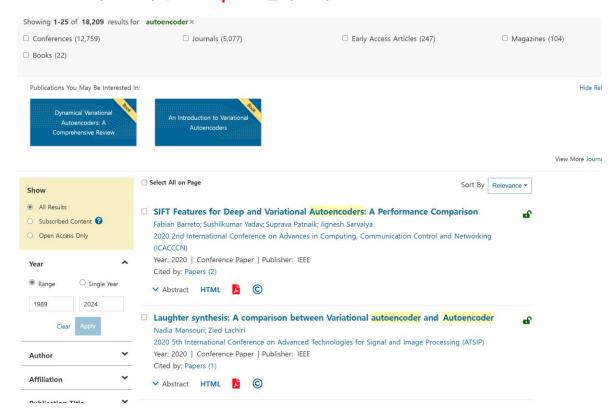
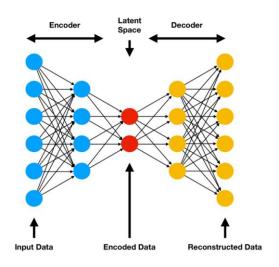
오늘 실습 코드

- 1. Hands on machine learning 책 16장 autoencoder 일부
- 2. 깃허브: https://github.com/cm8908/
- 에서 Repositories 클릭 후 Anomaly-Detection...

Autoencoder와 관련하여 IEEE Xplore 검색 결과



- 1. Encoder란? 일반적으로 입력데이터를 특정 형태로 변환하는 것. 유용한 특징을 추출
- 주로 번역기와 같은 encoder-decoder 구조에서 사용
- Autoencoder에서도 encoder-decoder 구조를 사용
- 2. Autoencoder란? 자동적인 encoder. 즉, 자동으로 입력데이터를 특정 형태로 변환함
- 정의 1: 레이블이 없는 입력 데이터에 대하여 dense (compressed)한 표현을 학습할 수 있는 인공신경망.
- 정의 2: 입력 데이터에 대하여 supervision (지도)없이 효율적인 표현을 학습할 수 있는 인공 신경망



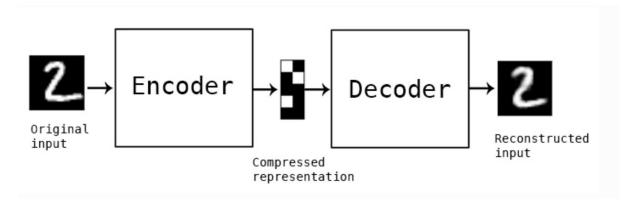
간단한 autoencoder 예

3. Latent representation (coding)? 입력 데이터의 압축된 표현으로 중간에 생성된 표현을 잠재 표현이라 함. 입력 데이터보다 대개의 경우 낮은 차원

4. Autoencoder의 구성

- 1) Encoder (recognition network): 입력데이터를 의미 있고 주로 저차원의 압축된 표현인 latent representation (잠재 표현)으로 encoding
- 2) Decoder (generative network): 잠재 표현을 다시 입력 데이터로 복원 (reconstruction). 원래의 입력 데이터와 유사하게

3) MLP와 동일한 구조. 단, 입력 뉴론의 개수 = 출력 뉴론의 개수



4) 주의:

- 우리의 목적은 의미있는 잠재 표현을 찾아내는 것으로 단순히 입력을 출력에 copy만 하는 인공신경망을 원하지는 않음.
- 입력 데이터에 비해서 잠재 표현의 차원이 더 낮기 때문에 이를 undercomplete라고 표현하며 undercomplete autoencoder의 경우에는 단순히 입력을 copy해서 출력으로 내보낼 수 없음. It is forced to learn the most important features in the input data and also drop the unimportant ones
- 5) 뒤에서 보겠지만 입력 데이터의 잠재 표현을 더 잘 학습할 수 있게 추가적인 방법들도 있음
- 입력에 noise를 줄 수도 있고 잠재 표현의 크기를 줄이는 방법도 있다

5. Autoencoder의 학습 목표

- 입력 데이터만을 활용하는 비지도 학습으로 입력데이터와 복원된 데이터의 차이 (reconstruction loss)를 최소화하는 방향으로 학습
- 수식:

MSE Loss =
$$\frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} (x_i - \hat{x}_i)^2$$

여기서:

- N은 데이터 포인트의 총 수,
- x_i 는 입력 데이터의 i-번째 요소,
- \hat{x}_i 는 해당 입력 데이터에 대한 Autoencoder의 출력의 i-번째 요소를 나타냅니다.

6. (실습) 간단한 autoencoder build

- 파이토치(PyTorch)를 사용하여 간단한 오토인코더(Autoencoder)를 정의하는 것

- 784 -> 32 -> 784

- 1) 인코더: 입력 크기 784 (28x28), 활성화 함수: ReLU
- 2) 디코더: 인코더에서 압축된 특징을 다시 784차원으로 복원
- 3) forward 메서드: 주어진 입력 'x'를 인코더를 통과시켜 압축하고, 디코더를 통과시켜 다
- 시 복원한 값을 반환
- 4) 하이퍼파라미터 설정
- encoding_dim: 압축된 특징의 차원으로 32차원
- adam optimizer
- BCELoss: binary cross entropy loss

Epoch: 1, Loss: 0.2324

Epoch: 2, Loss: 0.1776

Epoch: 3, Loss: 0.1548

Epoch: 4, Loss: 0.1441

Epoch: 5, Loss: 0.1418

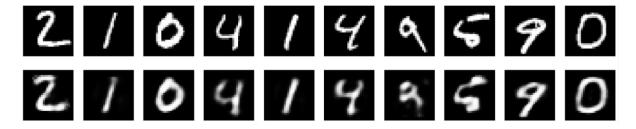
Epoch: 6, Loss: 0.1244

Epoch: 7, Loss: 0.1194

Epoch: 8, Loss: 0.1185

Epoch: 9, Loss: 0.1189

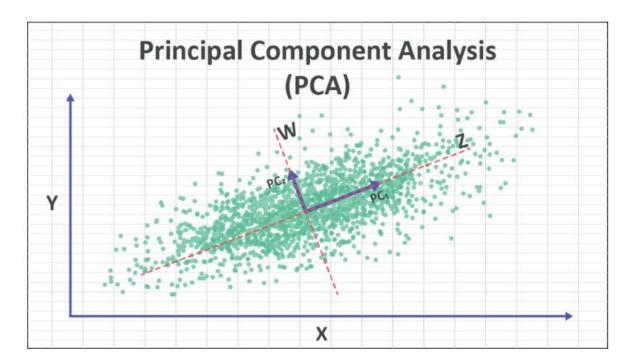
Epoch: 10, Loss: 0.1119



8. Autoencoder와 차원 감소의 유사성

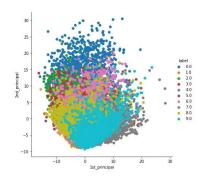
- Autoencoder는 입력 데이터를 그 보다 저차원의 latent (잠재) 표현으로 바꾼다
- 이는 PCA (principal component analysis)와 유사하지 않나?

Recall: PCA: '정보 손실'을 최소화하면 D차원을 d차원으로 변환 (d<D). 즉, 차원 축소. 목표: 차원 축소시에 변환된 데이터들의 분산을 최대로 하는 축을 찾음.



아래 MNIST dataset을 2차원으로 차원 축소 후에 시각화. Class간 overlapping이 많이 되어서 구분이 어려움

실제 고차원 데이터의 시각화 목적에서는 T-SNE가 많이 사용됨



t-SNE (t-Distributed Stochastic Neighbor Embedding)

- 각 데이터 포인트 간의 유사성을 보존하면서 저차원으로의 매핑을 수행
- 군집 간의 거리를 잘 유지

9. (실습) Autoencoder와 PCA의 유사성

- Linear activation만 사용, cost function은 MSE (mean square error)
- 이와 같은 경우 PCA를 수행하는 것과 같은 결과를 줌
- 3D dataset을 2D로 투영 (projection)시키는 예

구글에서 "hands on machine learning github" 로 검색

아래 Quick Start에서 "open in Colab" 클릭

Quick Start

Want to play with these notebooks online without having to install anything?

Use any of the following services (I recommended Colab or Kaggle, since they offer free GPUs and TPU:

WARNING: Please be aware that these services provide temporary environments: anything you do will be while, so make sure you download any data you care about.

Open in Colab

아래 코드 추가로 3D random data 시각화

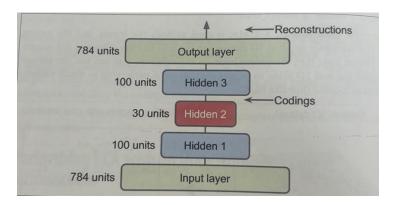
```
fig = plt.figure()
ax = fig.add_subplot(111, projection='3d')
ax.scatter(X_train[:, 0], X_train[:, 1], X_train[:, 2], c='r', marker='o')

ax.set_xlabel('X-axis')
ax.set_ylabel('Y-axis')
ax.set_zlabel('Z-axis')

plt.title('3D Scatter Plot')
plt.show()
```

10. Stacked (deep) autoencoder

- 여러 개의 hidden layer를 갖는 오토인코더
- 중간 hidden layer를 기준으로 대부분 대칭구조
- < MNIST dataset에 대한 stacked autoencoder 예>



11. (실습) Stack autoencoder for MNIST dataset

- keras 사용.
- - original image와 autoencoder 학습 후에 reconstruction된 image들 보여줌
- SELU (scaled exponential linear unit) 활성화 함수 사용
- 손실 함수로는 이진 교차 엔트로피(binary crossentropy)를 사용하고, 최적화기로는 확률적 경사 하강법(SGD)을 사용
- 20 epoch 학습



12. Fashion MINST dataset 소개

- Fashion MNIST는 10개의 다른 의류 class에 속하는 흑백 28x28 크기의 패션 관련 이미지로 구성
- 각 image는 10개의 class 중 하나에 속함. 각 class는 다양한 의류 아이템을 나타냄
- MNIST 와 유사하지만 좀 더 복잡한 image를 다루기 위해 사용, 분류기 benchmark
 - 1. T-shirt/top
 - 2. Trouser
 - 3. Pullover
 - 4. Dress
 - 5. Coat
 - 6. Sandal
 - 7. Shirt
 - 8. Sneaker
 - 9. Bag
 - 10. Ankle boot

각 이미지는 흑백(1채널)이며, 해상도는 28x28 픽셀⁴



13. (실습) Visualizing Fashion MNIST

- T-SNE 사용



13. Autoencoder에서의 tying (sharing) weights

- 위와 같이 대칭적인 autoencoder에서 사용되는 테크닉
- 인코더와 디코더 간의 가중치를 공유. 즉, 인코더와 디코더의 가중치 행렬이 같아짐
- Why? 학습 가능한 모델의 파라미터 수를 감소시킴. 더 적은 데이터로도 학습되거나, 계산 및 메모리 자원 절약
- 자연어 처리등에서도 사용

14. (실습) Tying weights

It is common to tie the weights of the encoder and the decoder, by simply using the transpose of the encoder's weights as the decoder weights. For this, we need to use a

custom layer.



16. Pre-training (사전 훈련)

- 주로 large dataset에서 일반적인 특징을 학습한 후에 더 작은 데이터셋이나 특정 작업에 대해서 fine-tuning하는 방법을 포함
- 초기 가중치를 설정하고 모델의 초기 특성을 학습함으로써, 학습의 안정성을 높이고 성능을 개선
- 장점: 1) 데이터 부족 문제 해결 2) 초기 가중치 설정을 통한 학습 초기화 3) 특정 작업에 맞게 fine-tuning을 통한 학습 시간과 데이터 양 절약
- 한가지 방법은 large 비지도 학습 데이터셋에 대해서 모델을 미리 훈련
- 최근 여러가지 computer vision과 같은 task에서 pre-training의 중요성이 많이 연구됨
- 여기서는 오토인코더를 사용한 pre-training 보여줌

17. Unsupervised pretraining using stacked autoencoder (스텍 오토인코더를 사용한 비지도 사전 학습)

- Label이 없는 large 데이터셋이 있으면 모든 데이터로 autoencoder 학습
- 실제 classification과 같은 문제에 autoencoder의 lower (하위) layer를 재사용
- Lower layer: input에 가까운 hidden layer를 부르는 말

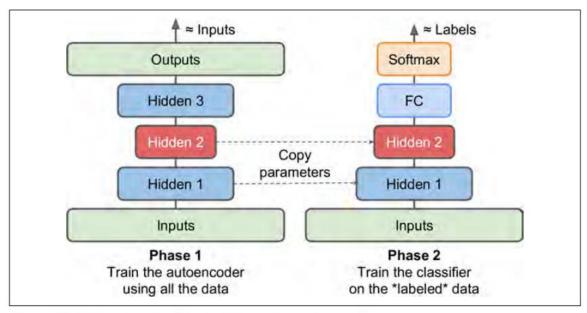


Figure 15-8. Unsupervised pretraining using autoencoders

- 왜 lower layer를 재사용? Lower layer에서 추출된 특성이 더 단순하거나 일반적인 특성을 나타냄
- upper (상위) layer: 고수준의 의미 파악 또는 작업과 관련된 특징을 학습

18. Denoising autoencoder

- 입력 데이터에 임의의 노이즈 추가, 오토인코더가 이 노이즈를 제거하고 정상적인 입력을 복원하도록 학습. 단, 학습 시에만 사용
- Goal: 입력을 출력에 copy하는 것을 막고 패턴 추출
- 또는, Dropout 방법 사용, 즉, 훈련 중에 무작위로 선택된 일부 뉴런을 비활성화 시킴
- Goal: 더 강력하고 일반화된 특성 학습하고 overfitting 줄임

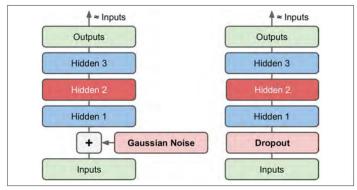
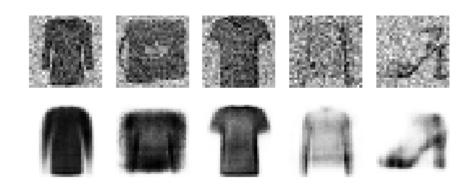


Figure 15-9. Denoising autoencoders, with Gaussian noise (left) or dropout (right)

19. (실습) fashion MNIST dataset을 활용한 stacked denoising autoencoder

- (위) Gaussian noise 더함 (아래) reconstruction



- (위) Dropout 사용 (아래) reconstruction

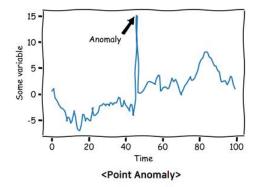


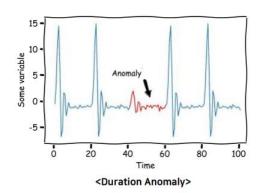
19. Outlier detection이란?

- dataset에서 일반적인 패턴에서 벗어나는 이상치를 찾는 데이터 마이닝 기술. 이상치는 대부분의 데이터 포인트와는 다르게 동작하는 관측치로 정의됨
- 응용 예
- 1) 사기 탐지(Fraud Detection): 금융 거래나 신용 카드 사용과 같은 금융 활동에서 이상 치를 감지하여 사기 행위를 식별
- 2) 제조업에서의 품질 관리(Quality Control in Manufacturing): 제조 과정에서 제품 불량을 감지하고, 이상치를 찾아 공정을 개선
- 3) 네트워크 보안: 이상치 감지는 네트워크에서의 이상 행위를 식별하고 보안 위협을 탐지하는 데 사용

20. Autoencoder를 사용한 이상치 감지 (outlier detection)

- 기본 idea: 정상 시계열 데이터로 autoencoder 학습 후에 새로운 test 데이터에 대해서 reconstruction error를 사용해서 정상 패턴에서 벗어난 이상치 탐지
 - 1. 시점 이상: 비정상적인 값에 도달한 단일 시점 또는 연속적인 시점의 집합
 - 2. 기간 이상: 특정 구간에서 이상 현상 발견





유명한 논문: LSTM-based encoder-decoder for multisensory anomaly detection, ICML 2016.

LSTM-based Encoder-Decoder for Multi-sensor Anomaly Detection

Pankaj Malhotra, Anusha Ramakrishnan, Gaurangi Anand, Lovekesh Vig, Puneet Agarwal, Gautam Shroff {MALHOTRA.PANKAJ, ANUSHA.RAMAKRISHNAN, GAURANGI.ANAND, LOVEKESH.VIG, PUNEET.A, GAUTAM.SHROFF} @ TCS.COM
TCS Research, New Delhi, India

Abstract

Mechanical devices such as engines, vehicles, aircrafts, etc., are typically instrumented with numerous sensors to capture the behavior and health of the machine. However, there are often external factors or variables which are not captured by sensors leading to time-series which are inherently unprovided by the for instance man

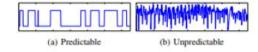


Figure 1. Readings for a manual control sensor.

example, a laden machine behaves differently from an un-

- 1) 입력 데이터 준비: 정상 시계열 데이터를 사용해서 autoencoder 학습
- 2) Autoencoder 구조 설정: RNN/LSTM/Transformer와 같은 시계열 데이터에 적합한 autoencoder의 구조 선택
- 3) Reconstruction loss 정의: 목적 함수로 입력과 재구성된 출력 간의 손실을 측정하는 reconstruction loss 정의. 주로 MSE 사용
- 4) Autoencoder 학습: 정상 데이터 만을 사용하여 autoencoder 학습. 학습이 끝나면 모델은 주어진 입력을 정상 패턴으로 잘 복원하는 능력을 갖게 됨
- **5) test data로 autoencoder 평가:** 학습한 autoencoder를 사용하여 test 데이터를 사용하여 reconstruction 시도 후 reconstruction error 계산
- 6) Threshold 설정: 정상 데이터의 reconstruction error 분포를 고려하여 임계값 설정. 임계값 이상의 reconstruction error를 갖는 데이터는 이상치로 간주

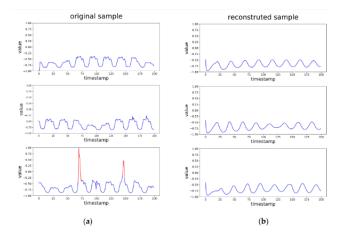
정상 데이터로 autoencoder로 학습 후에

(왼쪽) 새로운 test data 입력

(오른쪽) 왼쪽의 입력에 대한 reconstruction

Outlier 탐지: 왼쪽과 오른쪽의 차이가 너무 크면, 즉 threshold 이상이면

젤 아래 데이터와 같이





21. (실습) Autoencoder를 사용한 이상 감지 (outlier detection)

22. Autoencoder 모델의 한계 및 개선

- 정상 데이터만으로 학습하기 때문에, 다른 데이터가 들어와도 training set과 비슷하게 만드는 overfitting 문제가 발생하기 쉬움
- 이와 같은 문제를 해결하고자 variational autoencoder, autoencoder ensemble 방법과 GAN 기반의 outlier detection등 다양한 방법이 등장