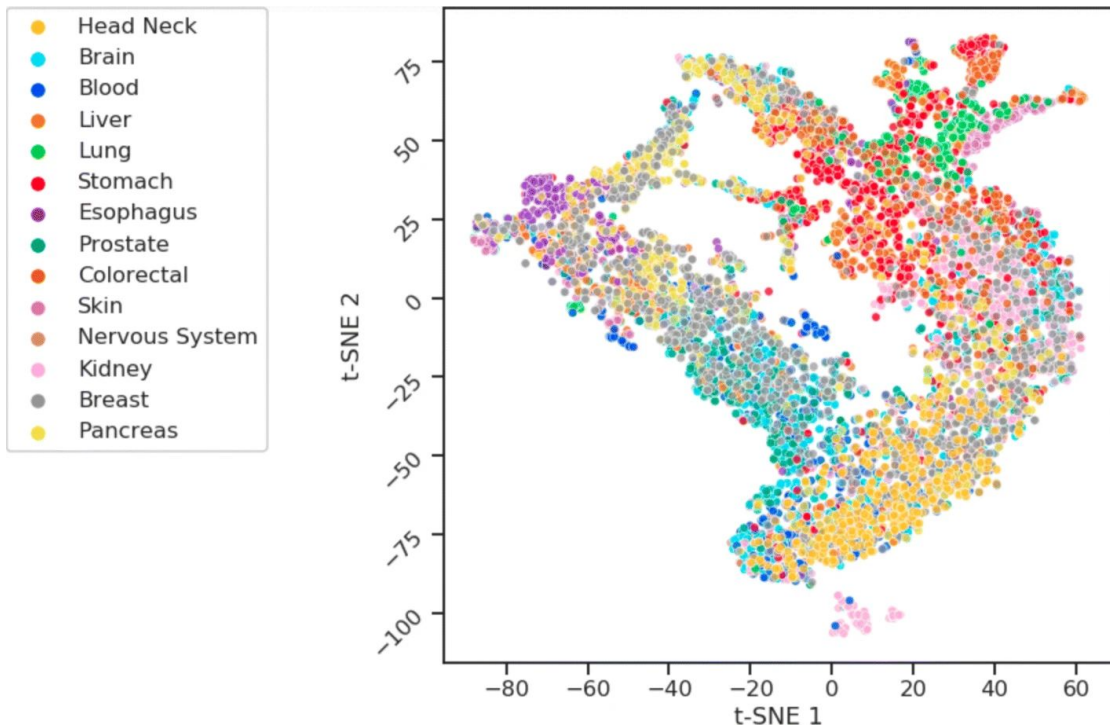
Feature extraction methods

Autoencoder multi-modal

Los autoencoders son redes neuronales que permiten reducir la dimensionalidad de los datos para mejorar tareas de aprendizaje aguas abajo. Este trabajo propone aprender desde distintas capas de informacion biologica de manera multi-modal.

* A pan-cancer somatic mutation embedding using autoencoders. Palazzo, et. Al. *BMC Bioinformatics* 20, 655 (2019). https://doi.org/10.1186/s12859-019-3298-z

Head Neck
Brain
Blood
Liver
Lung
Stomach
Esophagus
Prostate
Colorectal
Skin
Nervous System
Kidney
Breast
Pancreas

Una mejor representación permite entender cómo se agrupan los distintos tipos de tumor.

La calidad del autoencoder multi-modal es validada por tareas de aprendizaje no supervisado en muestras de evaluacion nunca vistas por el modelo.

El objetivo es poder estudiar la distribución de distintos tipos y sub-tipos de tumor basados en sus perfiles mutacionales.

* Palazzo, et. Al.. A pan-cancer somatic mutation embedding using autoencoders. *BMC Bioinformatics* 20, 655 (2019). https://doi.org/10.1186/s12859-019-3298-z