MÉTODOS E MODELOS AVANÇADOS EM CIÊNCIA DE DADOS

Aula 05 - *Autoencoders* (AEs)

Prof. Rafael G. **Mantovani**

UTFPR
UNIVERSIDADE TECNOLÓGICA FEDERAL DO PARANÁ

Universidade Tecnológica Federal do Paraná (UTFPR)
Especialização em Ciência de Dados

Roteiro

1. Introdução
2. Motivação AEs
3. AEs
4. Stacked AEs (SAEs)
5. *Denoising AEs (dAEs)*
6. Síntese / Próximas Aulas
7. Referências

Roteiro

1. **Introdução**
2. **Motivação AEs**
3. **AEs**
4. **Stacked AEs (SAEs)**
5. ***Denoising AEs (dAEs)***
6. **Síntese / Próximas Aulas**
7. **Referências**

Introdução

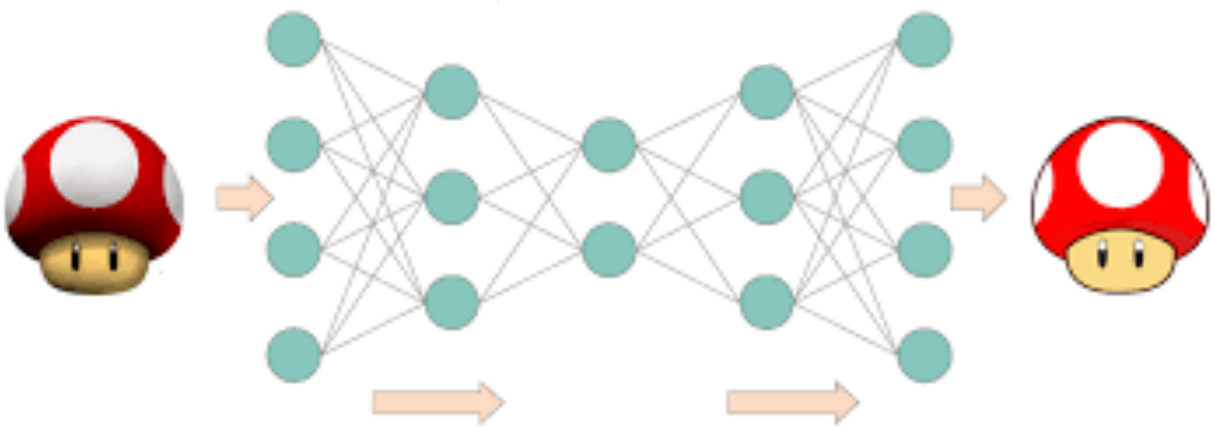


Figura de: Dagupsta (2018)

Introdução

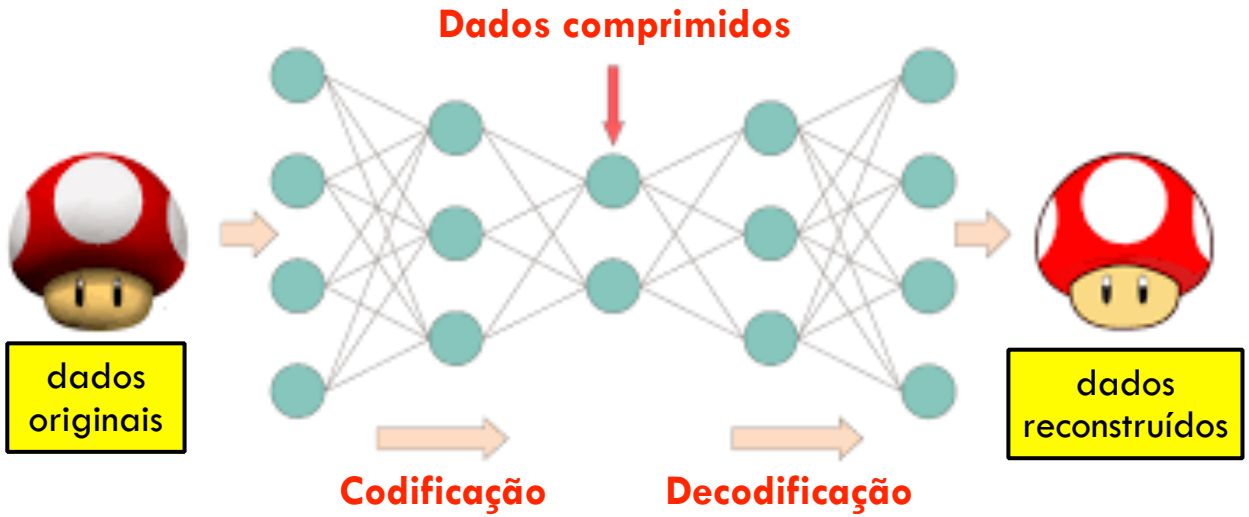


Figura de: Dagupsta (2018)

Introdução

- ***Autoencoders*** (AEs)
  - são capazes de aprender representações/padrões dos dados de entrada
  - aprendizado é de maneira não supervisionada, pois o conjunto de treinamento não é rotulado
  - representações latentes (***codings***), que possuem uma dimensionalidade muito menor que o conjunto de entrada
  - representação aprendida na camada oculta (meio)

Introdução

- Onde usamos AEs?
  - úteis para redução de dimensionalidade/visualização de dados
  - agem como **detectores** de características
  - podem ser usados para **inicialização dos pesos** sinápticos de redes neurais profundas (DNNs)
  - alguns AEs são **modelos generativos** → criam novos dados que se parecem com os dados do conjunto de treinamento

Introdução

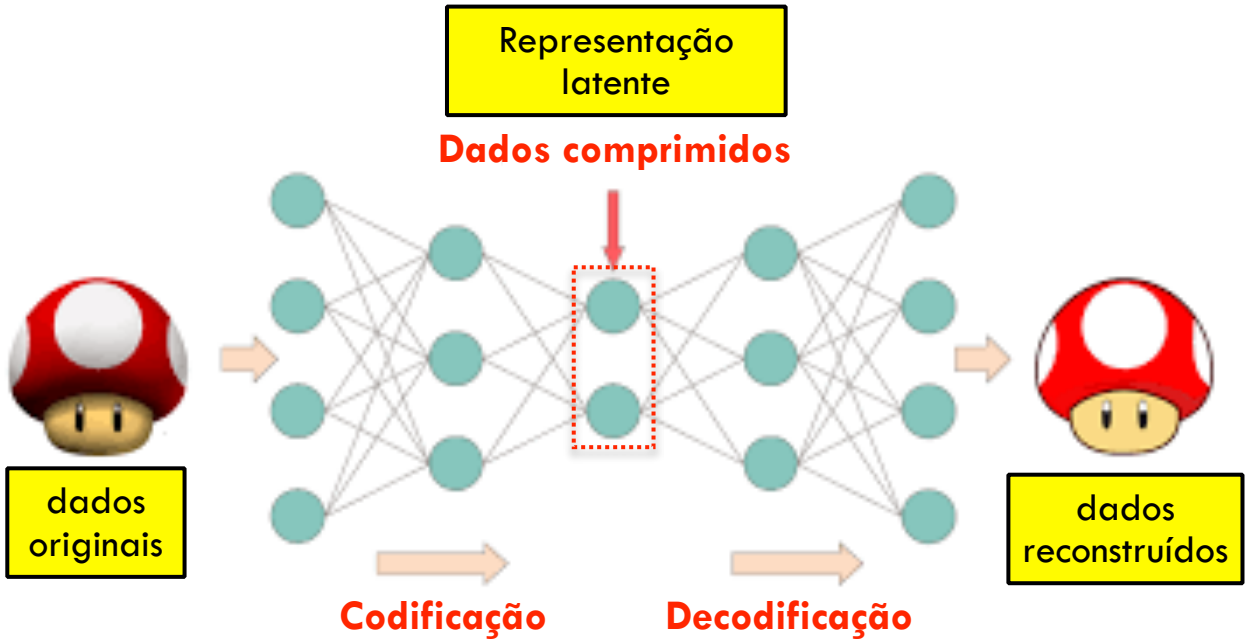


Figura de: Dagupsta (2018)

Introdução

- AEs simplesmente **aprendem** como reproduzir as entradas nas saídas do modelo
- Também podemos:
  - limitar o tamanho da r**epresentação latente** (neurônios na camada oculta)
  - adicionar ruído às entradas e treinar a rede para recuperar os dados originais
- Esses processos forçam os AEs a aprenderem formas eficientes de representar dados

Roteiro

1. Introdução
2. **Motivação AEs**
3. AEs
4. Stacked AEs (SAEs)
5. *Denoising AEs (dAEs)*
6. Síntese / Próximas Aulas
7. Referências

Motivação

- Duas sequências de números:
  - s1 = 40, 27, 25, 36, 81
  - s2 = 50, 48, 46, 44, 42, 40, 38, 36, 34, 32

- Qual é a mais fácil de memorizar?

Motivação

- Duas sequências de números:
  - s1 = 40, 27, 25, 36, 81
  - s2 = 50, 48, 46, 44, 42, 40, 38, 36, 34, 32

- Qual é a mais fácil de memorizar?

- primeiro momento, talvez s1
- mas, em s2 podemos ver que temos os números pares de 50 até 32
  - **padrões** são mais fáceis de se memorizar do que sequências em si
  - AEs tentam descobrir/explorar padrões dos dados

Motivação

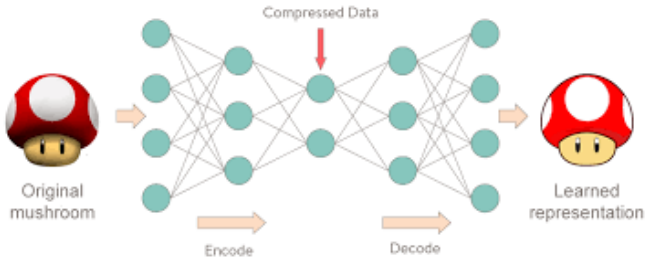
- William Chase & Herbert Simon (70's)
  - experimentos sobre a relação entre memória, percepção e reconhecimento de padrões
  - observaram jogadores de xadrez memorizando as peças de um tabuleiro
    - jogadores precisavam de 5 segundos para memorizar a posição de todas elas

Motivação

- William Chase & Herbert Simon (70's)
  - experimentos sobre a relação entre memória, percepção e reconhecimento de padrões
  - observaram jogadores de xadrez memorizando as peças de um tabuleiro
    - jogadores precisavam de 5 segundos para memorizar a posição de todas elas

- não significa que eles tem mais memória do que nós
  - eles consegue ver os **padrões** mais fácil
  - notar esses padrões os ajuda a armazenar informação de maneira mais eficiente

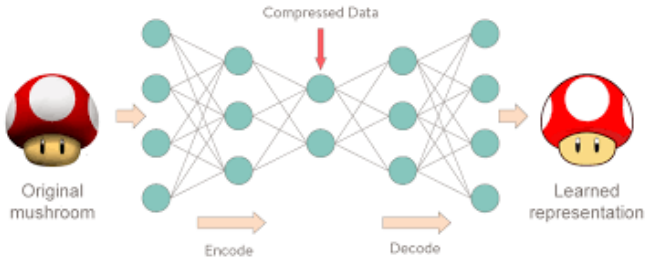
Motivação



Autoencoders (AEs)

Jogador de xadrez

Motivação



Autoencoders (AEs) **Jogador de xadrez**

- **AEs:**
  - agem como jogadores de xadrez
  - olham para os dados (entradas)
  - convertem em representações latentes/padrões
  - e geram algo que se parece bem próximo das entradas

AEs

- ***AEs*** possuem duas partes:
  - codificador - ***encoder*** (rede de reconhecimento): converte os padrões de entrada em representações latentes
  - decodificador - ***decoder*** (rede generativa): converte a representação interna e compacta nas saídas

AEs

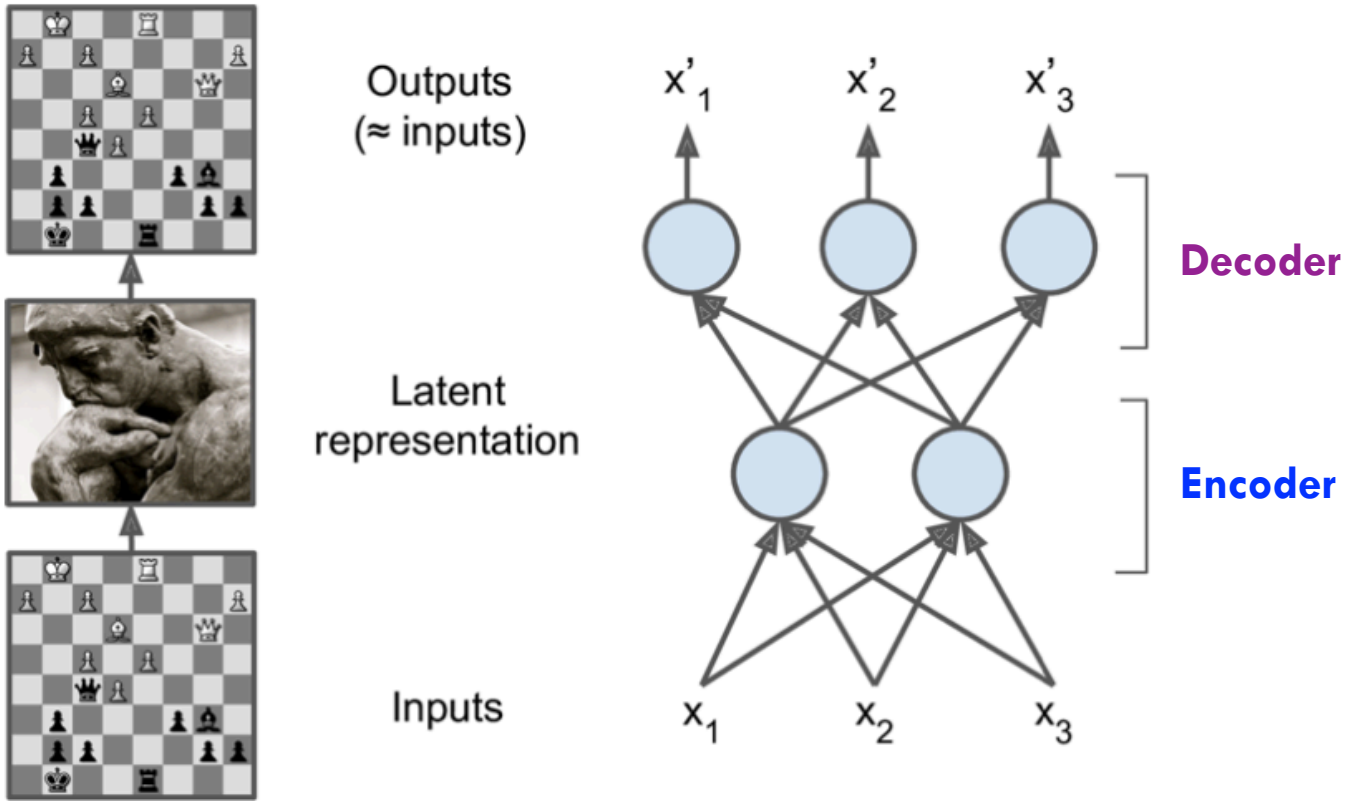
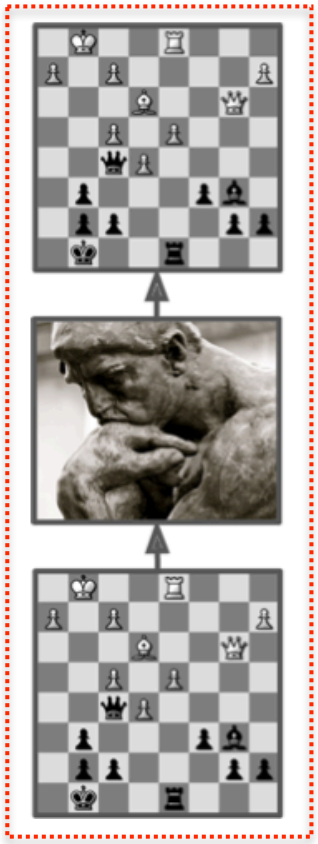


Figura de: Aurélien Gerón (2019)

AEs

Jogador de xadrez



Outputs
(≈ inputs)

Latent
representation

Inputs

***Autoencoders* (AEs)**

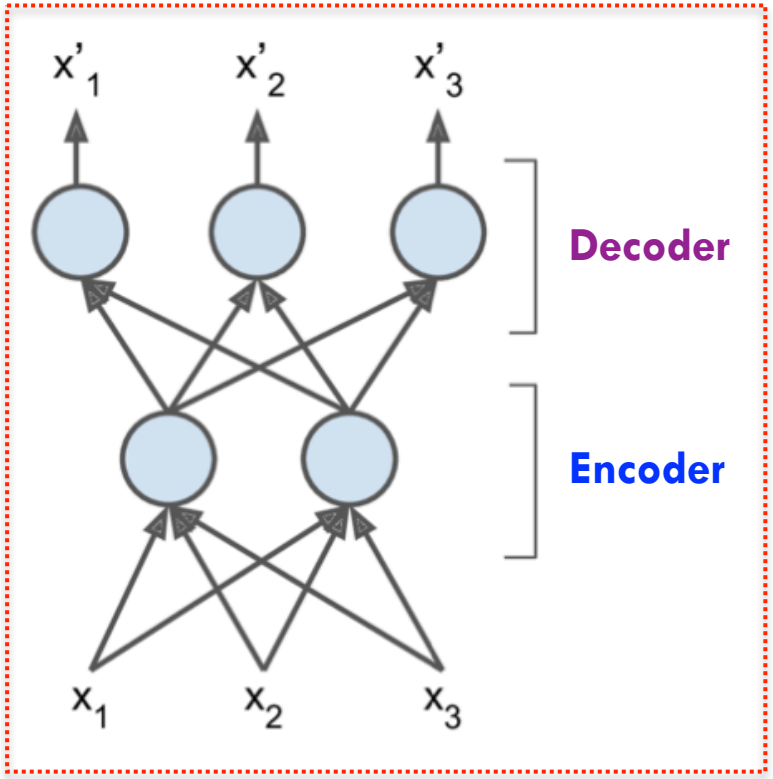
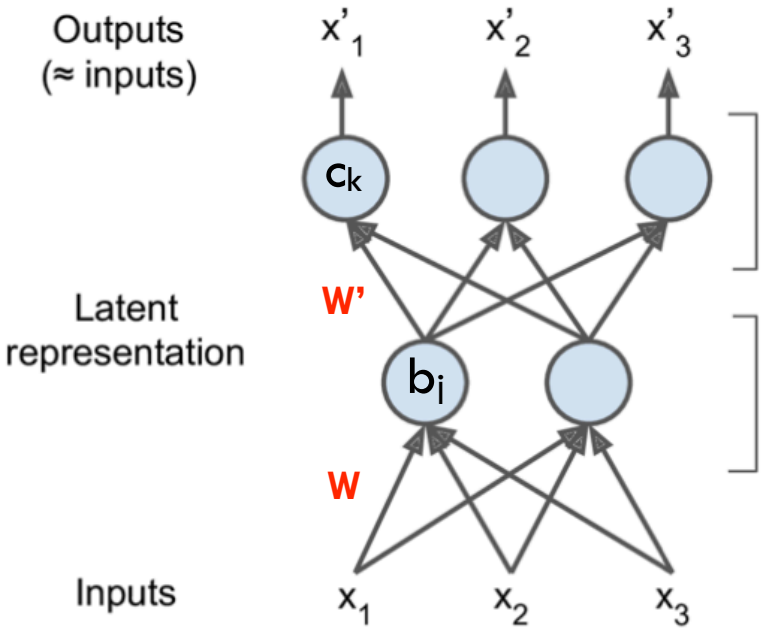


Figura de: Aurélien Gerón (2019)

AEs



Decodificação (decoder)

$$\hat{x} = o(\hat{a}(x)) = sigm(c + W'h(x))$$

$$h(x) = g(a(x)) = sigm(b + Wx)$$

Codificação (encoder)

Figura adaptada de: Aurélien Gerón (2019)

AEs

- **Observações:**
  - AE mais simples tem a mesma arquitetura que uma MLP, exceto pela camada de saída ter o mesmo tamanho que as entradas
  - camada oculta: Encoder
  - camada de saída: Decoder
  - saídas são chamadas de reconstruções, porque os AEs tentam reconstruir as entradas

Funções de custo (*loss*)

- Função de custo/erro:
  - contém uma **medida de reconstrução** (*loss reconstruction*) que penaliza o modelo quando as reconstruções são diferentes das entradas
  - vai comparar x com $\hat{x}$ para medir o quão boa é a reconstrução
  - treinamos o AE para minimizar essa função por meio do gradiente descendente

Funções de custo (*loss*)

- Para entradas binárias

$$l(f(x)) = -\sum_{k} (x_k \, log(\hat{x}_k) + (1 - x_k) \, log(1 - \hat{x}_k))$$

  - onde:
    - k é o índice da instância
    - se $x_k = 1$, tentamos "puxar" $\hat{x}_k$ para 1
    - se $x_k = 0$, tentamos "puxar" $\hat{x}_k$ para 0

Funções de custo (*loss*)

- Para entradas reais

$$l(f(x)) = \frac{1}{2} \sum_k (\hat{x}_k - x_k)^2$$

  - soma das diferenças ao quadrado
  - distância euclidiana quadrática
  - função de ativação linear na camada de saída

- Em **ambos os casos** (saídas binárias e reais) o treinamento é feito via **Backpropagation**

Roteiro

1. Introdução
2. Motivação AEs
3. AEs
4. **Stacked AEs (SAEs)**
5. *Denoising AEs (dAEs)*
6. Síntese / Próximas Aulas
7. Referências

Stacked Ads

- Os AEs
  - podem também ter várias camadas empilhadas
  - nesse caso são chamados de ***Stacked Autoenconder (SAEs)*** ou ***Deep Autoencoders (DAEs)***
  - mais camadas permitem aos AEs aprenderem padrões mais complexos
  - a arquitetura de um SAE é simétrica em relação à camada oculta das representações latentes (*coding layer*)
  - parece um "sanduíche"

Stacked Ads

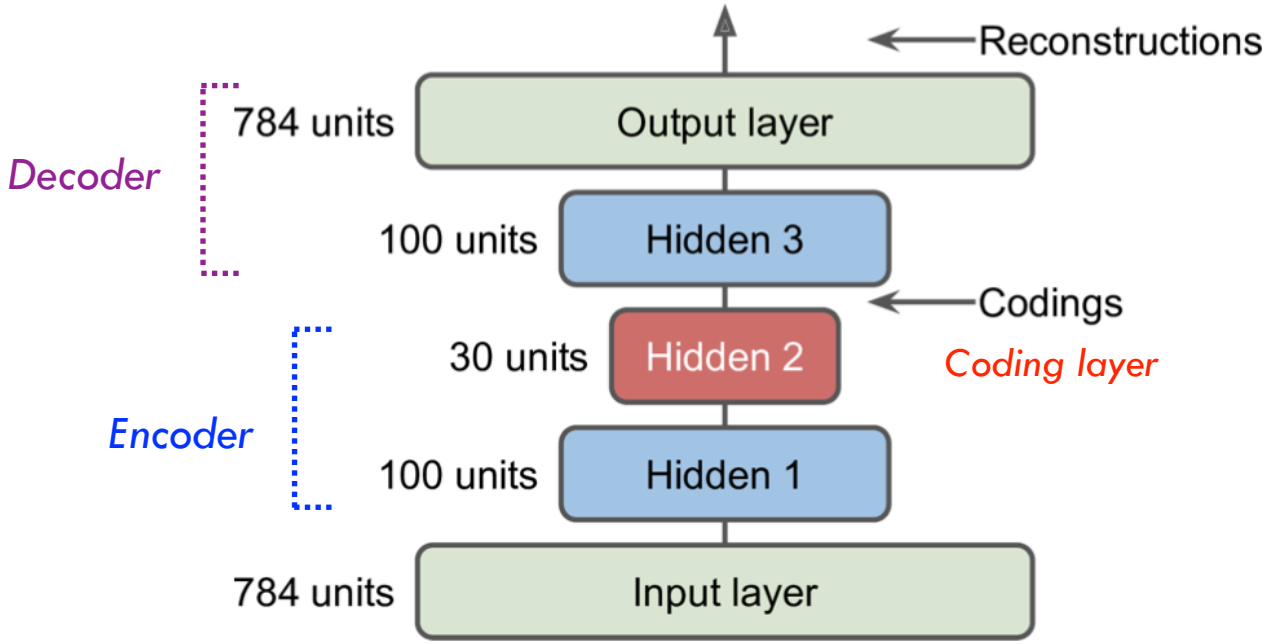


Figura de: Aurélien Gerón (2019)

Visualizando as reconstruções

- Um jeito de garantir que o AE está propriamente treinado é comparar as entradas com as saídas
  - as diferenças não podem ser significativas

Visualizando as reconstruções

- Um jeito de garantir que o AE está propriamente treinado é comparar as entradas com as saídas
  - as diferenças não podem ser significativas

Entradas

Reconstruções (saídas)

Figura de: Aurélien Gerón (2019)

Visualizando as reconstruções

Figura de: Aurélien Gerón (2019)

Reconstrução é perceptível, porém não tão boa :/

- o que fazer?
  - treinar o modelo por mais épocas
  - tornar encoder/decoder mais profundo (mais camadas)
  - aumentar o tamanho da camada oculta que armazena as representações latentes (*codings*)

Visualizando as reconstruções

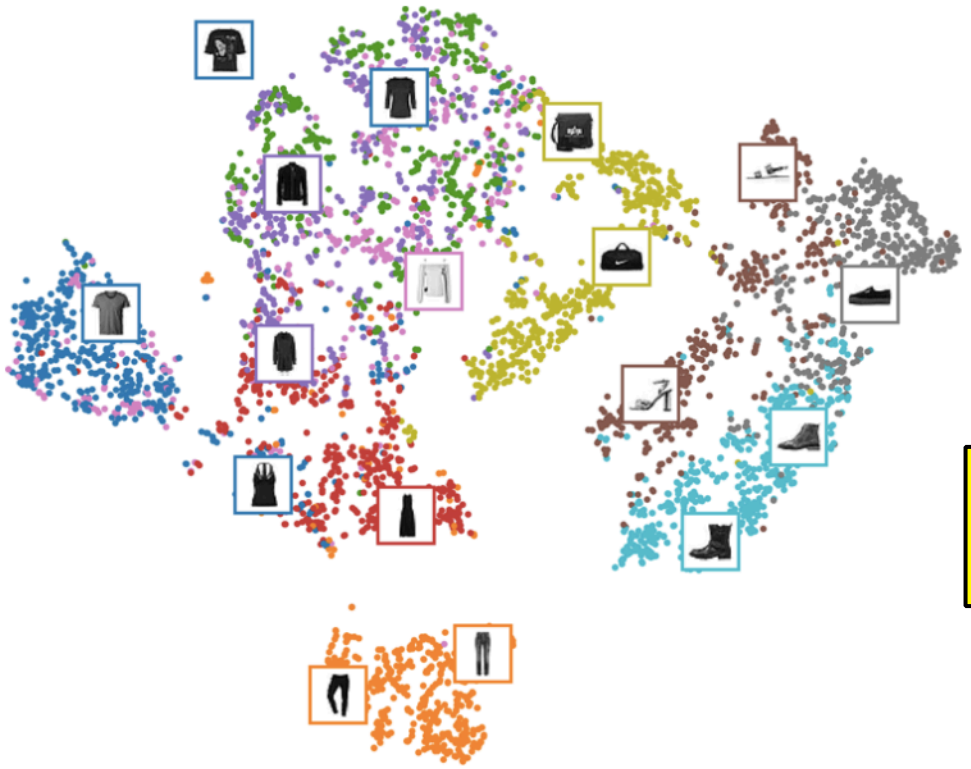
- Mas: 
  - cuidado ao definir a arquitetura
  - se a rede for muito "poderosa", ela vai mapear perfeitamente as entradas nas reconstruções sem aprender nenhum padrão útil
  - não irá extrair características úteis

SAEs

- Uma vez que o SAE é treinado, podemos usá-lo para **reduzir a dimensionalidade** do dataset
- Grande vantagem dos SAEs:
  - é serem capazes de lidar com **grandes quantidades de dados**

- Geralmente se usa os AEs para reduzir a dimensionalidade para um nível razoável, e depois alimentar uma técnica de visualização de dados (PCA, t-SNE)

SAEs



SAEs + t-SNE visualization

Figura de: Aurélien Gerón (2019)

Pré-treino usando SAEs

- **Situação:** tarefa supervisionada complexa
  - mas não temos muitos exemplos rotulados
  - a maioria dos exemplos são não-rotulados

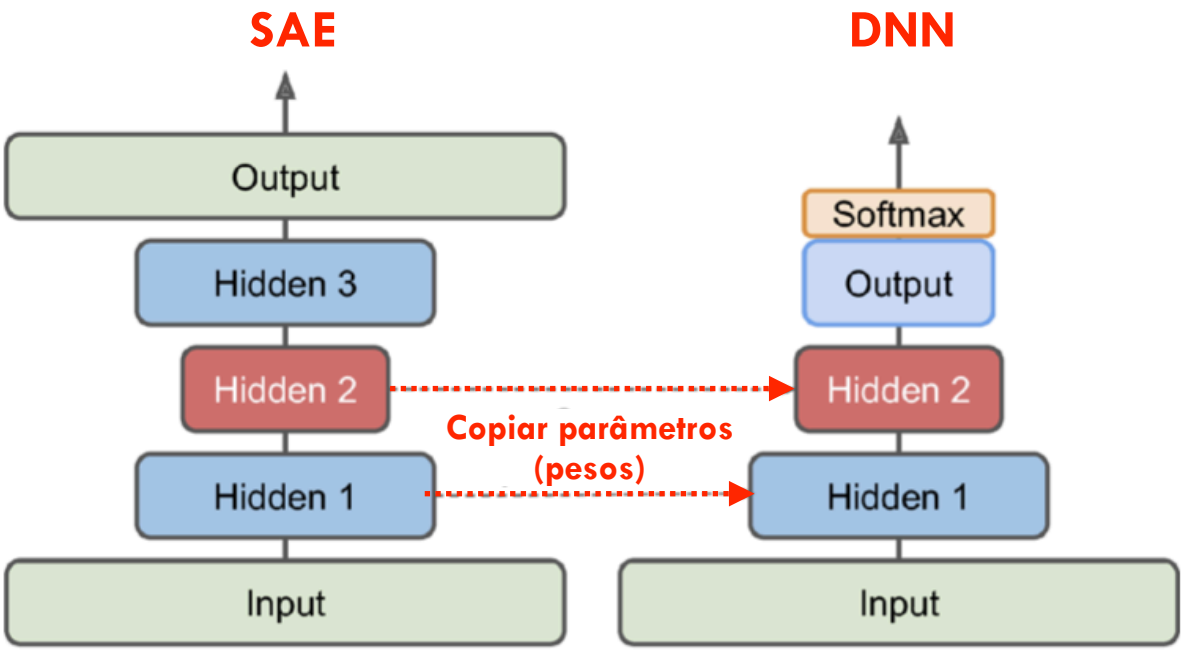
Pré-treino usando SAEs

- **Situação:** tarefa supervisionada complexa
  - mas não temos muitos exemplos rotulados
  - a maioria dos exemplos são não-rotulados

- **Solução:** encontrar uma NN que desempenhe bem em uma tarefa similar e usar os pesos sinápticos gerados por ela

  - treinar SAE com todos os dados
  - reusar os pesos sinápticos das camadas do SAE para criar uma DNN
  - treinar DNN usando apenas os dados rotulados

Pré-treino usando SAEs



Fase 1

Treinar o AE usando todos os dados

Fase 2

Treinar o classificador usando os dados rotulados

Figura de: Aurélien Gerón (2019)

Amarrando Pesos

- Quando um SAE é puramente simétrico, uma abordagem comum é "**amarrar**" os pesos de todas as camadas do decodificador (decoder) às camadas do codificador (encoder)
  - Isto reduz pela metade o número de pesos no modelo
  - acelerando o aprendizado
  - limitando o risco de overfitting

Amarrando Pesos

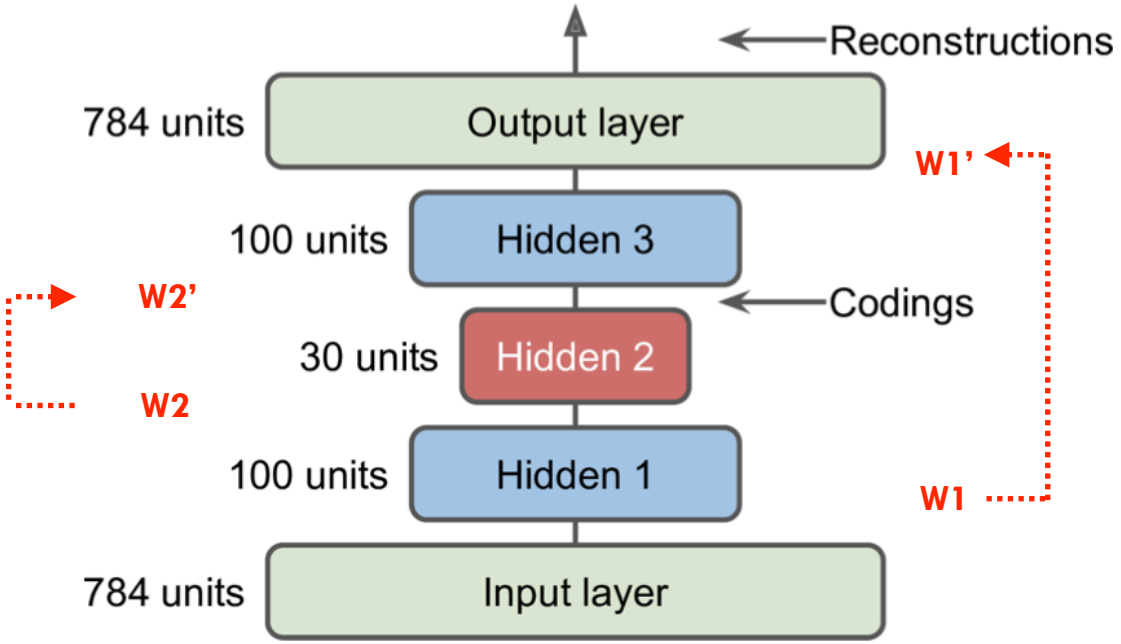


Figura de: Aurélien Gerón (2019)

Outros modelos de AEs

- **Convolutional AEs** (CAEs)
  - AEs puros tendem a não funcionar bem com imagens (a menos que as imagens sejam pequenas)
  - CNNs são nitidamente superiores para tarefas com imagens
  - **Encoder** é uma **CNN comum,** composta de camadas convolucionais e pooling
    - reduz a dimensionalidade espacial dos dados mas aumenta a profundidade (filtros)
  - **Decoder** faz o inverso
    - aumenta os dados, e reduz a profundidade
    - usar camadas **convolucionais transpostas**

Outros modelos de AEs

- AEs Recorrentes (RAEs)
  - AEs para sequências: séries temporais ou textos
  - RNN tem desempenho melhor do que DNN
  - RAE:
    - **Encoder**: é uma rede *sequence-to-vector*, que comprime a sequência de entrada em apenas um único vetor
    - **Decoder**: é uma rede *vector-to-sequence*, que reconstrói a sequência de entrada a partir da representação intermediária (vector)

Resumindo tudo até aqui …

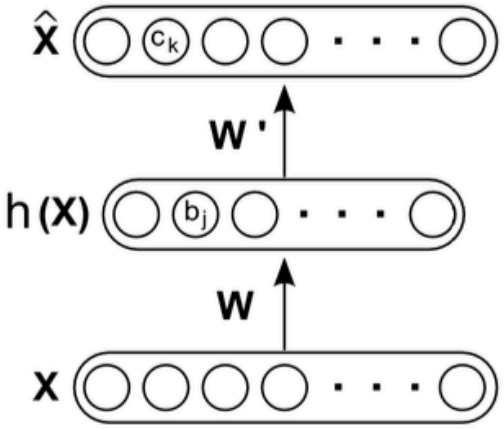
- AEs:
  - AE básico, SAE, CAEs, RAEs
- Aplicações:
  - visualização dos dados e pré-treino não supervisionado

- Temos o tamanho da camada oculta limitado, tornando o AE **subcompleto**

- Podemos:
  - permitir o AE ter uma camada oculta do mesmo tamanho que a camada de entrada, ou até maior
  - AE **sobrecompleto**

Camada subcompleta

- AE subcompleto → camada oculta é menor que a camada de entrada
  - comprime as entradas
  - comprime bem apenas para as entradas do conjunto de treinamento

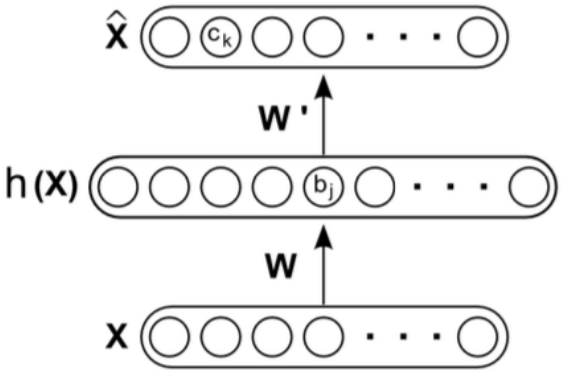


Aprende bem a distribuição dos dados de treino

Não generaliza bem para dados diferentes

Camada sobrecompleta

- AE subcompleto → camada oculta é maior que a camada de entrada



- não há compressão na camada oculta
- cada unidade oculta pode apenas copiar um diferente componente da entrada
- não há garantia de que as unidades ocultas irão extrair uma estrutura que tem significado

Roteiro

1. Introdução
2. Motivação AEs
3. AEs
4. Stacked AEs (SAEs)
5. *Denoising AEs (dAEs)*
6. Síntese / Próximas Aulas
7. Referências

Denoising AEs (dAEs)

- **Ideia:**
  - Adicionar ruídos às entradas
  - treinar o AE para recuperar os dados originais, livre de ruídos
  - ruído gerado pode ser Gaussiano ou aleatório (dropout)

Denoising AEs (dAEs)

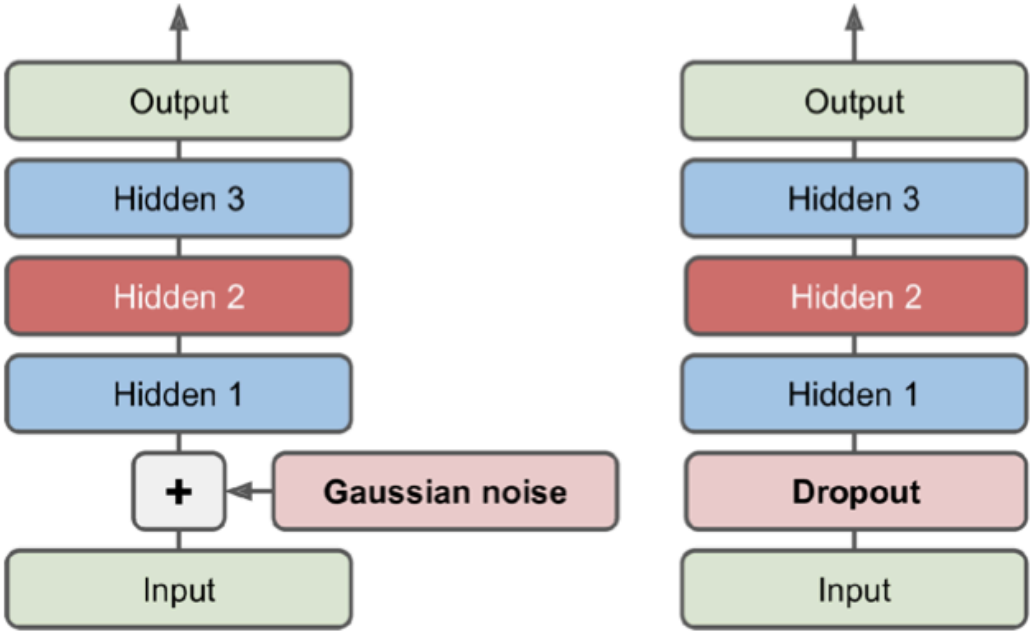
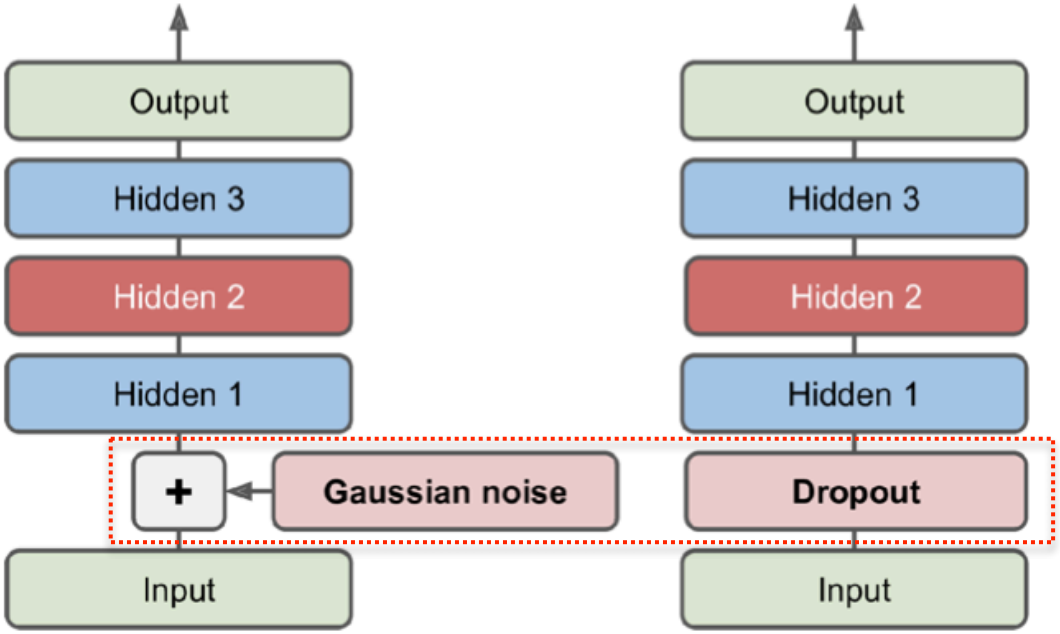


Figura de: Aurélien Gerón (2019)

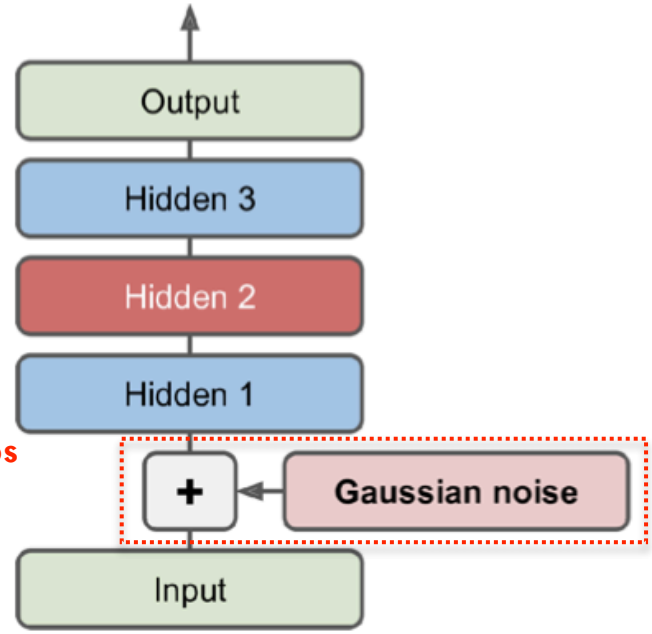
Denoising AEs (dAEs)



Inserção de ruídos (encoder)

Figura de: Aurélien Gerón (2019)

Denoising AEs (dAEs)



Inserção de ruídos (encoder) x'

- representação deve ser **robusta à** introdução de **ruídos** nos padrões
- a **reconstrução** é calculada com base **na entrada corrompida** (x')
- função de **erro** é a mesma, usando os valores das reconstruções (**outputs**) e entradas originais (**inputs**)

Figura de: Aurélien Gerón (2019)

Denoising AEs (dAEs)

- A implementação é direta/simples
  - SAE com uma camada adicional de Dropout ou ruído ligada às entradas
  - ruídos são aplicados apenas no encoder
  - dAEs podem ser usados para remover ruídos de dados em geral (textos, imagens, etc)

Denoising AEs (dAEs)

- A implementação é direta/simples
  - SAE com uma camada adicional de Dropout ou ruído ligada às entradas
  - ruídos são aplicados apenas no encoder
  - dAEs podem ser usados para remover ruídos de dados em geral (textos, imagens, etc)

Entradas com ruídos

Reconstruções (saídas)

Figura de: Aurélien Gerón (2019)

Hands on

Vamos exercitar :)
[Google Colab]

Roteiro

1. Introdução
2. Motivação AEs
3. AEs
4. Stacked AEs (SAEs)
5. *Denoising AEs (dAEs)*
6. Síntese / Próximas Aulas
7. Referências

Síntese

- *Autoencoders (AEs)*
  - compressão de informação
  - aprendizado não supervisionado (reconstruções)
  - usos:
    - redução de dimensionalidade/visualização
    - pré-treino de DNNs
    - remoção de ruídos
  - AEs, SAEs, dAEs

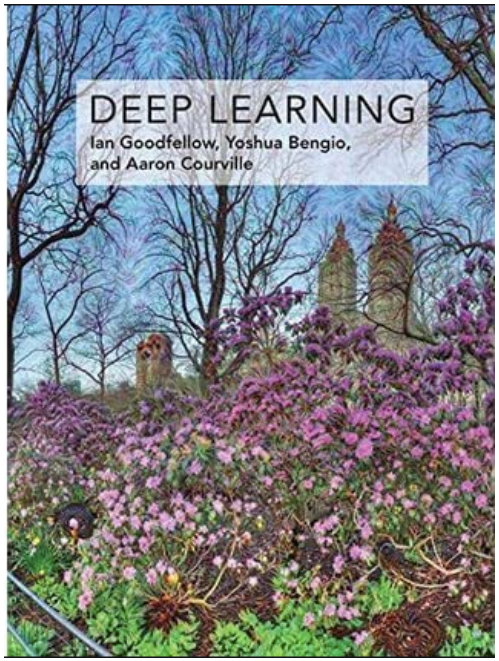
Próxima aula

- *Aprendizado por comitês*
  - Bagging
  - Boosting
  - Random Forest

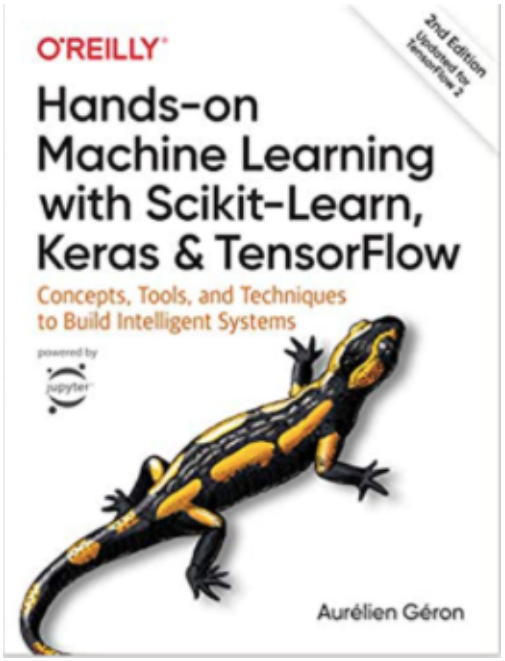
Roteiro

1. Introdução
2. Motivação AEs
3. AEs
4. Stacked AEs (SAEs)
5. *Denoising AEs (dAEs)*
6. Síntese / Próximas Aulas
7. Referências

Literatura Sugerida



(Goodfelow, Bengio, Courville; 2015)



(Géron, 2019)

Artigos

- William G. Chase & Herbert A. Simon, “Perception in chess”, Cognitive Psychology v4, no. 1 (1973): 55-81.

Obrigado :)

Prof. Rafael G. Mantovani

rafaelmantovani@utfpr.edu.br