Машинное обучение (Machine Learning)

Глубокое обучение: автокодеры (Deep Learning: autoencoders)

Уткин Л.В.

Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого

Содержание

Автокодер

Автокодер - определение (Autoencoder)

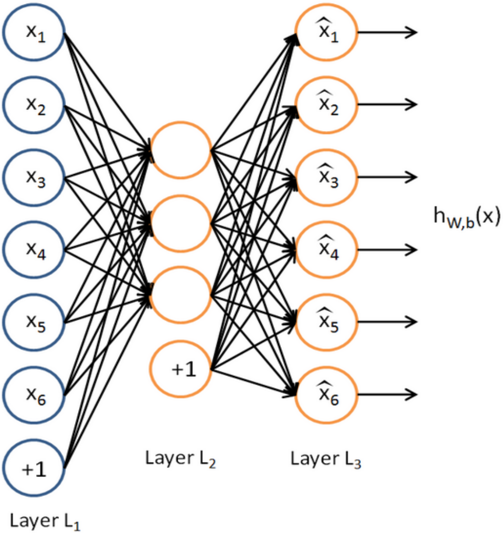
Из Wikipedia:

An autoencoder is an artificial neural network and its aim is to learn a compressed representation for a set of data. This means it is being used for dimensionality reduction.

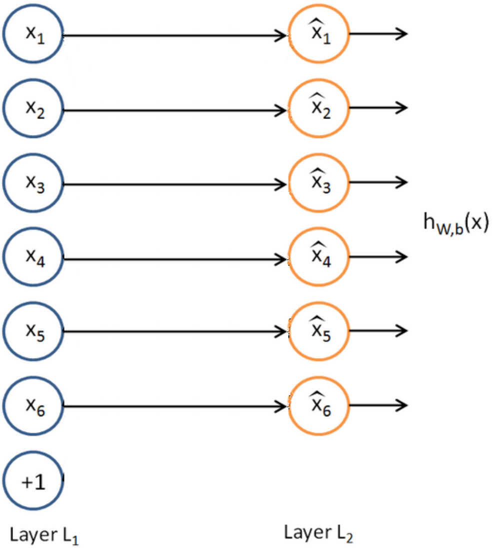
Автокодер

- Обучение без учителя
- Выборка $(\mathbf{x}^{(1)}, \mathbf{x}^{(2)}, \ldots,)$, где $\mathbf{x}^{(k)} = \left(x_1^{(k)}, \ldots, x_m^{(k)}\right)$, m признаков.
- **Автокодер** - это нейронная сеть, которая использует алгоритм обратного распространения так, что в результате обучения получаем выход идентичный входу, т.е. $\mathbf{y}^{(i)} = \mathbf{x}^{(i)}$.
- Другими словами: автокодер пытается обучиться аппроксимации тождественной функции.

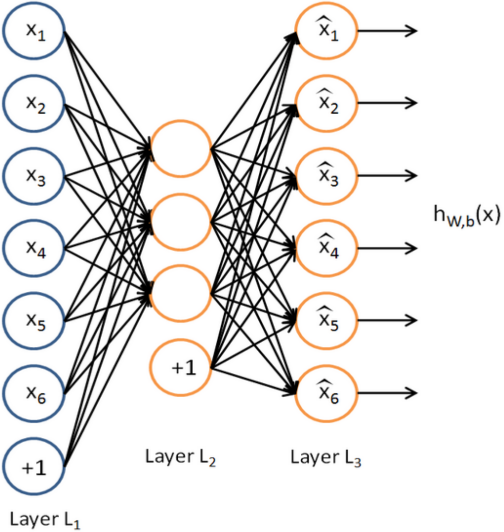
Автокодер (иллюстрация)



Почему бы не сделать проще?



Все дело в скрытом слое L2



Все дело в скрытом слое L2

- Получаем сжатое представление примеров обучающей выборки
- это возможно, если
    - имеет место *корреляция* части признаков
    - заставить нейроны скрытого слоя быть "*разреженными*" при условии $s_2 > m$ (число нейронов скрытого слоя больше, чем входного слоя)
- понижение размерности аналогично методу главных компонент

Сжатие автокодером

$$\mathbf{z}^{(k)} = f\left(W_1\mathbf{x}^{(k)} + b_1\right)$$
$$\widehat{\mathbf{x}}^{(k)} = f\left(W_2\mathbf{z}^{(k)} + b_2\right)$$

Целевой функционал (ошибка реконструирования):

$$R(W_1, b_1, W_2, b_2) = \sum_{k=1}^{n}\left(\widehat{\mathbf{x}}^{(k)} - \mathbf{x}^{(k)}\right)^2$$
$$= \sum_{k=1}^{n}\left(f\left(W_2 \cdot f\left(W_1\mathbf{x}^{(k)} + b_1\right) + b_2 - \mathbf{x}^{(k)}\right)\right)^2 \to \min$$

Разреженность нейронов скрытого слоя

Большинство нейронов должны быть почти неактивные, т.е. их выход близок 0.

- Как это сделать?
- Каким-то образом наложить ограничения на их уровень активации $a_j^{(2)}$ в процессе обучения.
- $a_j^{(2)}(\mathbf{x})$ - уровень активации (выход) j-го нейрона скрытого слоя L_2 в зависимости от обучающего вектора $\mathbf{x}$.

Разреженность нейронов скрытого слоя

- Средний уровень активации j-го нейрона по всей обучающей выборке:

$$\widehat{\rho}_j = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} a_j^{(2)}(\mathbf{x}^{(i)})$$

- Параметр разреженности: ρ (малое число близкое к 0, например 0.05)
- Цель: $\widehat{\rho}_j = \rho$ (хотя бы примерно)

Разреженность нейронов скрытого слоя

- Штрафное слагаемое - расстояние (дивергенция) Кульбака — Лейблера (KL) - мера удаленности друг от друга двух вероятностных распределений

$$\sum_{j=1}^{s_2} KL(\rho, \widehat{\rho}_j) = \sum_{j=1}^{s_2} \rho \log \frac{\rho}{\widehat{\rho}_j} + (1-\rho) \log \frac{1-\rho}{1-\widehat{\rho}_j}$$

- Штрафное слагаемое равно 0, если $\widehat{\rho}_j = \rho$.
- Общий функционал риска

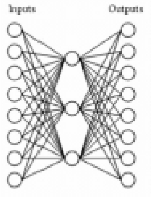
$$R_{\text{разреж}}(W, b) = R(W, b) + \beta \sum_{j=1}^{s_2} KL(\rho, \widehat{\rho}_j)$$

Почти глубокое обучение

- Исходные данные: обучающая выборка $\mathbf{X} = (\mathbf{x}^{(1)}, \mathbf{x}^{(2)}, \ldots, \mathbf{x}^{(n)})$
- Результат обучения автокодера (без учителя):
  - веса всех соединений между первым и вторым слоем $W^{(1)} = \left(w_{11}^{(1)}, w_{12}^{(1)}, \ldots, w_{m,s_2}^{(1)}, w_{01}^{(1)}, \ldots, w_{0,s_2}^{(1)}\right)$
  - значения активации нейронов скрытого слоя $a_1^{(2)}(\mathbf{x}^{(i)}), \ldots, a_{s_2}^{(2)}(\mathbf{x}^{(i)}),\ i = 1, \ldots, n$
- Теперь можно заменить исходную выборку $(\mathbf{x}^{(1)}, \mathbf{x}^{(2)}, \ldots, \mathbf{x}^{(n)})$ новой выборкой $a_1^{(2,i)}, \ldots, a_{s_2}^{(2,i)}$
- А если точнее, то

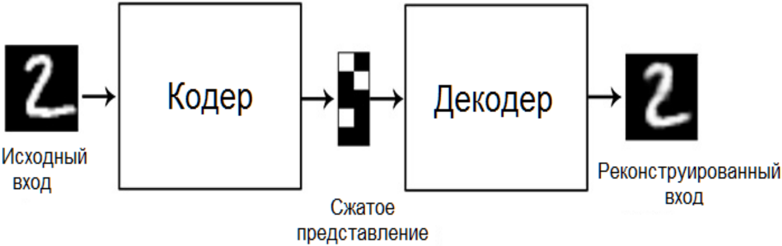
$$\left(\left(\mathbf{x}^{(1)}, y^{(1)}\right), \ldots, \left(\mathbf{x}^{(n)}, y^{(n)}\right)\right) \to \left(\left(a^{(2,1)}, y^{(1)}\right), \ldots, \left(a^{(2,n)}, y^{(n)}\right)\right)$$

Представление данных в скрытом слое после обучения



Input		Hidden Values				Output
10000000	→	.89	.04	.08	→	10000000
01000000	→	.01	.11	.88	→	01000000
00100000	→	.01	.97	.27	→	00100000
00010000	→	.99	.97	.71	→	00010000
00001000	→	.03	.05	.02	→	00001000
00000100	→	.22	.99	.99	→	00000100
00000010	→	.80	.01	.98	→	00000010
00000001	→	.60	.94	.01	→	00000001

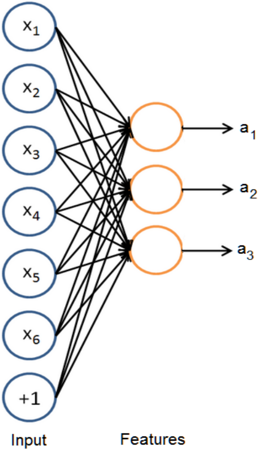
Еще одна иллюстрация автокодера



https://blog.keras.io/building-autoencoders-in-keras.html

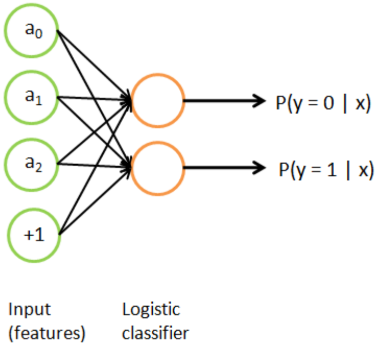
Как посмотреть новые признаки?

Есть уже обученная сеть

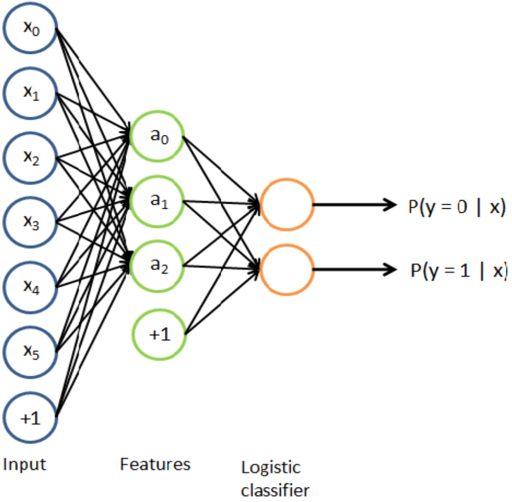


Задача классификации

Если необходимо решить задачу классификации, то используем сеть



Общий случай



Обучение (почти глубокое) в два этапа

1. Первый слой весов $W^{(1)}$, отображающий входные данные $\mathbf{x}$ в значения активации нейронов скрытого слоя $a_1^{(2,i)}, \ldots, a_{s_2}^{(2,i)}$, обучается как часть обучения автокодера.
2. Второй слой весов $W^{(2)}$, отображающий значения активации нейронов скрытого слоя $a_1^{(2,i)}, \ldots, a_{s_2}^{(2,i)}$ в выход y, обучается, используя логистическую регрессию, SVM, SoftMax регрессию и т.д.

Обучение (третий этап)

Можно использовать всю нейронную сеть для дальнейшей модификации всех параметров модели, чтобы попытаться уменьшить ошибку обучения. В частности “тонкая настройка” (fine-tune) параметров может быть использована.

Стек автокодеров

Глубокие нейронные сети

- Была рассмотрена нейронная сеть с тремя слоями: входной, скрытый и выходной
- **Глубокая сеть**: несколько скрытых слоев для преобразования более сложных признаков на входе
- Проблема: **как проще обучить такую сеть?**
- Вариант решения: **жадный** алгоритм послойного обучения

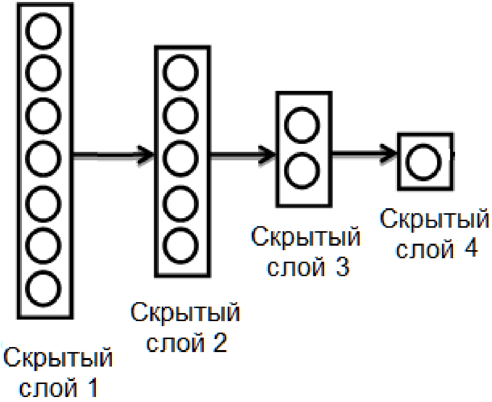
Жадный алгоритм послойного обучения (коротко)

Основная идея: обучать последовательно слои так, что

1. первый скрытый слой обучается первым;
2. после этого обучаем второй слой и т.д.;
3. на каждом этапе используется "старая" сеть с $k-1$ скрытыми слоями и к ним добавляется k-ый слой, вход которого - выход уже *обученных* $k-1$ слоев.

Стек автокодеров

Стек автокодеров - нейронная сеть, состоящая из нескольких слоев автокодеров, в которой выход каждого слоя связан со входами следующего за ним слоя



Стек автокодеров

- Пусть $W^{(k,1)}, W^{(k,2)}, b^{(k,1)}, b^{(k,2)}$ - параметры $W^{(1)}, W^{(2)}, b^{(1)}, b^{(2)}$ для k-го автокодера
- Кодирование:

$$a^{(l)} = f\left(z^{(l)}\right), \quad z^{(l+1)} = W^{(l,1)}a^{(l)} + b^{(l,1)}$$

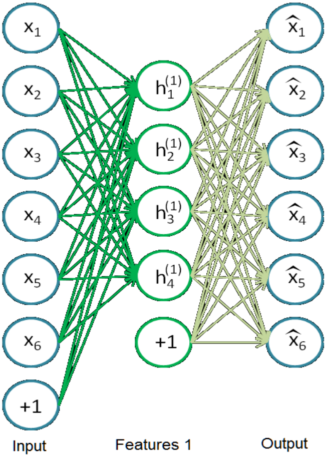
- Декодирование:

$$a^{(t+l)} = f\left(z^{(t+l)}\right), \quad z^{(t+l+1)} = W^{(t-l,2)}a^{(t+l)} + b^{(t-l,2)}$$

- Основная информация - в $a^{(t)}$ - значения активации на самом глубоком слое

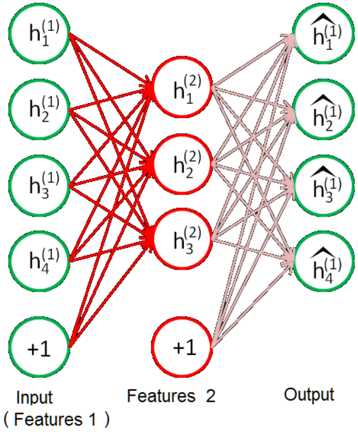
Пример стека автокодеров (1)

Сначала обучим автокодер на входных данных $\mathbf{x}^{(k)}$ для первичных признаков $h^{(1)(k)}$:



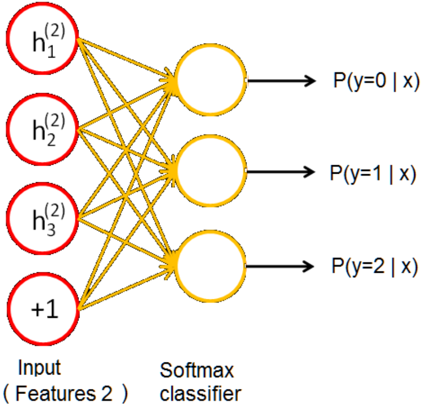
Пример стека автокодеров (2)

Затем используем значения активации $h^{(1)(k)}$ для каждого $\mathbf{x}^{(k)}$ для обучения другого автокодера и получения вторичных признаков $h^{(2)(k)}$:



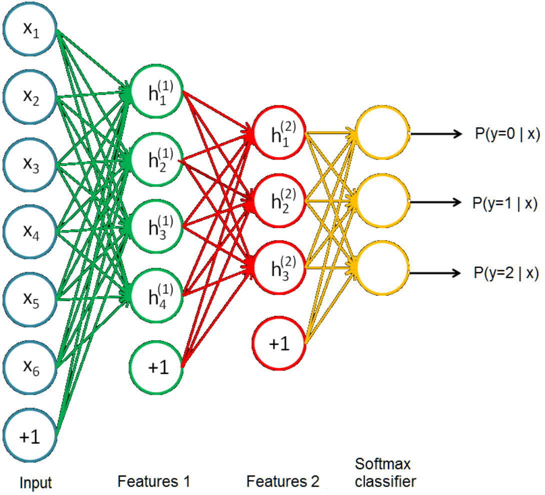
Пример стека автокодеров (3)

Вторичные признаки совместно с $y^{(k)}$ теперь могут использоваться для классификации:



Пример стека автокодеров (4)

В итоге комбинируем все три слоя вместе:



Стек автокодеров (еще раз жадный алгоритм обучения)

1. Обучаем первый автокодер ($l = 1$) со всеми $\mathbf{x}^{(k)}$, используя обратное распространение ошибки.
2. Обучаем второй автокодер ($l = 2$). Так как входной слой для $l = 2$ - первый скрытый слой, то выходной слой для $l = 1$ удаляется из сети. Обучение начинается с фиксации входной выборки слоя $l = 1$, которая является выходом слоя $l = 2$. Веса $l = 2$ модифицируются, используя обратное распространение.
3. Процедура повторяется для всех слоев.

Проблема использования автокодера

- Нет четкой связи между входом и выходом всей сети, например, при распознавании MNIST, нет возможности отобразить нейроны последнего скрытого слоя автокодера в цифры изображений.
- В этом случае, решение - добавить один или два слоя к последнему (глубокому) слою. Тогда вся нейронная сеть может рассматриваться как обычный персептрон и обучаться при помощи обратного распространения (fine-tuning).

Еще одна проблема использования автокодера

- Выходной слой:

$$z^{(3)} = W^{(2)}a^{(2)} + b^{(2)}, \quad a^{(3)} = f\left(z^{(3)}\right)$$

- $a^{(3)}$ - приближение $\mathbf{x} = a^{(1)}$.
- Если $f\left(z^{(3)}\right)$ - функция активации - сигмоид, то необходимо нормализовать $\mathbf{x}$ к $[0; 1]$, так как выход сигмоида - число $[0; 1]$.

Линейный декодер

- Функция активации нейронов скрытого слоя - сигмоид или tanh $a^{(2)} = \sigma\left(W^{(1)}\mathbf{x} + b^{(1)}\right)$, где $\sigma(\cdot)$ - сигмоид.
- Но функция активации выхода - линейная функция $\widehat{\mathbf{x}} = a^{(3)} = W^{(2)}a + b^{(2)}$ - **линейный декодер.**
- Можно теперь использовать любые $\mathbf{x}$ без нормализации.

Модификации автокодеров

Denoising Autoencoder (зашумленный или шумоподавляющий автокодер)

- Вход автокодера зашумляется (различные стратегии): $\mathbf{x}^{(k)} \to \tilde{\mathbf{x}}^{(k)}$, например, $\tilde{\mathbf{x}} = \mathbf{x} + \varepsilon$, $\varepsilon \sim \mathcal{N}(0, \sigma^2 I)$
- Скрытый слой: $\mathbf{z}^{(k)} = W_1 \widetilde{\mathbf{x}}^{(k)} + b_1$
- Выходной слой без изменений:

$$\mathbf{x}^{(k)} \approx \widehat{\mathbf{x}}^{(k)} = W_2 \mathbf{z}^{(k)} + b_2$$

- **Ошибка реконструирования**

$$R = \sum_{k=1}^{n} \left(\widehat{\mathbf{x}}^{(k)} - \mathbf{x}^{(k)}\right)^2, \text{ **не** } \sum_{k=1}^{n} \left(\widehat{\mathbf{x}}^{(k)} - \tilde{\mathbf{x}}^{(k)}\right)^2 !$$

- Робастность, пропущенные данные

k-Sparse Autoencoder (k-разреженный автокодер)

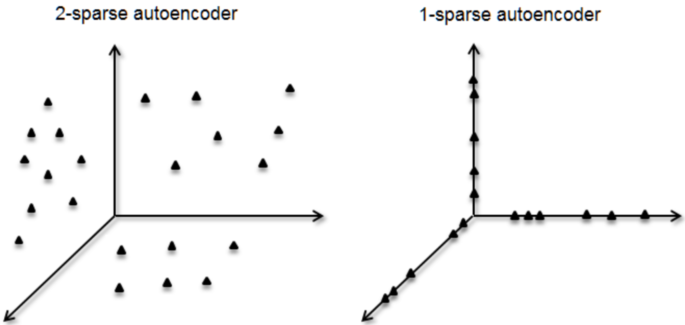
- Makhzani A, Frey B. k-Sparse Autoencoders. arXiv preprint arXiv:1312.5663. 2013 Dec 19
- Функция активации нейронов скрытого слоя является линейной, т.е.

$$\mathbf{z}^{(k)} = f\left(W_1 \mathbf{x}^{(k)} + b_1\right) = W_1 \mathbf{x}^{(k)} + b_1$$

- **Но** отбираются k наибольших скрытых нейронов, а остальные обнуляются
- Это вносит нелинейность

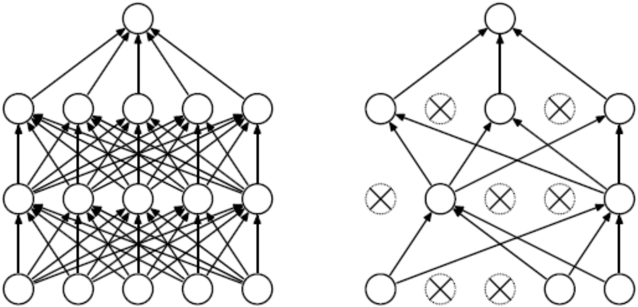
k-Sparse Autoencoder - интересное свойство

3 нейрона в скрытом слое



Dropout Neural Networks

N. Srivastava, G. Hinton, A. Krizhevsky, I. Sutskever, R. Salakhutdinov. Dropout: A Simple Way to Prevent Neural Networks from Overfitting. Journal of Machine Learning Research, 15 (2014) 1929-1958.



Standard Neural Net   After applying dropout

Dropout Neural Networks - прямое распространение

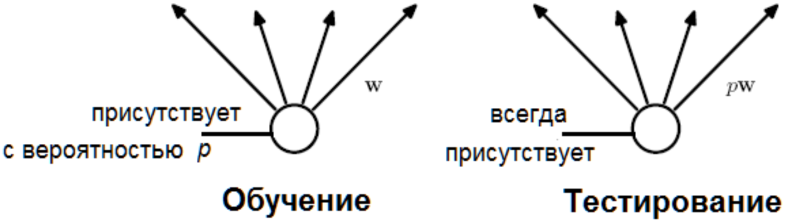
Стандартная сеть	Dropout
	$\mathbf{r}^{(k)} \sim \text{Bernulli}(p)$
	$\tilde{\mathbf{x}}^{(k)} = \mathbf{r}^{(k)} \cdot \mathbf{x}^{(k)}$
$\mathbf{z}^{(k)} = f\left(W_1 \mathbf{x}^{(k)} + b_1\right)$	$\mathbf{z}^{(k)} = f\left(W_1 \tilde{\mathbf{x}}^{(k)} + b_1\right)$
$\mathbf{y}^{(k)} = f\left(W_2 \mathbf{z}^{(k)} + b_2\right)$	$\mathbf{y}^{(k)} = f\left(W_2 \mathbf{z}^{(k)} + b_2\right)$

$\mathbf{r}^{(k)}$ - вектор, состоящий из 0 и 1, сгенерированных с распределением Бернулли так, что 1 имеет вероятность p

Dropout Neural Networks - обучение

- Обучение такое же, как и для стандартной сети
- **Отличия**:
  - прямое и обратное распространение для каждого обучающего примера осуществляется с “прореженной” сетью
  - градиенты для каждого параметра усредняются по всем обучающим примерам
  - если для текущего примера параметр “выкинут”, то градиент равен 0

Dropout Neural Networks - тестирование



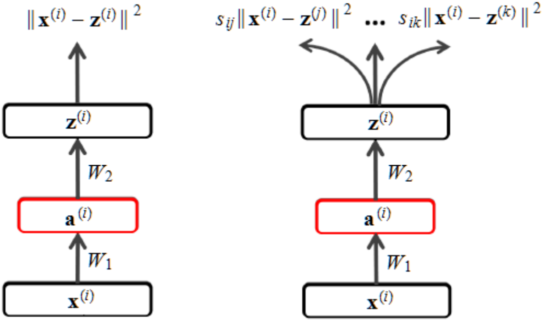
Generalized autoencoder - Обобщенный автокодер (1)

- Выборка $(\mathbf{x}^{(1)}, \mathbf{x}^{(2)}, ...,)$, где $\mathbf{x}^{(k)} = \left(x_1^{(k)}, ..., x_m^{(k)}\right)$, m признаков.
- $\mathbf{x}^{(i)}$ реконструируется k ближайших элементов обучающего множества $\Omega_i = (\mathbf{x}^{(j)}, ..., \mathbf{x}^{(k)})$
- Вклад каждого элемента $s_{ij}\left\|\mathbf{x}^{(i)} - \mathbf{z}^{(j)}\right\|^2$ - весовое расстояние между $\mathbf{x}^{(i)}$ и $\mathbf{z}^{(j)}$
- s_{ij} - показатель близости элементов $\mathbf{x}^{(i)}$ и $\mathbf{x}^{(j)}$
- Ошибка реконструкции:

$$R(W_1, b_1, W_2, b_2) = \sum_{i=1}^{n} \sum_{j \in \Omega_i} s_{ij}\left\|\mathbf{x}^{(i)} - \mathbf{z}^{(j)}\right\|^2 \to \min_{W_1, b_1, W_2, b_2}$$

Обобщенный автокодер (2)

Wang W., Huang Y., Wang Y., Wang L. Generalized Autoencoder: A Neural Network Framework for Dimensionality Reduction // Proceedings of the CVPR 2014 Workshop, Columbus, Ohio, 2014, 490-497.



Обобщенный автокодер - алгоритм обучения

1. Вычислить веса s_{ij} для всех i и j (как - на следующем слайде), веса определяют частные случаи.
2. Определить множество индексов ближайших соседей Ω_i
3. Минимизировать $R(W_1, b_1, W_2, b_2)$, используя градиентный метод и модифицировать W_1, b_1, W_2, b_2
4. Вычислить скрытое представление $\mathbf{a}^{(i)}$ и модифицировать веса s_{ij} и множество Ω_i
5. Повторить шаги 3 и 4 до сходимости

Обобщенный автокодер - частные случаи

- Стандартный автокодер $\Omega_i = \{i\}$: $s_{ii} = 1$, $s_{ij} = 0$, $j \neq i$
- Реконструкция данных из того же класса Ω_i - множество индексов класса, которому принадлежит $\mathbf{x}^{(i)}$: $s_{ij} = 1/n_{c_i}$ (число элементов класса c_i)
- Реконструкция в k ближайших соседей: $s_{ij} = \exp(-\left\|\mathbf{x}^{(i)} - \mathbf{x}^{(j)}\right\|^2/t)$, t - настраиваемый параметр
- Реконструкция в k_1 ближ. соседей класса c_i и k_2 ближ. соседей класса $c_j \neq c_i$: $s_{ij} = 1$, если $j \in \Omega_i^{(k_1)}$ и $s_{ij} = -1$, если $j \in \Omega_j^{(k_2)}$

Contractive autoencoder (сжимающий автокодер)

- Rifai S., Vincent P., Muller X., Glorot X., Bengio Y. Contractive Auto-Encoders: Explicit Invariance During Feature Extraction // Proceedings of the 28th International Conference on Machine Learning, 2011, pp. 833-840.
- Сжимающий автокодер получается добавлением специального штрафного слагаемого (регуляризация) к функции ошибки, которое “заставляет” **промежуточное** представление (в скрытом слое) становиться робастным к малым изменениям входных обучающих данных
- Робастный - скрытый слой, в отличие от Denoising AE, где робастным является выход

Contractive autoencoder

- Штрафное слагаемое - норма Фробениуса якобиана $J_f(\mathbf{x})$, $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^m$:

$$\|J_f(\mathbf{x})\|_F^2 = \sum_{i,j} \left(\frac{\partial h_j(\mathbf{x})}{\partial(x_i)} \right)$$

- Это частный случай p-нормы для $p = 2$:
$\|A\|_F^2 = \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{m} a_{ij}^2$
- Штрафное слагаемое "заставляет" отображение в пространство признаков быть сжатым (contractive) в окрестности обучающих данных

Функции ошибки автокодеров (напоминание)

- Обычный автокодер:

$$J_{AE}(\theta) = \sum_{\mathbf{x}\in S} L(\mathbf{x}, g(f(\mathbf{x}))), \theta = \{W_1, b_1, W_2, b_2\},$$

  например $L(\mathbf{x}, g(f(\mathbf{x}))) = \|\mathbf{x} - \mathbf{z}\|^2$

- С регуляризацией:

$$J_{AE+wd}(\theta) = \sum_{\mathbf{x}\in S} L(\mathbf{x}, g(f(\mathbf{x}))) + \lambda \left(\|W_1\|^2 + \|W_2\|^2 \right)$$

- Зашумленный:

$$J_{DAE}(\theta) = \sum_{\mathbf{x}\in S} \mathbb{E}_{\tilde{\mathbf{x}}\sim q(\tilde{\mathbf{x}}|\mathbf{x})} \left[L(\mathbf{x}, g(f(\tilde{\mathbf{x}}))) \right], \quad \tilde{\mathbf{x}} = \mathbf{x} + \varepsilon$$

Функции ошибки сжимающего автокодера

- Contractive autoencoder:

$$J_{AE}(\theta) = \sum_{\mathbf{x} \in S} L(\mathbf{x}, g(f(\mathbf{x}))) + \lambda \left(\|J_f(\mathbf{x})\|_F^2 \right)$$

- Вычисление функции ошибки: если f - сигмоид, то простое выражение

$$\|J_f(\mathbf{x})\|_F^2 = \sum_{i=1}^{d} (h_i(1 - h_i))^2 \sum_{j=1}^{m} \left(W_1^{(i,j)} \right)^2$$

Отличие Contractive AE от Denoising AE

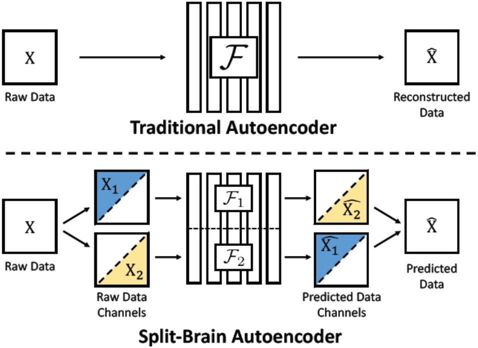
- Denoising AE автокодер делает робастными реконструированные значения, т.е. $\mathbf{z} = g(f(\mathbf{x}))$
- Contractive AE делает робастным только скрытый слой $\mathbf{h} = f(\mathbf{x})$, т.е. представление признаков
- Это более важно, так как декодер $g(\cdot)$ не нужен при классификации, а используется только кодер

Еще отличия Contractive AE от Denoising AE

- Denoising AE более прост в реализации, так как он является простым расширением обычного автокодера и не требует вычисления якобиана скрытого слоя.
- Contractive AE имеет детерминированный градиент (так как нет случайного шума), что означает, что методы оптимизации второго порядка (сопряженный градиент) могут использоваться, и автокодер может быть более стабильным, чем Denoising AE.

Split-Brain автокодер

Zhang R., Isola P., Efros A. Split-Brain Autoencoders: Unsupervised Learning by Cross-Channel Prediction. 2016, arXiv:1611.09842v1



Векторные представления и автокодер (embedding)

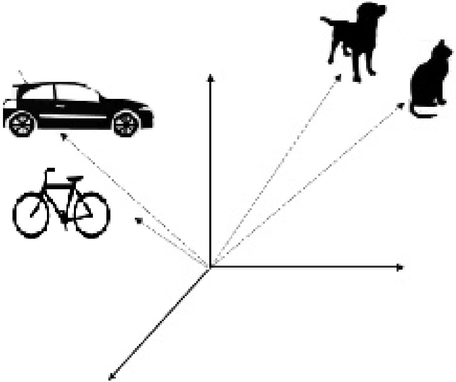
Проблема представления (embedding)

- Проблема возникает, когда необходимо при сокращении размерности (скрытый слой автокодера) сохранить "семантику" исходного входного множества данных большой размерности.
- Исходные данные большой размерности "вкладываются" в малую размерность с сохранением "геометрии".
- Многие алгоритмы, например, pointwise mutual information (PMI), обеспечивают локальное сохранение "геометрии", т.е. относительные расстояния между точками в пространстве большой размерности сохраняются в пространстве малой размерности.

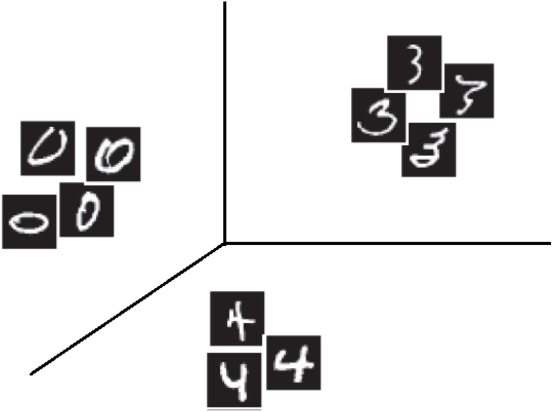
Примеры векторного представления слов

- “кот” $\to (0.1, 1.8, -4.2, 0.36, \ldots)$
- “собака” $\to (0.13, 1.45, -4.23, 0.41, \ldots)$
- “машина” $\to (8.31, -7.29, 0.44, -5.28, \ldots)$
- “велосипед” $\to (7.2, -6.71, 0.43, -2.45, \ldots)$
- Семантически “кот” и “собака” близки, “машина” и “велосипед” тоже близки.
- Тогда их представления также должны быть близки.

Примеры векторного представления слов



Примеры векторного представления изображений



Алгоритмы вложения

- Исходная выборка: $(\mathbf{x}^{(1)}, \mathbf{x}^{(2)}, \ldots, \mathbf{x}^{(n)})$, $\mathbf{x}^{(i)} \in \mathbb{R}^D$
- Скрытый слой: $\mathbf{h}^{(k)} = f\left(W_1 \mathbf{x}^{(k)} + b_1\right)$, $\mathbf{h}^{(k)} \in \mathbb{R}^d$
- Задача оптимизации:

$$\sum_{1 \le i \le j \le m} L(\mathbf{h}^{(i)}, \mathbf{h}^{(j)}, \varphi_{ij}) \to \min_{W_1, b_1}$$

- φ_{ij} - вес между $\mathbf{x}^{(i)}$ и $\mathbf{x}^{(j)}$:

$$\varphi_{ij} = \left\|\mathbf{x}^{(i)} - \mathbf{x}^{(j)}\right\|^2, \quad \varphi_{ij} = e^{-\left\|\mathbf{x}^{(i)} - \mathbf{x}^{(j)}\right\|^2 / r},$$

$$\varphi_{ij} = \begin{cases} 1, & \left\|\mathbf{x}^{(i)} - \mathbf{x}^{(j)}\right\|^2 \le \varepsilon \\ 0, & \text{иначе} \end{cases}$$

Функции потерь

- Laplacian eigenmaps (LE)

$$L(\mathbf{h}^{(i)}, \mathbf{h}^{(j)}, \varphi_{ij}) = \left\|\mathbf{h}^{(i)} - \mathbf{h}^{(j)}\right\|^2 \varphi_{ij}$$

- Multidimensional scaling (MDS)

$$L(\mathbf{h}^{(i)}, \mathbf{h}^{(j)}, \varphi_{ij}) = \left(\left\|\mathbf{h}^{(i)} - \mathbf{h}^{(j)}\right\| - \varphi_{ij}\right)^2$$

- Margin-based Embedding ($l = 1$)

$$L(\mathbf{h}^{(i)}, \mathbf{h}^{(j)}, \varphi_{ij}) = \begin{cases} \left\|\mathbf{h}^{(i)} - \mathbf{h}^{(j)}\right\|^2, & \varphi_{ij} = 1, \\ \max\left(0, l - \left\|\mathbf{h}^{(i)} - \mathbf{h}^{(j)}\right\|^2\right), & \varphi_{ij} = 0. \end{cases}$$

Функционалы потерь

- Стандартный автокодер:

$$J(\theta, \mathbf{x}) = \gamma \sum_{i=1}^{n} L(\mathbf{x}_i, \mathbf{z}_i) + \beta \sum_{j=1}^{d} KL(\rho, \widehat{\rho}_j) + \frac{\lambda}{2}\left(\|W_1\|^2 + \|W_2\|^2\right)$$

- Автокодер с учетом вложения:

$$J_{em}(\theta, \varphi, \mathbf{x}) = \sum_{1 \le i \le j \le m} L(\mathbf{h}^{(i)}, \mathbf{h}^{(j)}, \varphi_{ij}) + J(\theta, \mathbf{x})$$

- γ, β, λ - параметры, контролирующие баланс между штрафными слагаемыми
- W.Yu, G.Zeng, P.Luo, F.Zhuang, Q.He, Z.Shi. Embedding with Autoencoder Regularization // Machine Learning and Knowledge Discovery in Databases: European Conference, ECML PKDD 2013, 2013, pp. 208-223.

Обучение автокодера

Необходимо найти частные производные:

$$\frac{\partial J_{em}(\theta, \varphi, \mathbf{x})}{\partial W_t}, \quad \frac{\partial J_{em}(\theta, \varphi, \mathbf{x})}{\partial b_t}, \quad t = 1, 2.$$

Определим $\delta^{(1)}$ и $\delta^{(2)}$ для скрытого и выходного слоя, соответственно, как

$$\delta^{(1)} = \left((W_2)^{\mathrm{T}} \delta^{(2)} + \beta \frac{\widehat{\rho} - \rho_0}{\widehat{\rho}(1 - \rho_0)} \right) \cdot \sigma' (\mathbf{h})$$

$$\delta^{(2)} = \frac{\partial}{\partial \mathbf{z}} \frac{1}{2} \|\mathbf{h} - \mathbf{x}\|^2 = - (\mathbf{h} - \mathbf{x}) \cdot \sigma' (\mathbf{z}),$$

где $\rho_0 \in \mathbb{R}^d$ - вектор всех ρ,

$$\mathbf{h} = W_1 \mathbf{x} + b_1, \quad \mathbf{z} = W_2 \mathbf{h} + b_2, \quad \widehat{\rho} = n^{-1} \sum_{i=1}^{n} \mathbf{h}^{(i)}$$

Вычисление частных производных

1. Случайно инициализируем $\theta = (W_1, W_2, b_1, b_2)$
2. Прямое распространение - вычисляем: $h^{(i)}$, $z^{(i)}$, $\delta^{(1)}$, $\delta^{(2)}$
3. Вычисляем частные производные:

$$\frac{\partial J_{em}(\theta, \varphi, \mathbf{x})}{\partial W_2} = \gamma \delta^{(2)} \mathbf{h}^{\mathrm{T}} + \lambda W_2$$

$$\frac{\partial J_{em}(\theta, \varphi, \mathbf{x})}{\partial b_2} = \gamma \delta^{(2)}$$

$$\frac{\partial J_{em}(\theta, \varphi, \mathbf{x})}{\partial W_1} = \frac{\partial}{\partial W_1} \sum_{i \leq j} L(\mathbf{h}^{(i)}, \mathbf{h}^{(j)}, \varphi_{ij}) + \gamma \delta^{(1)} \mathbf{x}^{\mathrm{T}} + \lambda W_1$$

$$\frac{\partial J_{em}(\theta, \varphi, \mathbf{x})}{\partial b_1} = \frac{\partial}{\partial b_1} \sum_{i \leq j} L(\mathbf{h}^{(i)}, \mathbf{h}^{(j)}, \varphi_{ij}) + \gamma \delta^{(1)}$$

Результирующий алгоритм обучения

1. Вычисляем φ_{ij}
2. Цикл до критерия остановки
   - $\Delta W_t = 0,\ \Delta b_t = 0,\ t = 1, 2.$
   - Вычисляем все частные производные
   - $\Delta W_t = \sum_{i=1}^{n} \frac{\partial J_{em}(\theta,\varphi,\mathbf{x}^{(i)})}{\partial W_t},\ \Delta b_t = \sum_{i=1}^{n} \frac{\partial J_{em}(\theta,\varphi,\mathbf{x}^{(i)})}{\partial b_t}$
   - Модификация: $W_t = W_t - \alpha\left(n^{-1}\Delta W_t\right)$,
     $b_t = b_t - \alpha\left(n^{-1}\Delta b_t\right)$
3. Конец цикла
4. Вычисляем результаты (представление) h

Какие автокодеры еще есть?

- Вариационный автокодер (Variational autoencoder)
- Автокодер со значимыми весами (Importance weighted autoencoder)
- Соперничающие автокодеры (Adversarial autoencoders)

Это все порождающие модели

Применение автокодера

1. Снижение размерности (компактное представление) данных.
2. “Pretraining”: обучение автокодера (без учителя) для получения весов, далее использование этой же конфигурации для глубокой сети и использование весов как исходных (это лучше, чем случайные веса).
3. Одноклассовая классификация: автокодер обучается на данных и определяется порог ошибки реконструирования, далее этот порог используется для тестирования аномальных наблюдений.
4. и многое другое...

Вопросы

?