
基于深度变分自编码器 (**VAE**) 的可视化图表特征 探索与标注方法

May 22, 2019

Haozhe Feng(冯浩哲)

11821062

Zhejiang University

State Key Lab of CAD&CG

Contents

1	摘要	3
2	介绍	3
3	模型与方法	4
3.1	变分自编码器 (VAE) 简介	4
3.2	深度神经网络结构	5
3.3	潜变量空间上的运算	6
3.3.1	自由采样	6
3.3.2	潜变量空间的平均运算	6
3.3.3	潜变量插值	6
4	结果展示	6
4.1	交互界面	6
4.2	生成效果	8
5	讨论与进一步工作	8

1 摘要

可视化图表是对数据的可视化方法，我们可以通过图表发现数据的一些特征与趋势。随着数据的海量增长，可视化图表增长的速度也十分可观。由于我们每次只能将注意力集中于一张或几张图，分析众多可视化图表变得非常耗时，同时特征挖掘也非常困难。我们对可视化图表做出潜变量模型假设，即假定高维图像是由低维潜变量经过复杂变换所生成的，并利用深度生成模型中的变分自编码器 (VAE)[1] 来对潜变量分布进行统计推断，同时利用深度学习的万能近似性质 (universal approximation)[2] 拟合从潜变量到原始输入空间的映射。利用模型对生成图表潜变量的推断，我们可以通过对低维潜变量的操作 (聚类, 插值, 微调) 来实现图表的特征探索与特征标注。

2 介绍

可视化图表 (如数据的像素图与热力图) 是对数据的可视化方法，我们可以通过图表发现数据的一些特征与趋势。随着数据的海量增长，可视化图表也飞速增长，对这些可视化图表进行特征挖掘与标注在数据分析中意义巨大。考虑到人类每次只能将注意力集中于一张或几张图，分析海量可视化图表变得非常耗时，同时特征挖掘与标准也变得非常困难。

本文提出了一种基于变分编码器 (VAE)[1] 的无监督交互式特征挖掘与标注框架，它假定高维图像是由低维潜变量经过复杂变换所生成的，并利用深度生成模型中的变分自编码器 (VAE)[1] 来对潜变量分布进行统计推断，同时利用深度学习的万能近似性质 (universal approximation)[2] 拟合从潜变量到原始输入空间的映射。利用模型对生成图表潜变量的推断，我们可以通过对低维潜变量的交互操作 (聚类, 插值, 微调) 来实现图表的特征探索与特征标注，最后我们可以利用找到的特征的潜变量分布对数据集进行聚类。

本文的主要贡献有以下三点：

1. 我们结合稠密连接网络 (DenseNet)[3] 以及全卷积图像分割网络 (U-Net)[4] 设计了一个深度层次变分自编码器模型 (DUHiV) 对图像进行潜变量推断与特征空间映射，相比于之前的 VAE 模型，该模型可以达到一个更紧的变分下界 (ELBO)
2. 我们设计了一个可视交互界面，它可以支持在潜变量分布空间上的算术运算操作 (插值, 聚类, 线性运算)
3. 我们提出了一个有效的半监督与无监督多标签标注方法，依据给定的特征和少数标注图像 (可选)，它可以对图表进行标注

我们在来自于国家电网的设备运行状态像素图数据集上对我们的方案进行了实验，代码已开源在[Github](#)，可视化交互界面放于[Vis](#)

3 模型与方法

3.1 变分自编码器 (VAE) 简介

给定一张输入图像 x ，VAE 假设它可以由一系列的低维潜变量 z 所表示，同时给定低维潜变量 z 的分布的一个采样 z' ，我们认为通过 z' 所重构的图像 x' 可以与 x 非常相似。因此，VAE 诱导出了一个推断模型和一个生成模型，它可以对后验分布 $p(z|x)$ 的分布参数用 $q_\phi(z|x)$ 进行推断，同时在给定潜变量后验分布的情况下可以对图像 x 利用 $p_\theta(x, z) = p_\theta(x|z)p_\theta(z)$ 进行生成，从而在最大化 x 的似然函数

$$p_\theta(x) = \int_z p_\theta(x, z) dz \quad (1)$$

的同时最小化模型推断后验分布 $q_\phi(z|x)$ 与真实分布 $p(z|x)$ 的 **Kullback-Leibler** 散度

$$\mathcal{D}_{KL}(q_\phi(z|x) \| p(z|x)) \quad (2)$$

在生成模型 p_θ 中，潜变量 z 被分为 L 层，记作 $z_i, i = 1, \dots, L$ ，而生成过程则可以如下刻画：

$$p(z) = \prod_{i=1}^L p(z_i), p(z_i) \sim N(0, I), i = 1, \dots, L \quad (3)$$

$$q_\phi(z|x) = \prod_{i=1}^L q_\phi(z_i|x), q_\phi(z_i|x) \sim N(\mu_i(x), \Sigma_i(x)) \quad (4)$$

$$p_\theta(x, z) = p_\theta(x|z)p(z) \quad (5)$$

$$p_\theta(x|z) = N(g_\theta(z_1, \dots, z_L), \sigma^2) \quad (6)$$

其中 $g_\theta(z_1, \dots, z_L)$ 为一个确定函数，由神经网络模型的万能近似定理来拟合。VAE 的目的旨在最大化公式 (1) 的同时最小化公式 (2)，这里就引入了变分下界

$$\mathcal{L}(\theta, \phi, x) = \log(p_\theta(x)) - \mathcal{D}_{KL}(q_\phi(z|x) \| p(z|x)) \quad (7)$$

$$= E_{q_\phi(z|x)}[\log p_\theta(x|z)] - \mathcal{D}_{KL}(q_\phi(z|x) \| p(z)) \quad (8)$$

因此，VAE 的损失函数为

$$\min_{\theta, \phi} E_{q_{\phi}(z|x)} [-\log p_{\theta}(x|z)] + \mathcal{D}_{KL}(q_{\phi}(z|x) \| p(z)) \quad (9)$$

3.2 深度神经网络结构

我们结合稠密连接网络 (DenseNet)[3] 以及全卷积图像分割网络 (U-Net)[4] 设计深度层次变分自编码器模型 (DUHiV) 作为实验中使用的 VAE, 其结构如图1所示

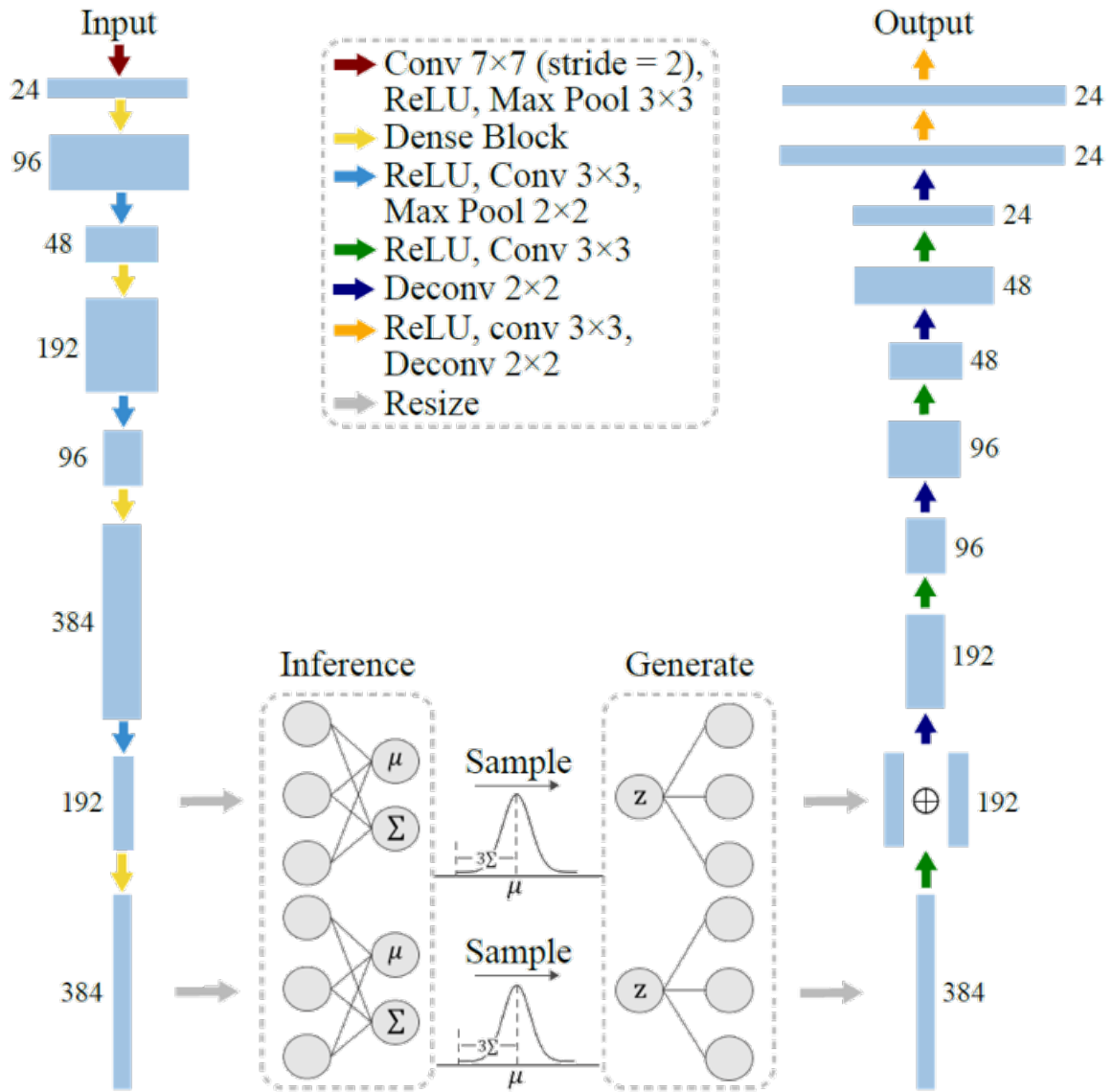


Figure 1: The DUHiV architecture with two layers of latent variables

3.3 潜变量空间上的运算

3.3.1 自由采样

我们可以自由地对潜变量先验分布 $p(z) \sim N(0, I)$ 进行采样，或者设定具体的数值，然后由 $g_\theta(z_1, \dots, z_L)$ 生成该次采样所对应的原始空间的采样 x' ，具体的例子位于文件 [Api Demo for DUHiV in SGCC.ipynb](#)。

3.3.2 潜变量空间的平均运算

给定潜变量空间的图像聚类结果后，我们需要得到某一类的代表性图像，这就需要对该类的所有样本的潜变量分布求得均值。这里我们利用 [Wasserstein 距离](#) 来对分布进行平均化，公式为

$$P = \arg \min \sum_{i=1}^n W_2^2(P, P_i) \quad (10)$$

对于服从正态分布的潜变量 $z_i \sim N(\mu_i, \sigma_i), i = 1, \dots, n$ ，可以证明此时

$$\bar{z}_{\text{wasserstein}} \sim N\left(\frac{\sum_{i=1}^n \mu_i}{n}, \frac{\sum_{i=1}^n \sigma_i}{n}\right) \quad (11)$$

3.3.3 潜变量插值

在可视化图表的特征挖掘中，展示一个图表是如何在潜变量空间中变换到另外一个图表的过程有利于显示更多特征。我们利用 **wasserstein** 距离来对因子分布进行基于最优运输方案 (Optimal Transport)[5] 的插值。可以证明，对于 $z_i \sim N(\mu_i, \Sigma_i)$ 以及 $z_j \sim N(\mu_j, \Sigma_j)$ 的插值计算为

$$z_t \sim N(t\mu_i + (1-t)\mu_j, (t\Sigma_i^{1/2} + (1-t)\Sigma_j^{1/2})^2) \quad (12)$$

4 结果展示

4.1 交互界面

我们的框架流程如图2所示，首先我们训练一个变分编码器 DUHiV 来对图像进行因子推断与生成，其次我们用该模型结合第三节中的运算对图像进行聚类，因子插值与特殊因子生成，最后我们用找到的特征对图像进行标注。

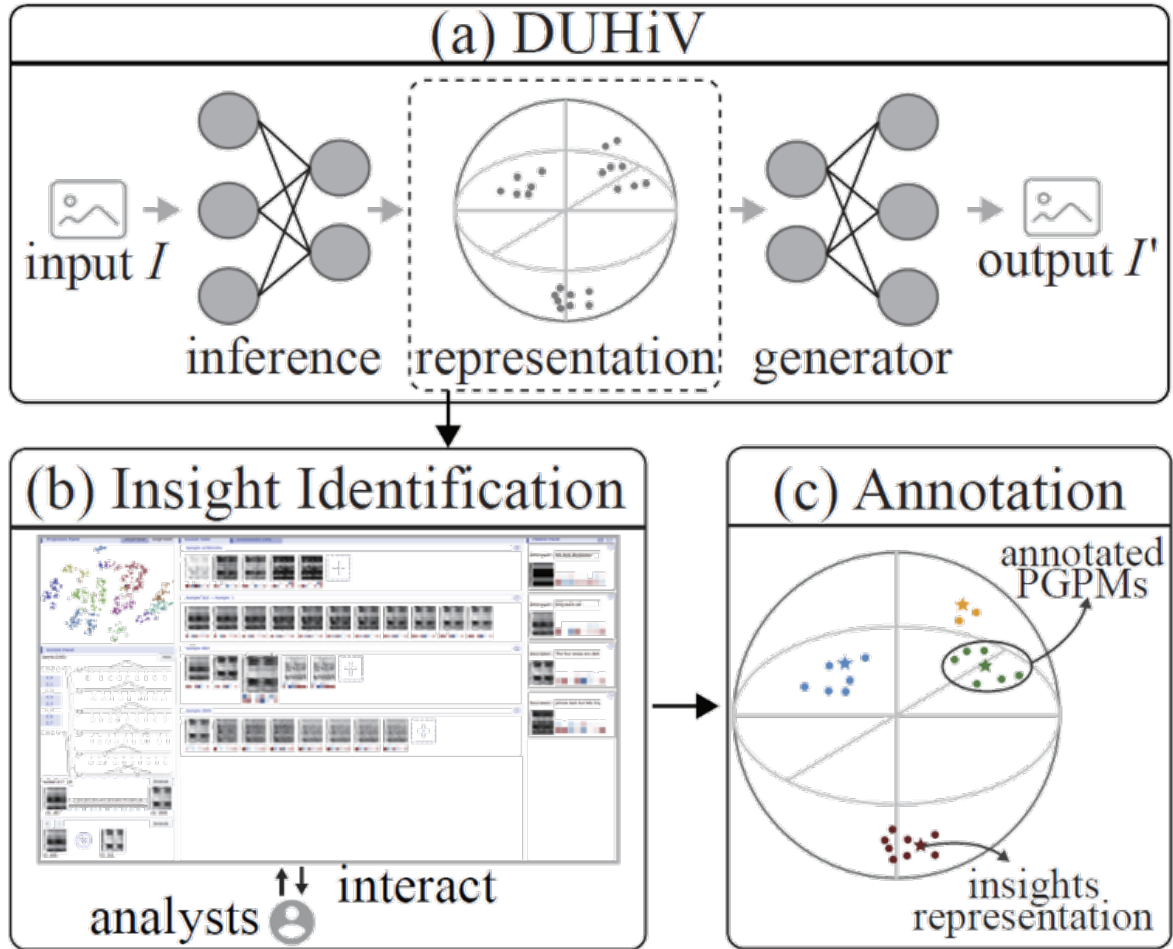


Figure 2: The pipline of our method

运行界面已可以自由玩耍 (需要翻墙)，界面细节如图3所示。

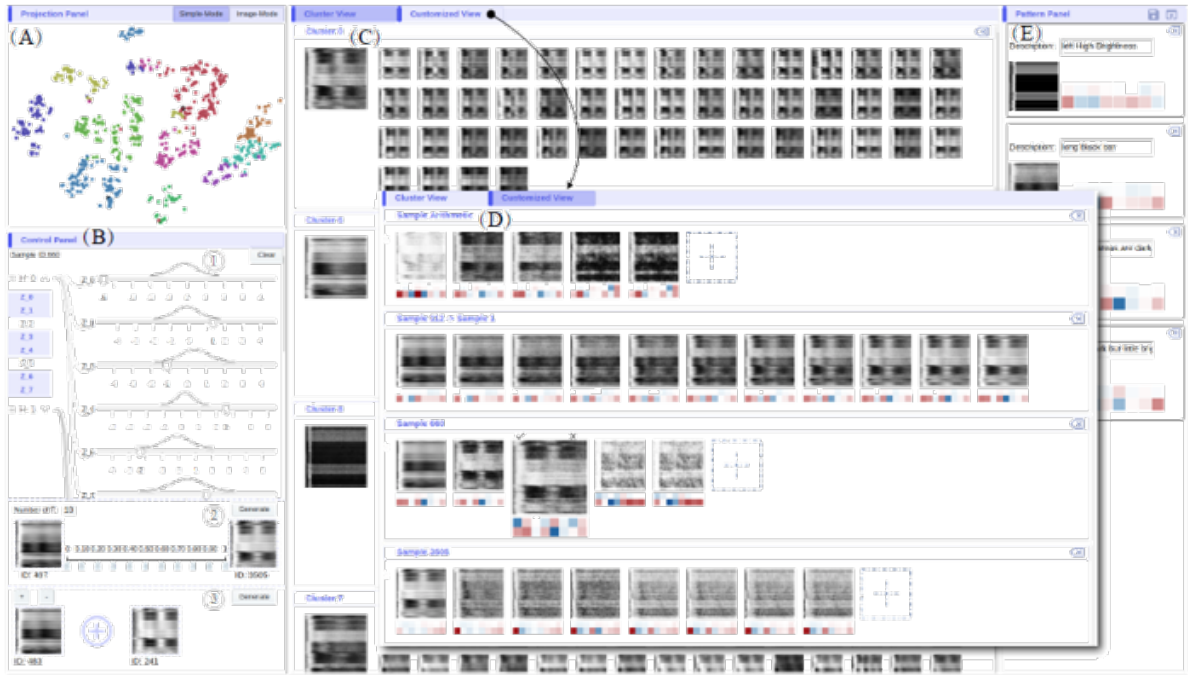


Figure 3: The visual interface

4.2 生成效果

DUHiV 的生成效果如图4所示，左图为输入原始图像，右图为生成图像，我们设置了 2 层连续潜变量，每一层的维数为 8，可以看出我们用 16 维潜变量所还原出的图像与真实图像肉眼几乎无法分辨，表明了 DUHiV 的优越性。

5 讨论与进一步工作

我们的系统在国家电网设备运行仿真数据像素图上取得了较好的结果。下一步我们将试着将系统应用于其他数据，如城市人流量时间数据热力图等数据集中，进一步探索系统的有效性。

同时，我们想进一步揭示每一个因子所对应的语义信息，以使得用户在交互过程中更有效地使用因子来挖掘特征。

我们预计完善该系统后投稿于 2020 年的 **AAAI** 会议，现阶段论文已挂于 **arxiv**，题目为 **An Interactive Insight Identification and Annotation Framework for Power Grid Pixel Maps using DenseU-Hierarchical VAE**，欢迎关注我们的工作。

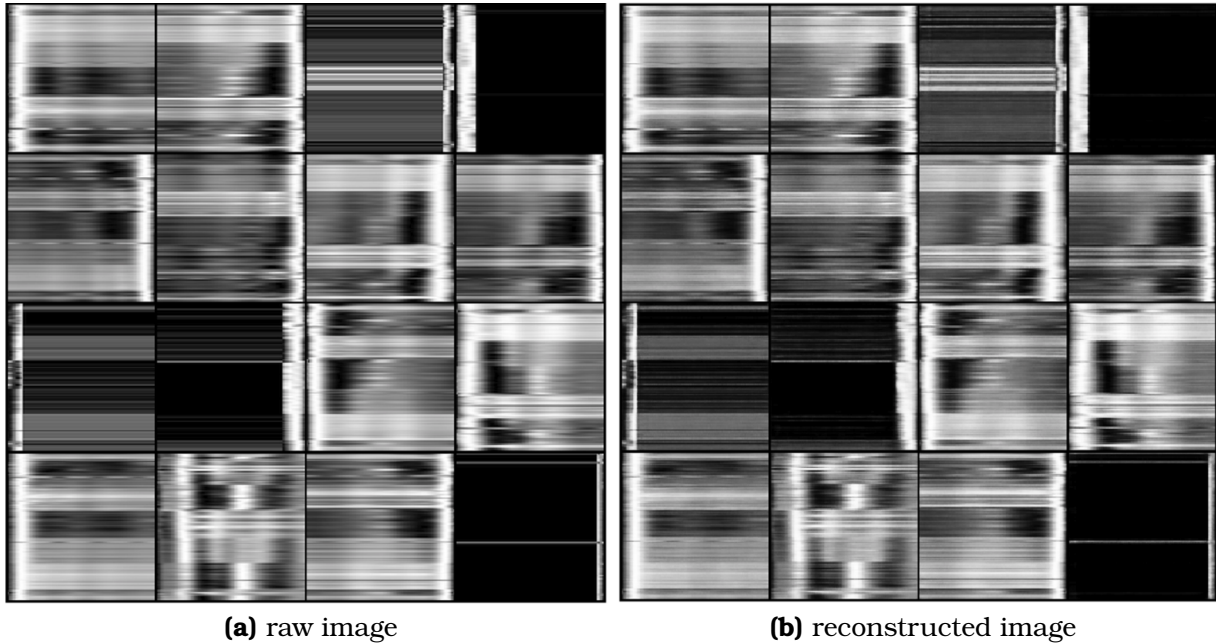


Figure 4: Reconstruction visual

REFERENCES

- [1] Diederik P Kingma and Max Welling. Auto-encoding variational bayes. *arXiv preprint arXiv:1312.6114*, 2013.
- [2] Ian Goodfellow, Yoshua Bengio, and Aaron Courville. *Deep learning*. MIT press, 2016.
- [3] Gao Huang, Zhuang Liu, Laurens Van Der Maaten, and Kilian Q Weinberger. Densely connected convolutional networks. In *Proceedings of the IEEE conference on computer vision and pattern recognition*, pages 4700–4708, 2017.
- [4] Olaf Ronneberger, Philipp Fischer, and Thomas Brox. U-net: Convolutional networks for biomedical image segmentation. In *International Conference on Medical image computing and computer-assisted intervention*, pages 234–241. Springer, 2015.
- [5] Luigi Ambrosio and Nicola Gigli. A user’ s guide to optimal transport. In *Modelling and optimisation of flows on networks*, pages 1–155. Springer, 2013.