Hyperspherical Variational Auto-Encoders

Reproduction & Analyse Critique

Mouhssine Rifaki Raphaël Rubrice

Master MVA - Computational Statistics

7 janvier 2026

Rappel : Auto-Encodeurs Variationnels

Objectif VAE : Maximiser l'ELBO

$$\mathcal{L}(\phi, \psi) = \underbrace{\mathbb{E}_{q_\psi(z|x)}[\log p_\phi(x|z)]}_{\text{Reconstruction}} - \underbrace{\mathrm{KL}(q_\psi(z|x) \| p(z))}_{\text{Régularisation}}$$

Choix standard :

- Prior : $p(z) = \mathcal{N}(0, I)$
- Postérieur : $q_\psi(z|x) = \mathcal{N}(\mu(x), \sigma^2(x) I)$

Reparamétrisation : $z = \mu + \sigma \odot \epsilon, \quad \epsilon \sim \mathcal{N}(0, I)$

Problèmes du Prior Gaussien

Basses dimensions : Gravité vers l'origine

- Prior gaussien attire tous les points vers 0.
- Empêche la séparation naturelle des clusters.

Hautes dimensions : Effet bulle de savon

- Masse concentrée sur une coquille sphérique.
- Distance euclidienne perd son sens.

Distribution de Von Mises-Fisher

Définition : Distribution sur l'hypersphère $S^{m-1} \subset \mathbb{R}^m$

$$q(z|\mu, \kappa) = C_m(\kappa) \exp(\kappa \mu^\top z), \quad \|z\|_2 = 1$$

où $C_m(\kappa) = \dfrac{\kappa^{m/2-1}}{(2\pi)^{m/2} I_{m/2-1}(\kappa)}$

Paramètres :

- $\mu \in S^{m-1}$: Direction moyenne
- $\kappa \geq 0$: Concentration ($\kappa = 0 \Rightarrow$ Uniforme)

Avantages : Prior uniforme (pas d'attraction origine), κ appris par échantillon.
Inconvénients : $C_m(\kappa)$ implique la fonction de Bessel (instabilité), Nouvelle reparamétrisation préservant les gradients à définir.

Divergence KL & Échantillonnage

Divergence KL :

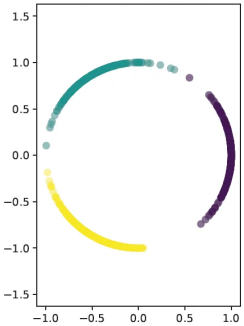
$$\mathrm{KL}(\mathrm{vMF}(\mu,\kappa)\|\mathcal{U}(S^{m-1})) = \kappa\frac{I_{m/2}(\kappa)}{I_{m/2-1}(\kappa)} + \log C_m(\kappa) + \mathrm{cst}$$

Échantillonnage (Ulrich 1984) :

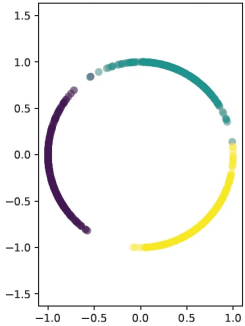
1. Échantillonner $\omega \sim g(\omega|\kappa, m)$ par acceptation-rejet (1D)
2. Échantillonner $v \sim \mathcal{U}(S^{m-2})$
3. Construire $z' = (\omega, \sqrt{1-\omega^2}v^\top)^\top$
4. Transformation de Householder : $z = U(\mu)z'$

Rejet en 1D seulement $\Rightarrow$ **pas de malédiction de la dimensionnalité**

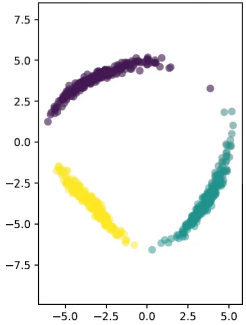
Exp. 1 : Reconstruction de 3 vMF sur sur S^1, plongé dans $\mathbb{R}^{100}$



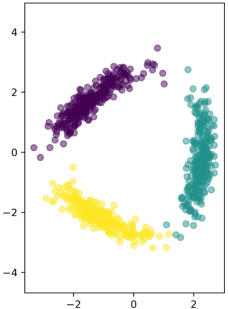
Données originales



$\mathcal{S}$-VAE : préservé



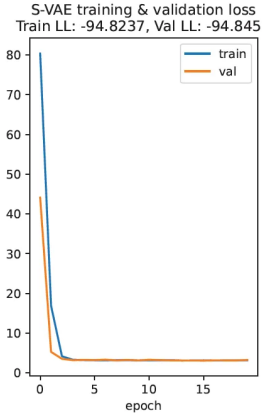
$\mathcal{N}$-VAE (β_{KL}=0.1) : déformé



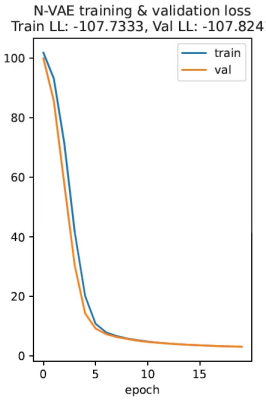
$\mathcal{N}$-VAE (β_{KL}=1) : davantage déformé

Modèle	Train LL	Val LL
$\mathcal{S}$-VAE	**-94.82**	**-94.85**
$\mathcal{N}$-VAE (β_{KL}=0.1)	-107.73	-107.82
$\mathcal{N}$-VAE (β_{KL}=1)	-97.94	-97.97

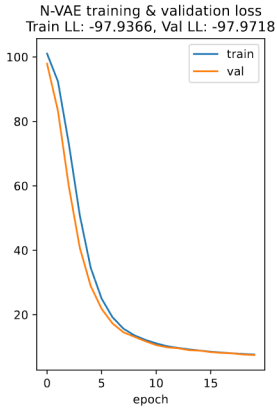
Exp. 1 : Courbes d'Apprentissage



$\mathcal{S}$-VAE : convergence rapide



$\mathcal{N}$-VAE : convergence lente (β_{KL}=0.1)



$\mathcal{N}$-VAE : convergence lente (β_{KL}=1)

$\mathcal{S}$-VAE récupère la structure circulaire avec +13 nats de log-vraisemblance

Exp. 2 : Évaluation Non-Supervisée sur MNIST (Table 1)

Métriques : LL (IWAE, 500 samples), $\mathcal{L}[q]$ (ELBO), RE (Reconstruction), KL
Protocole : 10 runs, early stopping (patience=50), warmup 100 epochs.

	$\mathcal{N}$-**VAE**				$\mathcal{S}$-**VAE**			
d	LL	$\mathcal{L}[q]$	RE	KL	LL	$\mathcal{L}[q]$	RE	KL
2	-135.73±.83	-137.08±.83	-129.84±.91	7.24±.11	**-132.50**±.73	**-133.72**±.85	**-126.43**±.91	7.28±.14
5	-110.21±.21	-112.98±.21	-100.16±.22	12.82±.11	**-108.43**±.09	**-111.19**±.08	**-97.84**±.13	13.35±.06
10	-93.84±.30	-98.36±.30	-78.93±.30	19.44±.14	**-93.16**±.31	-97.70±.32	**-77.03**±.39	20.67±.08
20	**-88.90**±.26	**-94.79**±.19	-71.29±.45	23.50±.31	-89.02±.31	-96.15±.32	**-67.65**±.43	28.50±.22
40	**-88.93**±.30	**-94.91**±.18	-71.14±.56	23.77±.49	-90.87±.34	-101.26±.33	**-67.75**±.70	33.50±.45

Observations

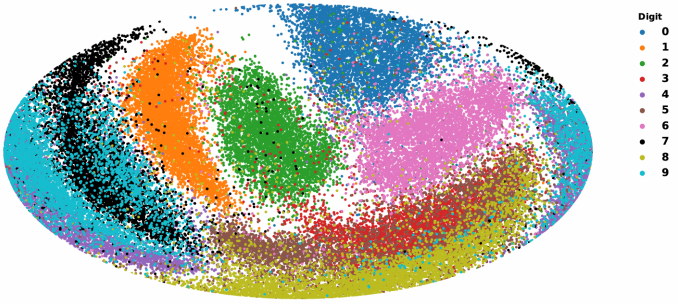
- $d \leq 10$: $\mathcal{S}$-VAE meilleur en LL
- $d \geq 20$: $\mathcal{N}$-VAE rattrape (+ de params)
- RE : $\mathcal{S}$-VAE **toujours** meilleur

Interprétation

Prior uniforme $\Rightarrow$ pas de "gravité origine"
$\Rightarrow$ meilleure utilisation de l'espace latent
$\Rightarrow$ reconstruction plus fidèle

Exp. 3 : Visualisation du dataset MNIST

N-VAE: Espace latent dans $\mathbb{R}^2$



$\mathcal{S}$-VAE: Espace latent dans $\mathcal{S}^2$ (projection de Hammer)

Les classes superposées dans l'espace latent du $\mathcal{N}$-VAE sont mieux séparées dans celui du $\mathcal{S}$-VAE (cohérent avec le papier).

Exp. 4 : Classification Semi-Supervisée (M1)

Protocole : K-NN sur l'espace latent (MNIST, 5 runs, 10% du train set).
Les valeurs indiquent l'accuracy (%). ***** : différence significative ($p < 0.01$).

	100 Labels		**600 Labels**		**1000 Labels**	
Dim (d)	$\mathcal{N}$-VAE	$\mathcal{S}$-VAE	$\mathcal{N}$-VAE	$\mathcal{S}$-VAE	$\mathcal{N}$-VAE	$\mathcal{S}$-VAE
2	**57.2** ± 3.6	50.8 ± 4.9	**57.7** ± 2.7	47.6 ± 6.2	**56.1** ± 1.7	41.4 ± 12.8
5	**71.8*** ± 2.1	66.9 ± 1.3	**79.9** ± 1.6	77.4 ± 1.3	**80.2*** ± 0.9	78.4 ± 0.7
10	70.3 ± 2.2	**72.0** ± 1.6	83.7 ± 0.7	**84.9** ± 0.3	**86.7** ± 1.3	86.4 ± 0.5
20	66.9 ± 2.5	**69.0** ± 1.3	85.4 ± 0.3	**87.2*** ± 0.5	87.7 ± 0.6	**89.3*** ± 0.4
40	65.8 ± 0.9	**69.7*** ± 2.0	83.1 ± 0.4	**87.4*** ± 0.4	85.7 ± 0.5	**89.0*** ± 0.4

- $d \leq 5$: $\mathcal{N}$-VAE meilleur (contraire au papier)
- $10 \leq d \leq 20$: $\mathcal{S}$-VAE avantage clair (cohérent avec papier)
- $d > 20$: $\mathcal{S}$-VAE avantage clair (contraire au papier)

Comparaison M1 : Résultats Originaux vs Reproduction

Table 2 du Papier (Davidson et al.)

(Entrainement sur 100% MNIST vs 10% pour nous)

	100 Labels		600 Labels		1000 Labels	
Dim (d)	$\mathcal{N}$-VAE	$\mathcal{S}$-VAE	$\mathcal{N}$-VAE	$\mathcal{S}$-VAE	$\mathcal{N}$-VAE	$\mathcal{S}$-VAE
2	72.6	**77.9***	80.8	**84.9***	81.7	**85.6***
5	81.8	**87.5***	90.9	**92.8***	92.0	**93.4***
10	75.7	**80.6***	88.4	**91.2***	90.2	**92.8***
20	71.3	**72.8***	88.3	**89.1***	90.1	**91.1***
40	**72.3***	67.7	88.0	87.4	90.3	90.4

Divergences Méthodologiques

- **Données :** 60k (Eux) vs 6k (Nous).
- **Robustesse :** 20 runs (Eux) vs 5 runs (Nous).

Analyse de la Reproduction

- **Validé :** $\mathcal{S}$-VAE domine sur $10 \leq d \leq 20$.
- **Différent :** Nos résultats favorisent $\mathcal{S}$-VAE à $d = 40$. **Hypothèse:** Moins d'overfitting du $\mathcal{S}$-VAE sur petit dataset ?

Exp. 5 : Classification Semi-Supervisée (Architecture M1+M2)

Comparaison des configurations Latent (z_1) + Latent (z_2).

Dimensions		Configuration Modèle		
z_1	z_2	$\mathcal{N}+\mathcal{N}$	$\mathcal{S}+\mathcal{S}$	$\mathcal{S}+\mathcal{N}$
5	5	**61.5***	**63.0***	**65.3***
5	10	60.9	62.7	**66.1***
5	50	62.5	62.4	**66.6***
10	5	**66.9***	**70.1***	**70.9***
10	10	**68.7***	**70.6***	**71.3***
10	50	**69.4***	**70.3***	**69.7**
50	5	69.9	**73.3***	**73.4***
50	10	68.7	**72.7***	**73.1***
50	50	**76.3***	**71.9***	**74.0***

Tendances Observées

- Performance $\propto$ Dimension de z_1.
- Optimum atteint pour $z_1 = 50$ (comme dans le papier).

Stratégie $\mathcal{S}+\mathcal{N}$

L'hybridation est la stratégie la plus robuste (Meilleur score ou équivalent dans **8/9** cas).

Comparaison avec Résultats Originaux

Papier (Table 3) :

Latent Dimensions		Model Configuration		
Dim (z1)	**Dim (z2)**	$\mathcal{N}+\mathcal{N}$	$\mathcal{S}+\mathcal{S}$	$\mathcal{S}+\mathcal{N}$
5	5	90.0	**94.0***	93.8
5	10	90.7	94.1	**94.8***
5	50	90.7	92.7	**93.0***
10	5	90.7	91.7	**94.0***
10	10	92.2	**96.0***	**95.9***
10	50	92.9	95.1	**95.7***
50	5	92.0	91.7	**95.8***
50	10	93.0	95.8	**97.1***
50	50	93.2	94.2	**97.4***

Écarts :

- Même que précédemment

Conclusion :

- Nos résultats confirment que $\mathcal{S}+\mathcal{N}$ est le plus intéressant (Meilleur ou comparable partout)
- Reproduction complète infaisable (coût computationnel)

Analyse des Divergences avec la Référence

1. Volume de Données (Facteur Dominant)

Passage de 60k (Papier) à 6k (Nous) images $\Rightarrow$ Baisse mécanique de la généralisation (10-15%).

2. Stabilité Statistique

5 runs vs 20 runs. La variance d'initialisation devient importante sur les petits datasets $\Rightarrow$ écarts moins significatifs.

3. Convergence de κ

Le paramètre de concentration κ converge plus lentement en haute dimension, potentiel sous-apprentissage.

Ce qui est Nouveau

Contributions :

1. κ appris (vs fixé dans Guu et al. 2018)
2. Extension reparamétrisation par rejet (Lemme 2)
3. Prior uniforme sur hypersphère

Points intéressants :

- Design espace latent conscient de la géométrie
- Meilleure séparabilité des clusters en basse dim.
- Adapté aux données directionnelles
- Amélioration prédiction de liens (graphes)

Limitations

Faiblesses :

- Collapse haute dimension : Difficulté d'estimation lorsque $\kappa \gg d$, aire $S(m-1) \to 0$ quand $m \to \infty$
- vMF moins expressif (1 param κ) que gaussienne diagonale
- Coût et stabilité : gradients des fonctions de Bessel, échantillonnage par rejet

Manquant :

- Pas de comparaison avec β-VAE
- Pas d'analyse théorique de quand $\mathcal{S}$-VAE est meilleur
- Manque de discussion plus poussée sur l'implémentation stable de $\mathcal{S}$-VAE (κ grand, contraintes sur le modèle)

Difficultés reproduction :

- $\sim$1h/run (training set complet) $\times$ 10-20 runs $\times$ configs

Bilan

Papier :

- VAE hypersphérique avec distribution vMF
- κ appris, avantages en basse dimension

Notre reproduction :

- Récupération variété circulaire : OK
- Table 1 (évaluation non-supervisée) : OK
- Tendances M1 pour $d \geq 10$: OK
- Valeurs absolues : différentes (contraintes calcul)

Leçon : La géométrie de l'espace latent compte.

Pour aller plus loin

Papier

Davidson et al., *Hyperspherical Variational Auto-Encoders*
`arxiv.org/abs/1804.00891`

Code

`github.com/blackswan-advitamaeternam/HVAE`