

Прикладные задачи анализа данных

Лекция
Нормализационные потоки

Михаил Гущин
mhushchyn@hse.ru

НИУ ВШЭ, 2024



НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
УНИВЕРСИТЕТ

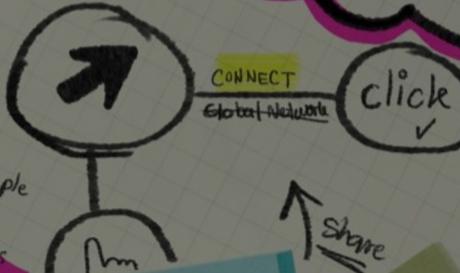
Приложения

CHECK LIST:

- chat

share

SOCIAL MEDIA



people

Friends

click ✓

Share

cloud

↑↓



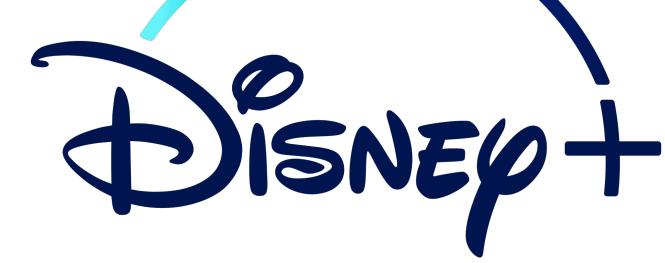
good!



SHARE

internet
connect

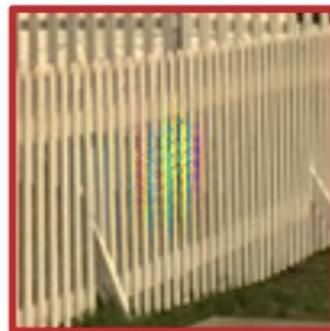
Пример



Пример

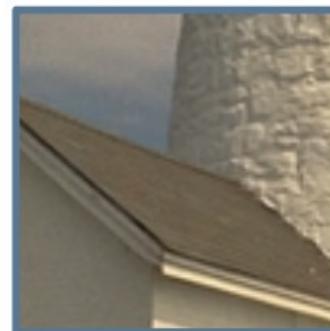


Autoencoder based
(Minnen et al. 2018)

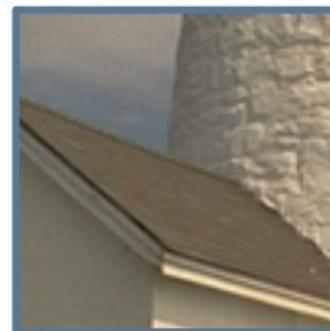


$N = 1$

$N = 15$



$N = 1$

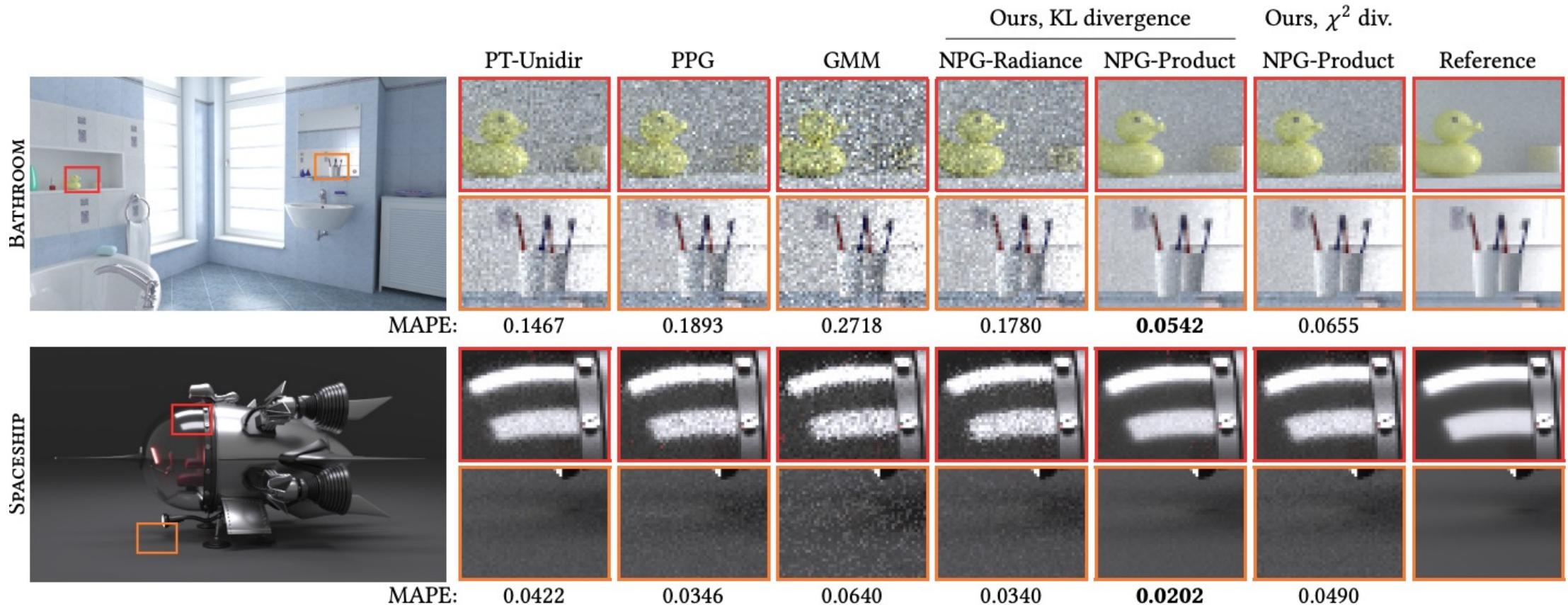


$N = 15$

Results after N compression/decompression operations

Lossy Image Compression with Normalizing Flows, ICLR 2021

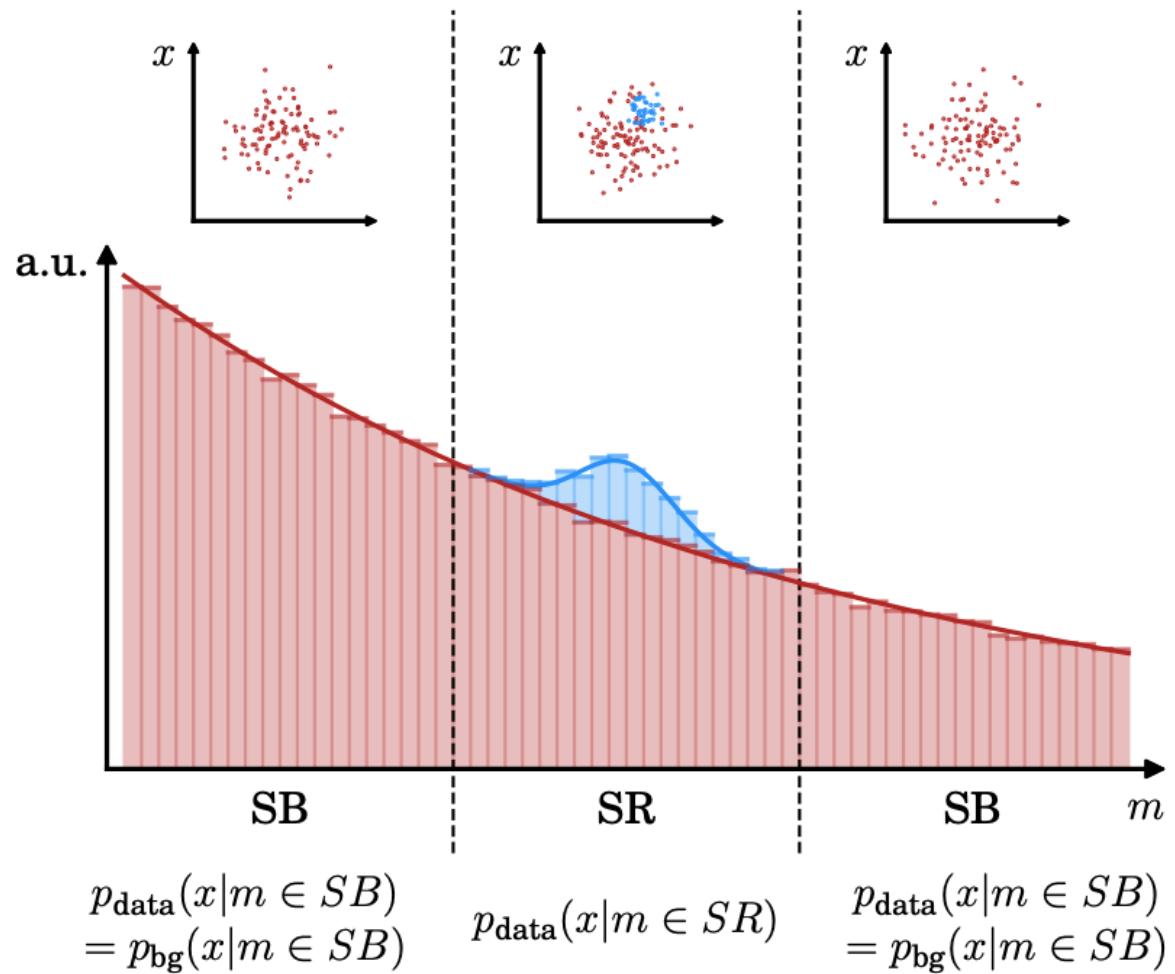
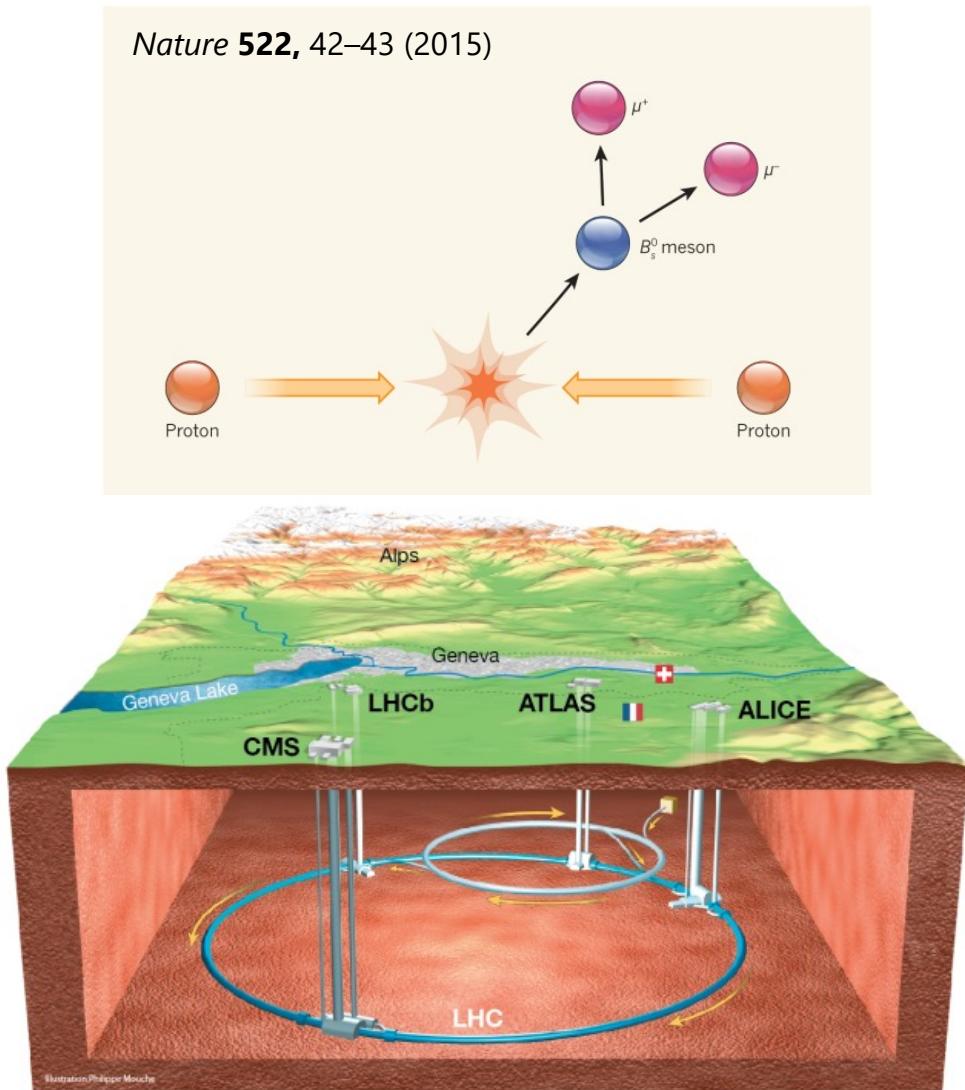
Пример



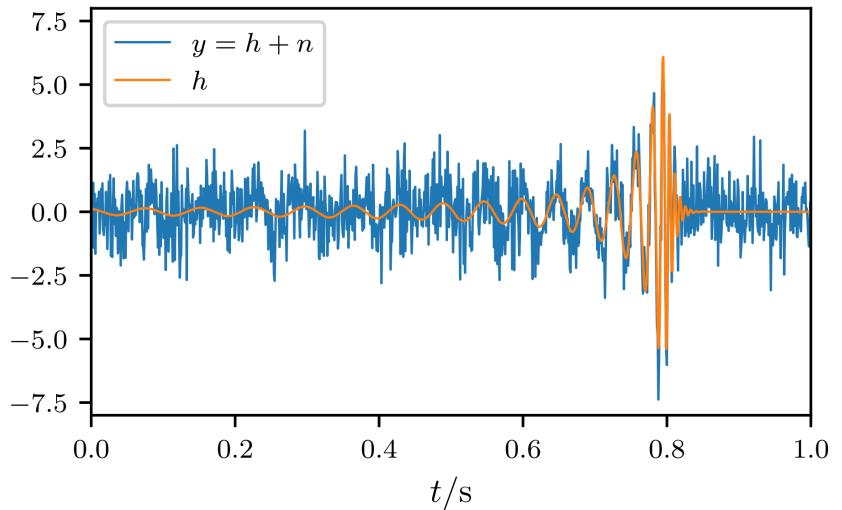
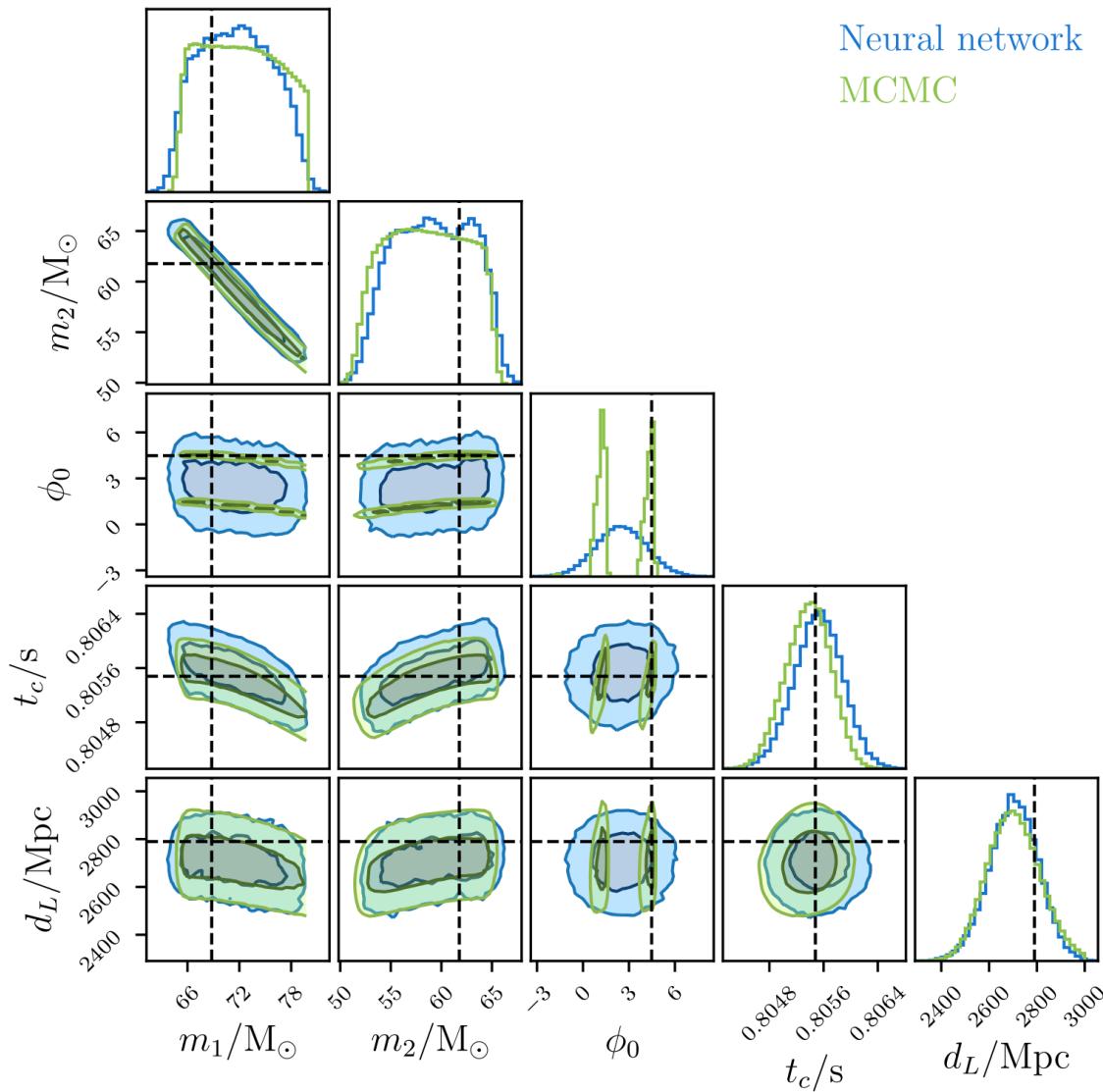
Neural Importance Sampling

Поиск новой физики

Nature 522, 42–43 (2015)



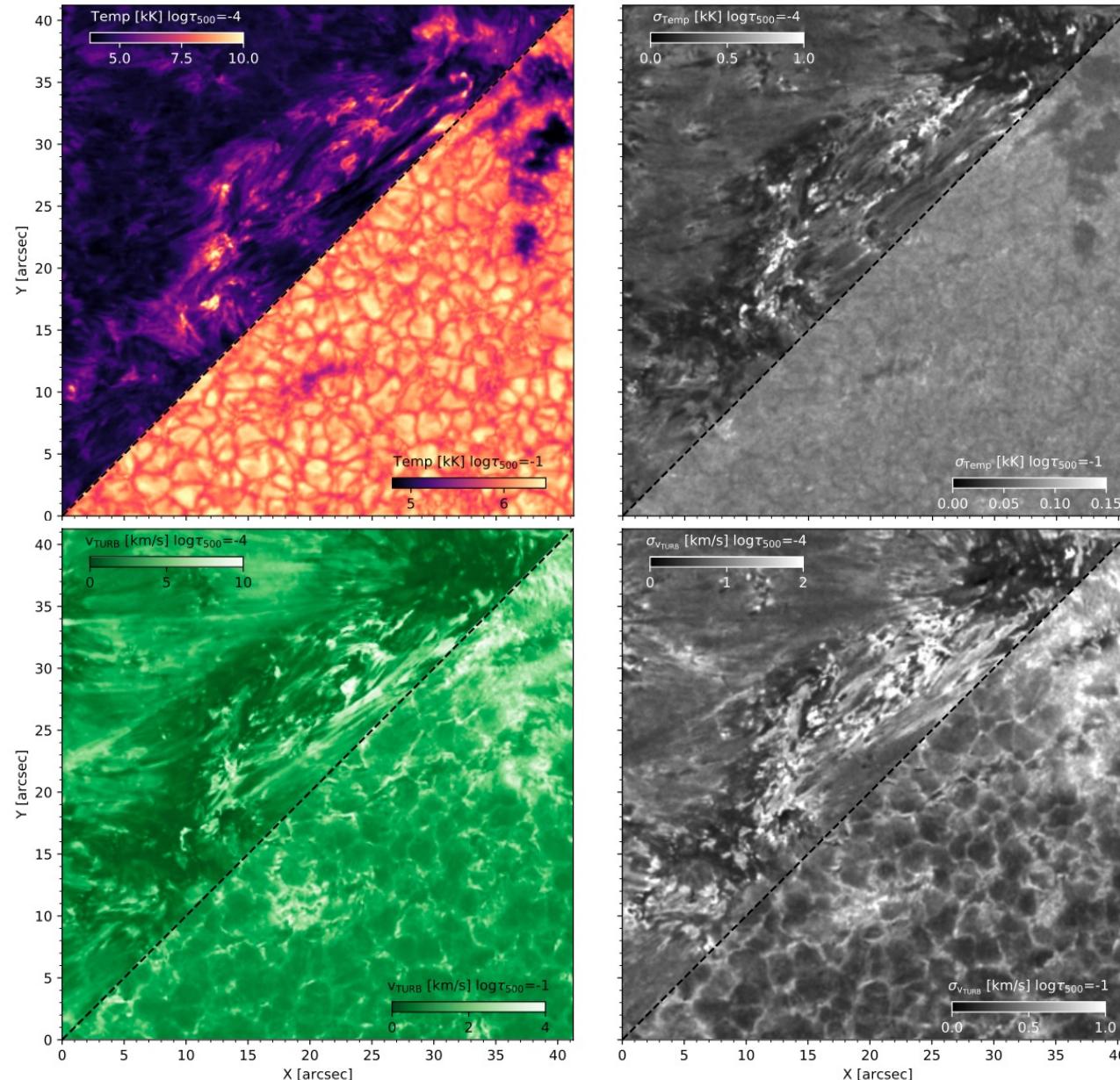
Гравитационные волны



Gravitational-wave parameter estimation
with autoregressive neural network flows,
Phys. Rev. D **102**, 104057

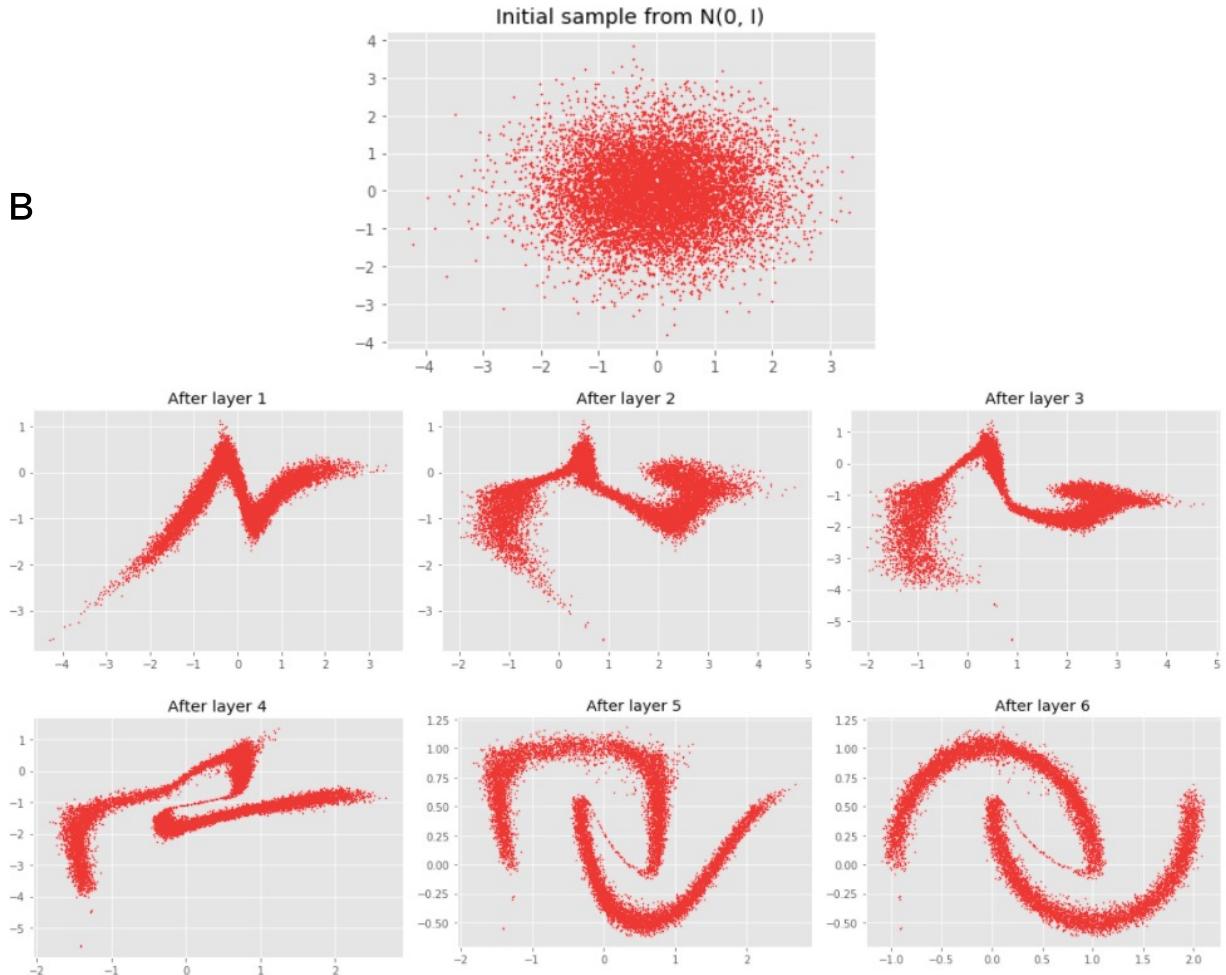
Реконструкция солнечной атмосферы

Bayesian Stokes inversion
with normalizing flows,
A&A 659, A165 (2022)



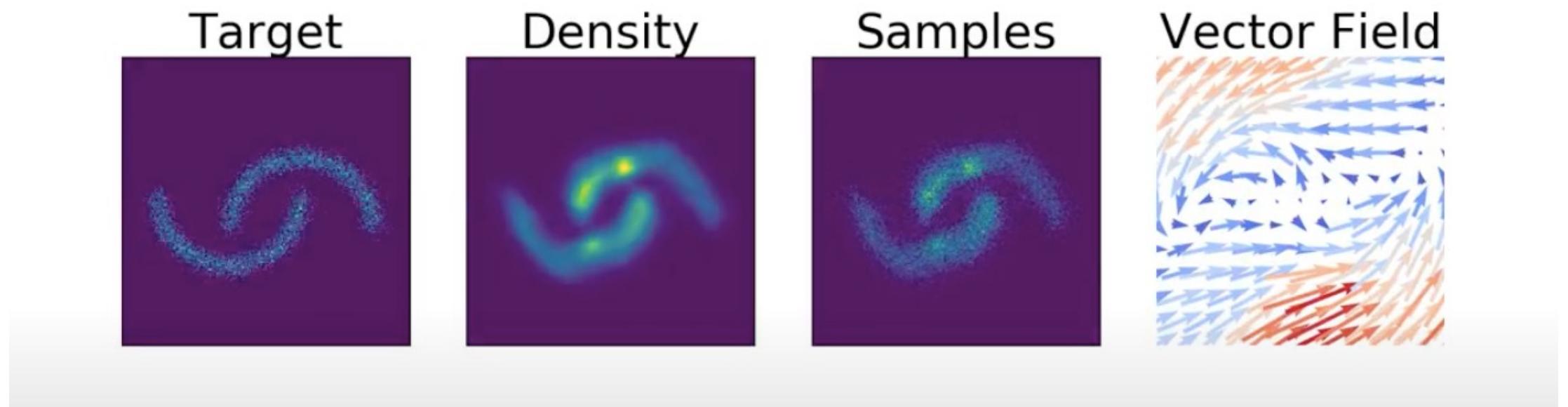
Интуиция

Нормализационный поток –
последовательность обратимых
преобразований одного распределения в
другое



<https://engineering.paperclip.com/posts/normalizing-flows-part-2/>

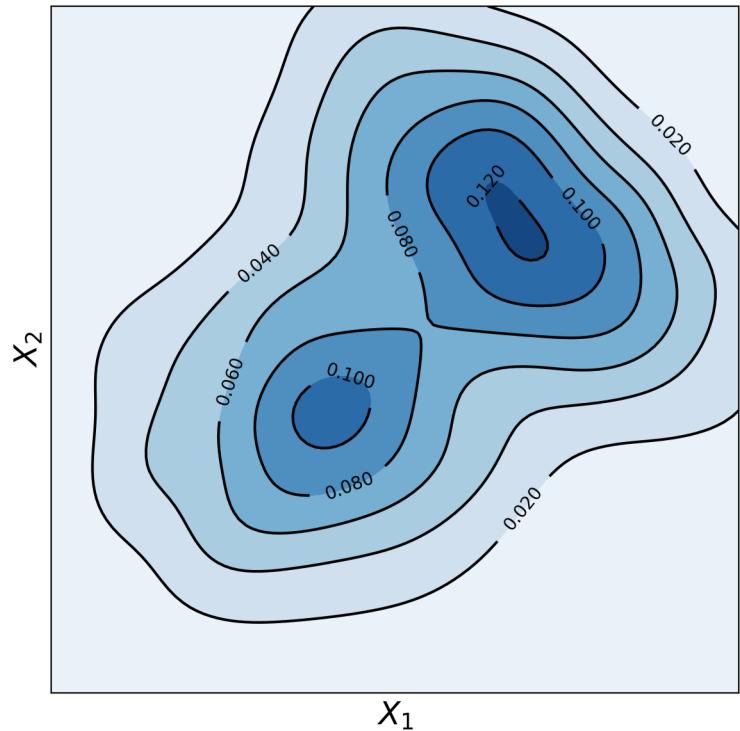
Интуиция



<https://youtu.be/QQpz7V3OgFc>

Теорема о замене переменных

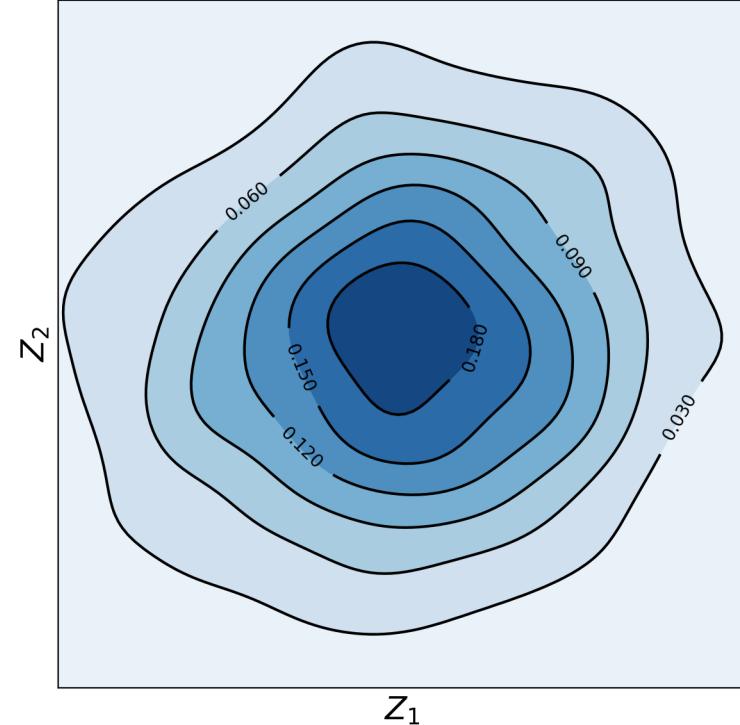
Замена переменных



$$x_i \sim p_x(x)$$

$$p_x(x) - ?$$

$$z = f(x)$$

$$z_i \sim p_z(z)$$

$$p_z(z) - \text{известно}$$

Теорема о замене переменных

Пусть даны $p_z(z)$ и $z = \mathbf{f}(x)$, тогда $p_x(x)$ находим так:

$$p_x(x_i) = p_z(\mathbf{f}(x_i)) \left| \det \frac{\partial \mathbf{f}(x_i)}{\partial x_i} \right|,$$

Отношение объема
 ∂z к новому объему
 ∂x

где матрица первых производных определяется так:

$$\frac{\partial \mathbf{f}(x_i)}{\partial x_i} = \begin{pmatrix} \frac{\partial \mathbf{f}(x_i)_1}{\partial x_{i1}} & \dots & \frac{\partial \mathbf{f}(x_i)_1}{\partial x_{in}} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial \mathbf{f}(x_i)_m}{\partial x_{i1}} & \dots & \frac{\partial \mathbf{f}(x_i)_m}{\partial x_{in}} \end{pmatrix}.$$

Пример 1

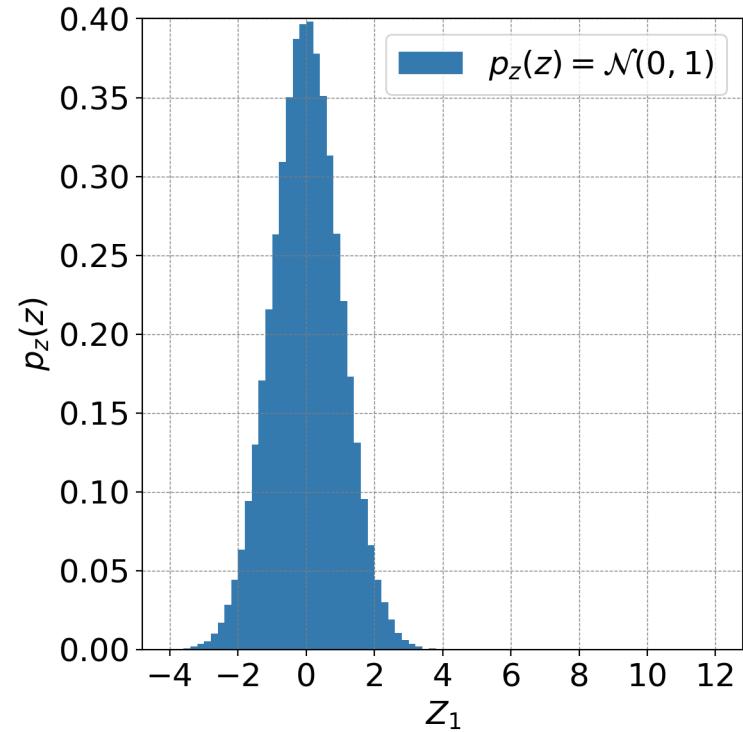


$$z = f(x) = 0.5x - 2.5$$



$$x_i \sim p_x(x)$$

$$p_x(x) - ?$$



$$z_i \sim p_z(z)$$

$$p_z(z) = \mathcal{N}(0, 1)$$

Пример 1

Итак, дана функция $\mathbf{f}(x)$:

$$z = \mathbf{f}(x) = 0.5x - 2.5$$

Тогда, матрица первых производных:

$$\frac{\partial \mathbf{f}(x_i)}{\partial x_i} = (0.5)$$

И значение Якобиана:

$$\left| \det \frac{\partial \mathbf{f}(x_i)}{\partial x_i} \right| = 0.5$$

Пример 1

Формула замены переменных:

$$p_x(x_i) = \mathbf{p_z}(\mathbf{f}(x_i)) \left| \det \frac{\partial \mathbf{f}(x_i)}{\partial x_i} \right|,$$

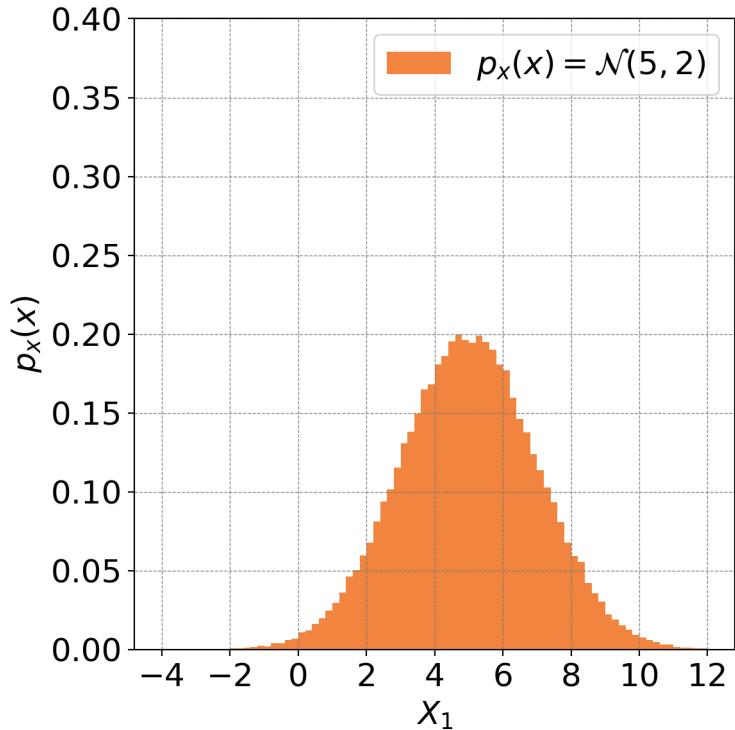
Подставим известные выражения:

$$\mathbf{p_z}(z_i) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(z_i)^2}{2}}$$

$$p_x(x_i) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(0.5x_i - 2.5)^2}{2}} * 0.5$$

$$= \frac{1}{2\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(x_i - 5)^2}{2*2^2}} = \mathcal{N}(5, 2)$$

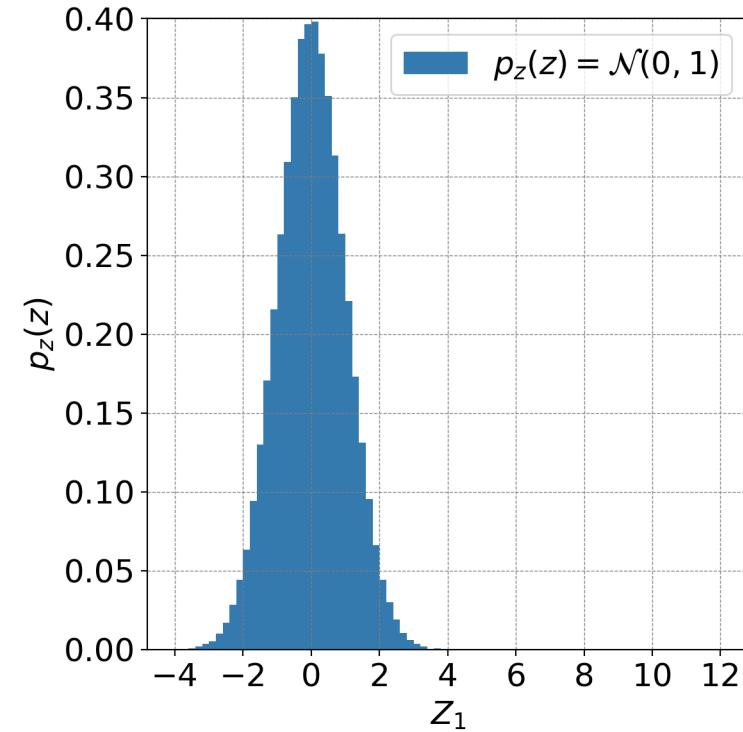
Пример 1



$$x_i \sim p_x(x)$$

$$p_x(x) - ?$$

$$z = f(x) = 0.5x - 2.5$$



$$z_i \sim p_z(z)$$

$$p_z(z) = \mathcal{N}(0, 1)$$

Теорема о замене переменных

Пусть даны $p_z(z)$ и $z = \mathbf{f}(x)$, тогда $p_x(x)$ находим так:

$$p_x(x_i) = p_z(\mathbf{f}(x_i)) \left| \det \frac{\partial \mathbf{f}(x_i)}{\partial x_i} \right|,$$

Отношение объема
 ∂z к новому
объему ∂x

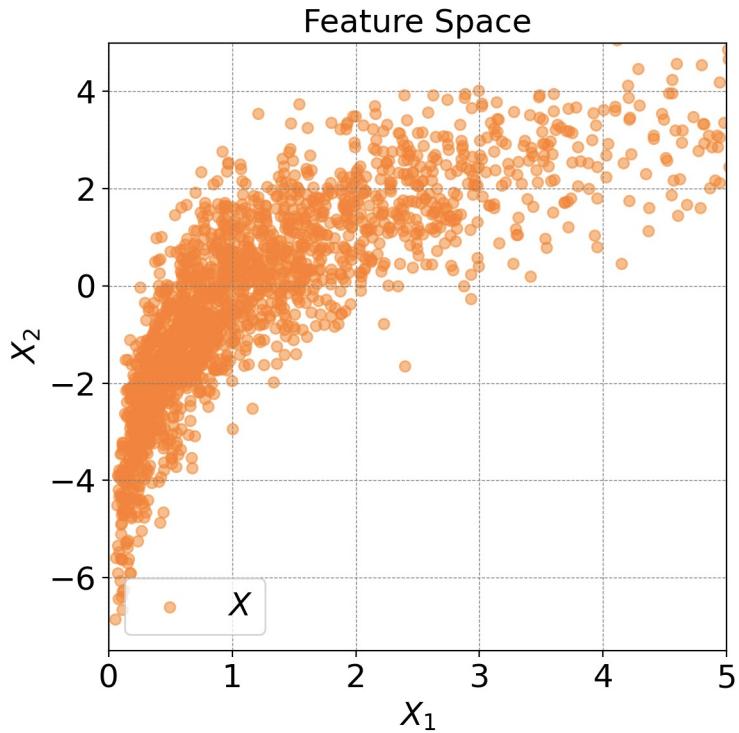
Обратная замена переменных:

$$p_z(z_i) = p_x(\mathbf{f}^{-1}(z_i)) \left| \det \frac{\partial \mathbf{f}^{-1}(z_i)}{\partial z_i} \right|$$

The background consists of a dense, abstract pattern of wavy, horizontal lines in shades of blue and white. The lines are thin and dark blue, creating a sense of depth and motion against a lighter blue background. The overall effect is reminiscent of ocean waves or flowing water.

Нормализационные потоки

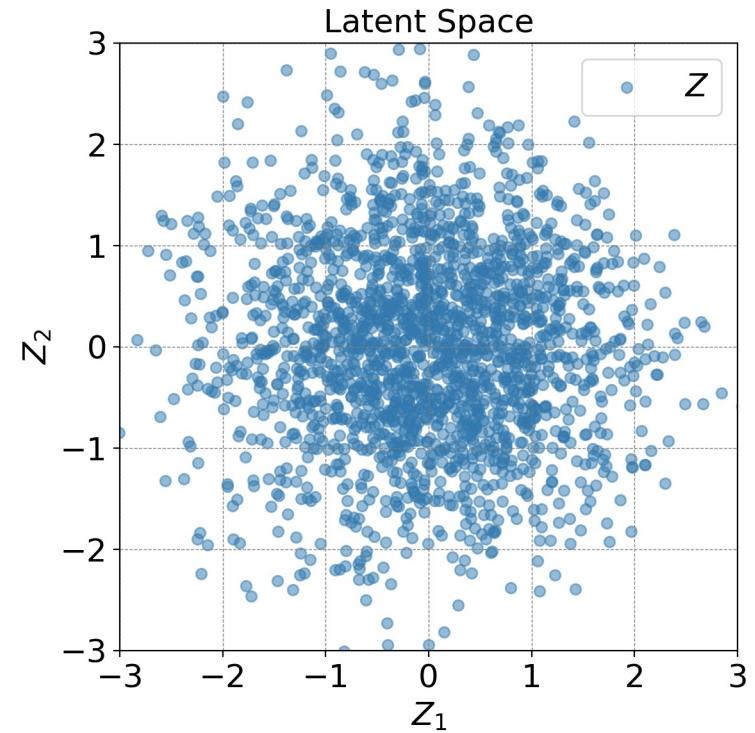
Постановка задачи



$$x_i \sim p_x(x)$$

$$p_x(x) - ?$$

$$z = f(x) - ?$$



$$z_i \sim p_z(z)$$

$$p_z(z) - \text{известно}$$

Постановка задачи

- ▶ **Дано:**

- матрица реальных объектов X

- ▶ **Задача:**

- найти такую $z_i = f(x_i)$, чтобы $z_i \sim p_z(z)$
 - при этом, $p_z(z)$ известно и задано

Решение

- ▶ Как будем находить $z_i = \mathbf{f}(x_i)$?
 - ▶ **Ответ:** методом градиентного спуска!
-
- ▶ Какую функцию потерь будем оптимизировать?
 - ▶ **Ответ:** логарифм правдоподобия:

$$L = -\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \log p_x(x_i)$$

Функция потерь

Функция потерь:

$$L = -\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \log p_x(x_i)$$

Замена переменных:

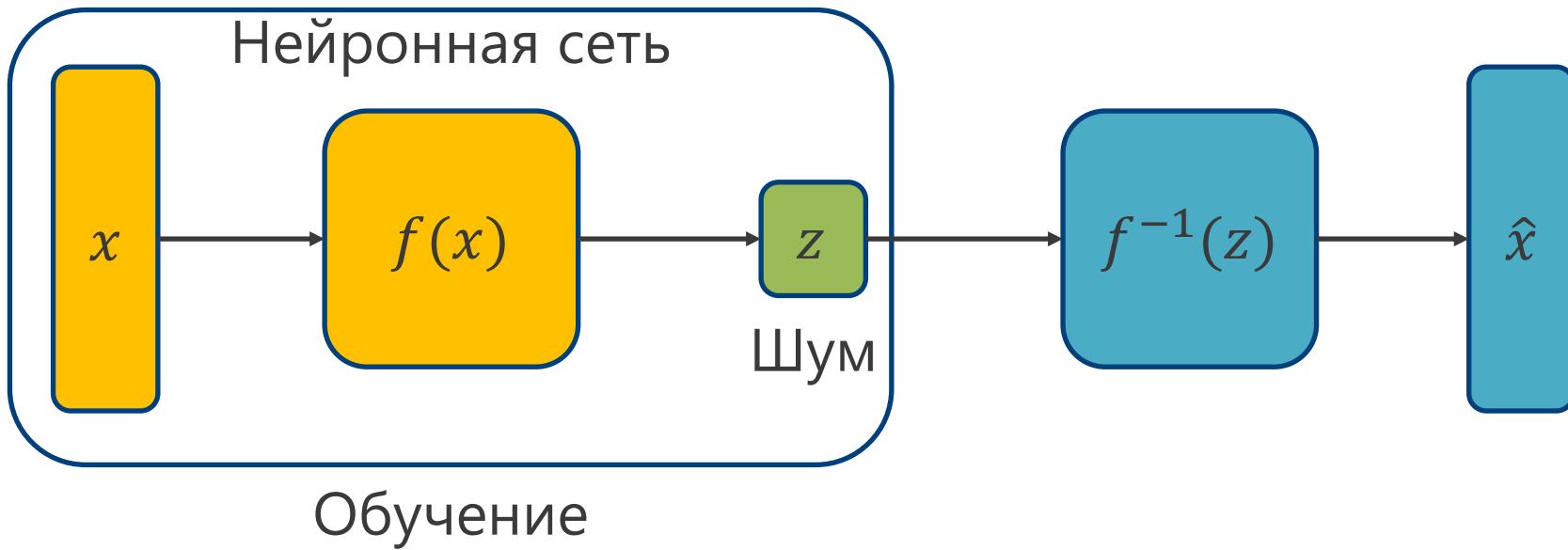
$$p_x(x_i) = p_z(f(x_i)) \left| \det \frac{\partial f(x_i)}{\partial x_i} \right|$$

Подставим в функцию потерь:

$$L = -\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \left(\log p_z(f(x_i)) + \log \left| \det \frac{\partial f(x_i)}{\partial x_i} \right| \right)$$

Общий алгоритм

Алгоритм обучения



Алгоритм обучения

Цикл обучения:

- ▶ Берем m реальных объектов $\{x_1, x_2, \dots, x_m\}$
- ▶ Считаем функцию потерь:

$$L = -\frac{1}{m} \sum_{i=1}^m \left(\log p_z(f(x_i)) + \log \left| \det \frac{\partial f(x_i)}{\partial x_i} \right| \right)$$

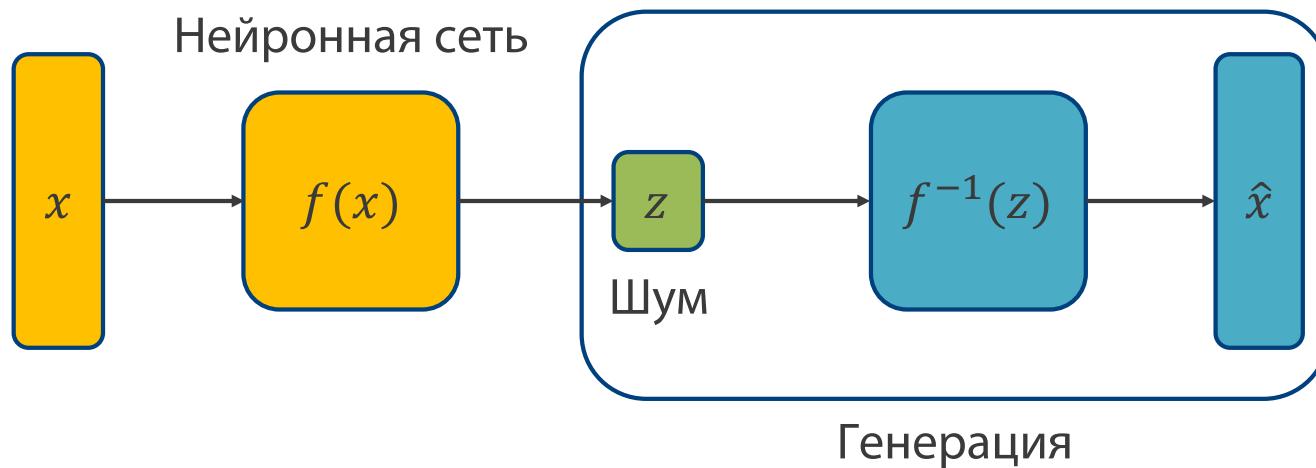
- ▶ Обновляем параметры θ_f функции $z_i = f(x_i)$:

$$\theta_f = \theta_f - \nabla_{\theta_f} L$$

Алгоритм генерации

- ▶ Генерируем случайный шум $\{z_1, z_2, \dots, z_m\}$
- ▶ Генерируем новые объекты $\{x_1, x_2, \dots, x_m\}$ по формуле:

$$x_i = f^{-1}(z_i)$$



Выбор функции

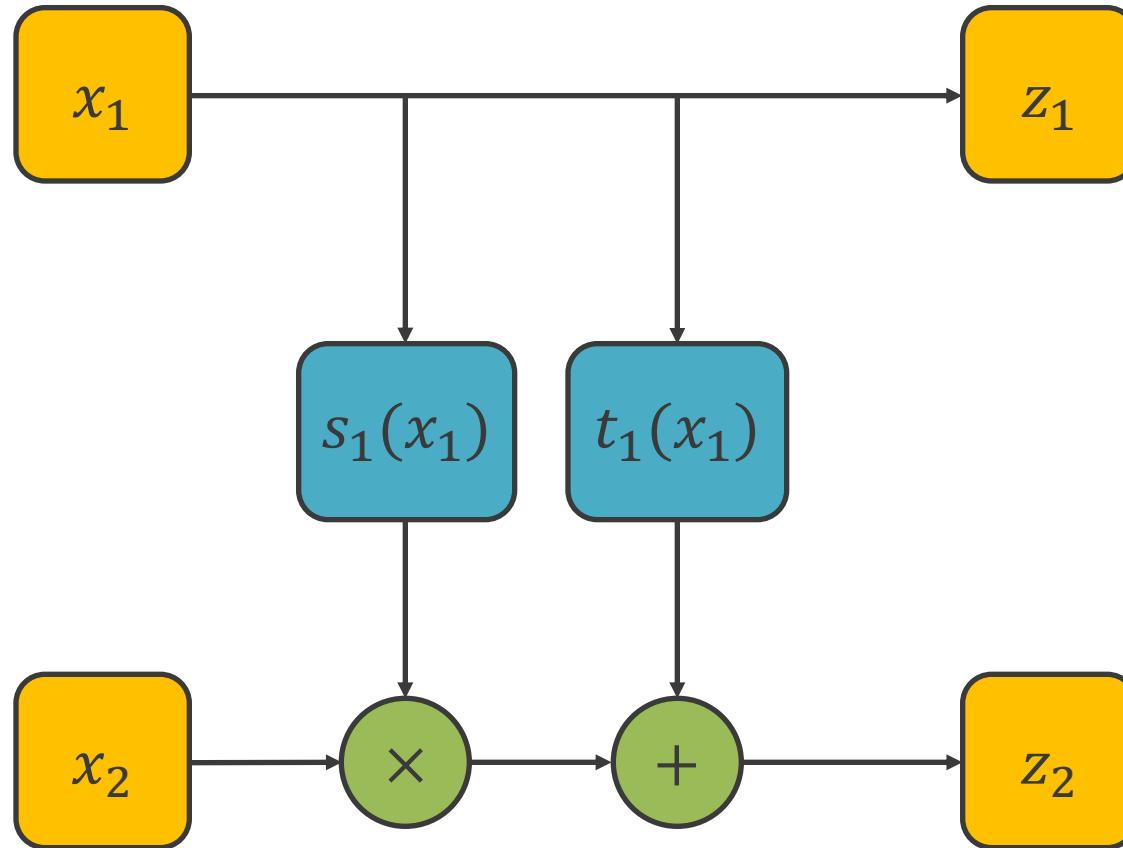
Как выбрать такую функцию $z_i = \mathbf{f}(x_i)$, чтобы она:

- ▶ была дифференцируемой,
- ▶ была обратимой?



Real-NVP

Real-NVP



ФУНКЦИЯ

$$z = \mathbf{f}(x) = \begin{cases} z_{1:d} = x_{1:d} \\ z_{d+1:D} = x_{d+1:D} \odot \exp(\mathbf{s}(x_{1:d})) + \mathbf{t}(x_{1:d}) \end{cases}$$

где:

- ▶ $z_{1:d}$ - первые d компонент вектора z ;
- ▶ $\mathbf{s}(x_{1:d})$ и $\mathbf{t}(x_{1:d})$ – **нейронные сети** с d входами и $D - d$ выходами;
- ▶ \odot – поэлементное умножение.

<https://arxiv.org/abs/1605.08803>

Якобиан

- Матрица первых производных:

$$\frac{\partial \mathbf{f}(x)}{\partial x} = \begin{pmatrix} \mathbb{I}_d & 0 \\ \frac{\partial z_{1:d}}{\partial x_{1:d}} & diag(\exp(\mathbf{s}(x_{1:d}))) \end{pmatrix}$$

- Значение Якобиана:

$$\left| \det \frac{\partial \mathbf{f}(x)}{\partial x} \right| = \exp\left(\sum_{j=d+1}^D \mathbf{s}(x_{1:d})_j \right)$$

<https://arxiv.org/abs/1605.08803>

Обратная функция

$$x = \mathbf{f}^{-1}(z) = \begin{cases} x_{1:d} = z_{1:d} \\ x_{d+1:D} = (z_{d+1:D} - \mathbf{t}(x_{1:d})) \odot \exp(-\mathbf{s}(x_{1:d})) \end{cases}$$

<https://arxiv.org/abs/1605.08803>

Пример



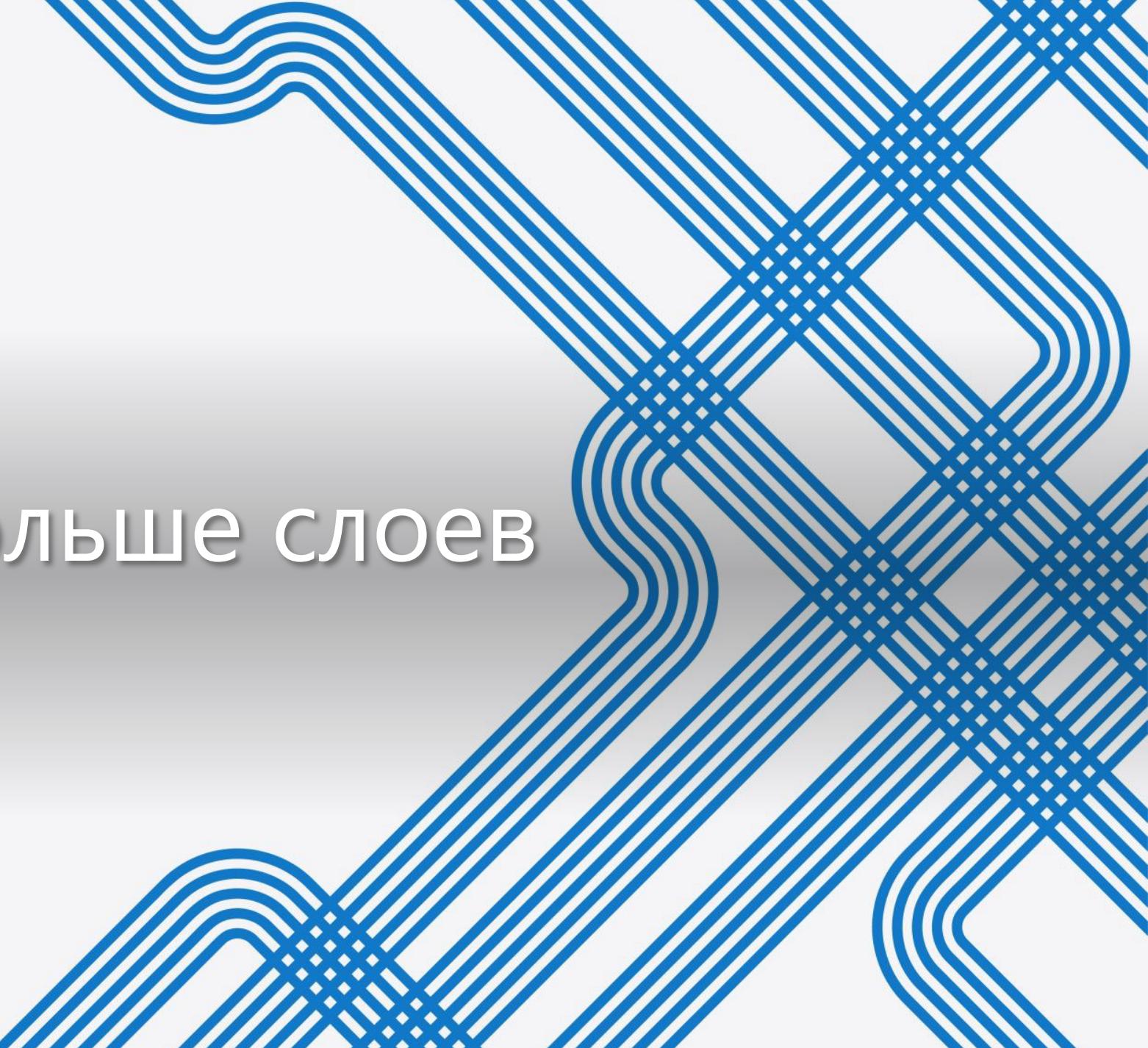
Рис.: https://github.com/laurent-dinh/laurent-dinh.github.io/blob/master/img/real_nvp_fig/celeba_samples.png

Пример Glow

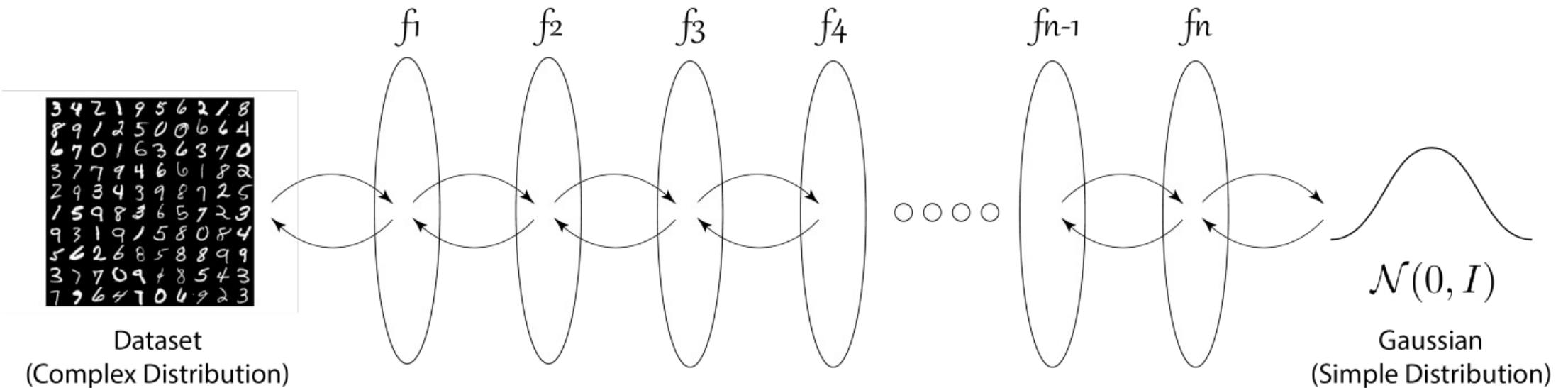


<https://arxiv.org/pdf/1807.03039.pdf>

Больше слоев



Больше слоев!



<https://towardsdatascience.com/introduction-to-normalizing-flows-d002af262a4b>

Больше слоев!

Пусть $z_i = \mathbf{f}_2(y_i)$, $y_i = \mathbf{f}_1(x_i)$.

Тогда:

$$p_x(x_i) = p_y(f_1(x_i)) \left| \det \frac{\partial f_1(x_i)}{\partial x_i} \right|$$

$$p_y(y_i) = p_z(f_2(y_i)) \left| \det \frac{\partial f_2(y_i)}{\partial y_i} \right|$$

В итоге получим:

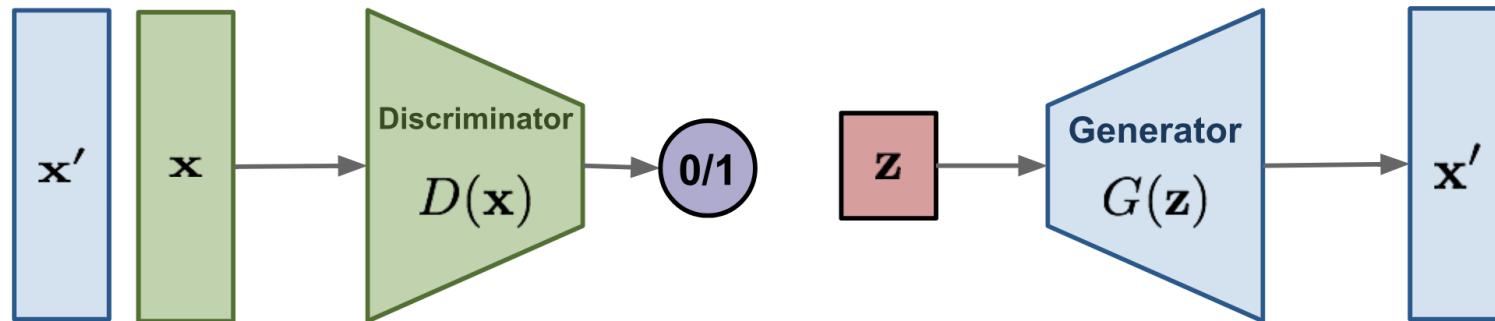
$$p_x(x_i) = p_z(f_2(f_1(x_i))) \left| \det \frac{\partial f_2(y_i)}{\partial y_i} \right| \left| \det \frac{\partial f_1(x_i)}{\partial x_i} \right|$$

Другие модели

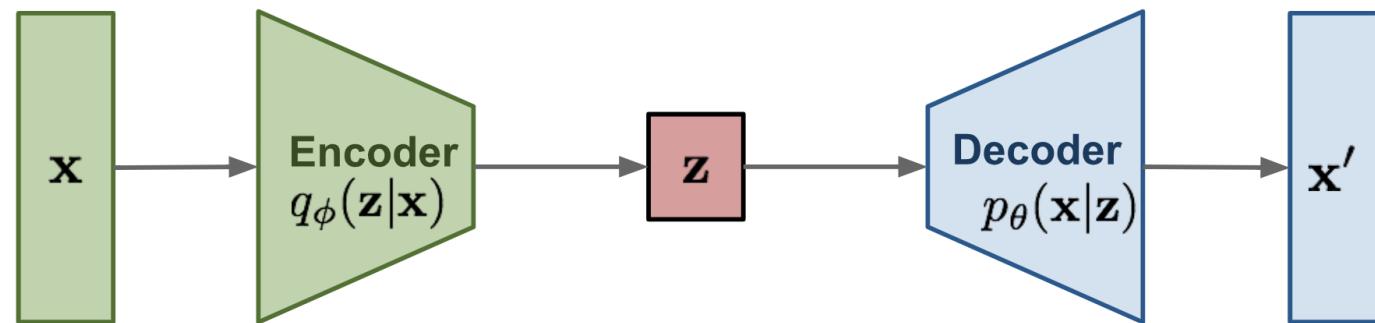
Architecture	Coupling function	Flow name
Coupling, 3.4.1	Affine, 3.4.4.1	RealNVP Glow
	Mixture CDF, 3.4.4.3	Flow++
	Splines, 3.4.4.4	quadratic (C) cubic RQ-NSF(C)
Autoregressive, 3.4.2	Piecewise Bijective, 3.4.4.7	RAD
	Affine	MAF
	Polynomial, 3.4.4.6	SOS
	Neural Network, 3.4.4.5	NAF UMNN
	Splines	quadratic (AR) RQ-NSF(AR)
Residual, 3.5		iResNet
		Residual flow
ODE, 3.6.1		FFJORD

Генеративные модели

GAN: minimax the classification error loss.

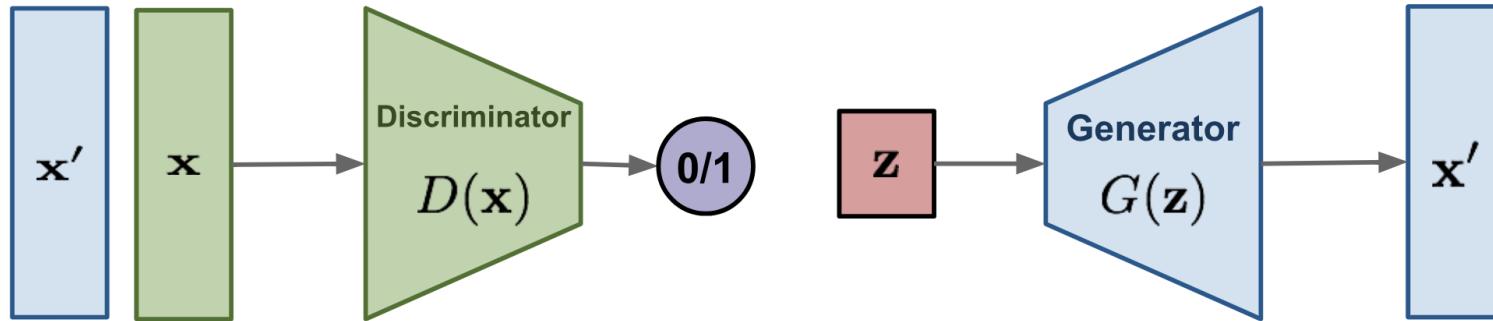


VAE: maximize ELBO.

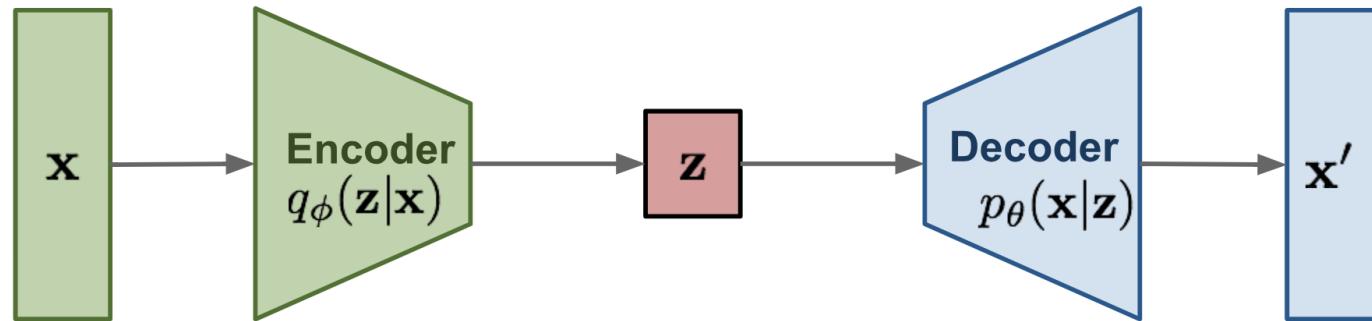


Генеративные модели

GAN: minimax the classification error loss.



VAE: maximize ELBO.



Flow-based generative models: minimize the negative log-likelihood

