

UNIWERSYTET MARII CURIE-SKŁODOWSKIEJ W LUBLINIE

Wydział Matematyki, Fizyki i Informatyki

Kierunek: Informatyka

Specjalność: Sztuczna inteligencja

Filip Ręka

nr albumu: 296595

Analiza porównawcza zastosowań tradycyjnych oraz wariacyjnych autoenkoderów

Comparative analysis of traditional and variational autoencoders' applications

Praca licencjacka napisana w Katedrze Cyberbezpieczeństwa pod kierunkiem dr hab. Michała Wydry

Spis treści

\mathbf{Wstep}					
1	Tra	dycyjny autoenkoder	7		
	1.1	Informacje wstępne	7		
		1.1.1 Zbiór danych MNIST	8		
	1.2	Budowa	9		
	1.3	Zastosowania	10		
		1.3.1 Redukcja wymiarów	10		
		1.3.2 Odszumianie obrazów	10		
		1.3.3 Uzupełnianie obrazów	10		
	1.4	Problemy z generacją nowych danych	11		
2	Wariacyjny autoenkoder				
	2.1	Informacje ogóle	13		
	2.2	Motywacja statystyczna	14		
	2.3	Wnioskowanie wariacyjne	15		
		2.3.1 Dywergencji Kullbacka-Leiblera	15		
	2.4	Budowa tmp	17		
	2.5	Sztuczka reparametryzacyjna	18		
3	Implementacja				
	3.1	Tensorflow oraz Keras	19		
Sp	ois ta	abel	21		
Sı	Spis rysunków				

4 SPIS TREŚCI

Wstęp

Autoenkoder jest jednym z rodzajów sieci neuronowych, której zadaniem jest nauczenie się zakodowania nie oznaczonych danych. Kod jest kolejnie wykorzystywany do ponownego wygenerowania wejścia sieci. Autoenkoder uczy się reprezentacji zbioru danych do zmiennych ukrytych przez ignorowanie nie istotnych danych. Wariacyjne autoenkodery są popularnymi modelami generacyjnymi. Zostały zaproponowane przez Diederika P Kingma i Maxa Wellinga w roku 2014.[1] Najczęściej zostają one skategoryzowane do modeli uczenia częściowo nadzorowanego. Znajdują zastosowanie w generacji obrazów, tekstu, muzyki oraz w detekcji anomalii. W przeciwieństwie do tradycyjnych autoenkoderów prezentują pobabilistyczne podejście do generowania zmiennych ukrytych. Swoją popularność zawdzięcza swojej budowie, która jest oparta na sieciach neuronowych oraz możliwości trenowania ich przy pomocy metod gradientowych.

6 SPIS TREŚCI

Rozdział 1

Tradycyjny autoenkoder

1.1 Informacje wstępne

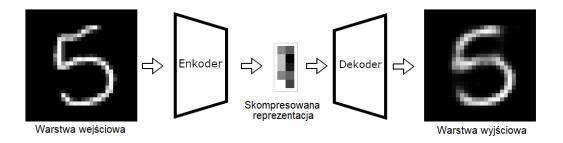
Autoenkoder jest specyficzną wersją sieci neuronowej składającej się z dwóch części: enkodera, który koduje dane wejściowe oraz dekodera, który na podstawie kodu rekonstruuje wejście. [2] Architektura enkodera wymaga aby jego warstwa wyjściowa generująca reprezentacje danych była mniejsza niż warstwa wejściowa. Często zwężenie to jest nazywane bottle neck. Model na swoją warstwę wejściową oraz wyjściową dostaję te same dane. Powiedzmy że mamy dane wejściowe X o wymiarze m oraz chcemy je zakodować do wymiaru n. Formalnie możemy zapisać:

Enkoder
$$E : \mathbb{R}^m \to \mathbb{R}^n$$

Dekoder $D : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^m$
gdzie $n < m$

Calem $bottle\ neck-a$ jest skompresowanie wejścia i zachowanie w ukrytych wartościach jak najwięcej informacji. W momencie, kiedy n=m model przekazałby wartości z pierwszej warstwy na ostatnią bez potrzeby kompresji. Celem treningu całego autoenkodera jest zminimalizowanie błędu pomiędzy prawdziwymi danymi wejściowymi, a tymi odkodowanymi ze skompresowanych wartości. W przypadku obrazów funkcją straty może być na przykład błąd średniokwadratowy lub binarna entropia krzyżowa, która powie nam, jak wynik różni się od wejścia.

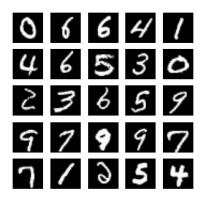
$$\mathcal{L}(x,\hat{x}) = \frac{1}{m} \sum_{i=0}^{m} (x_i - \hat{x}_i)^2 = \frac{1}{m} \sum_{i=0}^{m} (x_i - D(E(x_i)))^2$$



Rysunek 1.1: Schemat budowy autoenkodera.

1.1.1 Zbiór danych MNIST

Zbiór danych MNIST (Modified National Institute of Standards and Technology) jest zbiorem wielu odręcznie pisanych cyfr.[3] Znajduje szerokie zastosowanie w nauce i prezentacjach możliwości modeli uczenia maszynowego. W jego skład wchodzi 60,000 obrazów przeznaczonych do treningu modeli oraz 10,000 do testów. Obrazy są czarno-białe i mają wymiary 28 na 28 pikseli.

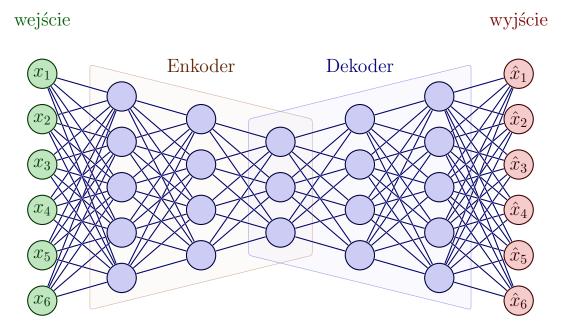


Rysunek 1.2: Przykładowe obrazy ze zbioru danych.

1.2 Budowa **9**

1.2 Budowa

Jak już zostało napisane, autoenkoder składa się z dwóch sieci neuronowych. Enkoder jak i dekoder są w pełni połączonymi sieciami neuronowymi.



Rysunek 1.3: Wizualizacja sieci tworzącej autoenkoder.

Obrazek przedstawia prosty autoenkoder kompresujący wejście siedmiowymiarowe do kodu o długości trzy. Enkoder jak i dekoder mają po dwie warstwy ukryte. Odbicie lustrzane architektury nie jest konieczne aby model działał poprawnie, jednak zazwyczaj taką architekturę się używa.

Hpierparametramy modelu, które możemy ustalić przed jego treningiem to:

- Ilość warstw ukrytych jeśli wiemy, że nasze dane są skomplikowane, dodatkowe warstwy ukryte będą miały pozytywny wpływ na otrzymywane rezultaty, ponieważ większa ilość warstw sprawia, że model jest w stanie nauczyć się bardziej skomplikowanych funkcji.[4, 5]
- Ilość neuronów w poszczególnych warstwach autoenkoder powinien posiadać w każdej warstwie mniej neuronów niż w poprzedniej. W ten sposób model nie będzie "oszukiwał" i zostaje zmuszony do reprezentacji jak najlepszej kompresji.
- Funkcja straty najlepszymi funkcjami straty do treningu autoenkodera jest błąd średniokwadratowy lub binarna entropia krzyżowa w przypadku, kiedy dane są w przedziale od 0 do 1.
- Rozmiar kodu jest najistotniejszy parametr dla nas i dla modelu. Dłuższa długość kodu oznacza zachowanie więcej istotnych elementów, a co za tym idzie lepsze

odwzorowanie przez dekoder. Z drugiej strony używając, dłuższego wektora zmiennych ukrytych dostajemy gorszą kompresje danych. Długość kodu musimy dobrać w zależności od problemu, który chcemy rozwiązać używając modelu.

1.3 Zastosowania

1.3.1 Redukcja wymiarów

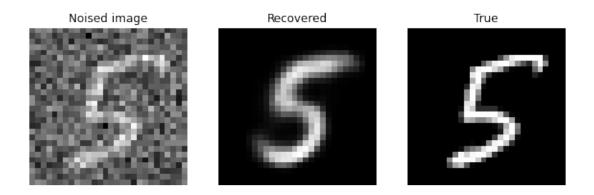
Lorem ipsum dolor sit amet, consectetuer adipiscing elit. Ut purus elit, vestibulum ut, placerat ac, adipiscing vitae, felis. Curabitur dictum gravida mauris. Nam arcu libero, nonummy eget, consectetuer id, vulputate a, magna. Donec vehicula augue eu neque. Pellentesque habitant morbi tristique senectus et netus et malesuada fames ac turpis egestas. Mauris ut leo. Cras viverra metus rhoncus sem. Nulla et lectus vestibulum urna fringilla ultrices. Phasellus eu tellus sit amet tortor gravida placerat. Integer sapien est, iaculis in, pretium quis, viverra ac, nunc. Praesent eget sem vel leo ultrices bibendum. Aenean faucibus. Morbi dolor nulla, malesuada eu, pulvinar at, mollis ac, nulla. Curabitur auctor semper nulla. Donec varius orci eget risus. Duis nibh mi, congue eu, accumsan eleifend, sagittis quis, diam. Duis eget orci sit amet orci dignissim rutrum.

1.3.2 Odszumianie obrazów

Model autoenkodera przeznaczony do odszumiania danych, często dostaje swoją nazwę i jest określany mianem DAE (Denoising autoencoder). DAE tak jak zwykły autoenkoder próbuje w jak najlepszy sposób skompresować dane, zachowując jak najwięcej istotnych informacji. Najważniejszą różnicą między tymi modelami są dane, które dostają na wejście i wyjście. Obrazy przyjmowane na warstwę wejściową są zaszumione natomiast te z warstwy wyjściowej pochodzą prosto ze zbioru danych. Rysunek 1.4 przedstawia porównanie obrazu z szumem, który powstał przez dodanie do zbioru danych szumu powstałego z losowego próbkowania z normalnej dystrybucji $\mathcal{N}(0,1)$, obrazu który udało się odzyskać z kodu wygenerowanego przez enkoder oraz prawdziwego obrazu z warstwy wyjściowej modelu.

1.3.3 Uzupełnianie obrazów

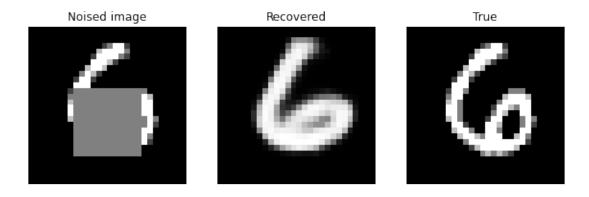
Lorem ipsum dolor sit amet, consectetuer adipiscing elit. Ut purus elit, vestibulum ut, placerat ac, adipiscing vitae, felis. Curabitur dictum gravida mauris. Nam arcu libero, nonummy eget, consectetuer id, vulputate a, magna. Donec vehicula augue eu neque. Pellentesque habitant morbi tristique senectus et netus et malesuada fames ac turpis egestas. Mauris ut leo. Cras viverra metus rhoncus sem. Nulla et lectus vestibulum urna fringilla ultrices. Phasellus eu tellus sit amet tortor gravida placerat. Integer sapien est,



Rysunek 1.4: Obraz z szumem, odzyskany oraz prawdziwy.

iaculis in, pretium quis, viverra ac, nunc. Praesent eget sem vel leo ultrices bibendum. Aenean faucibus. Morbi dolor nulla, malesuada eu, pulvinar at, mollis ac, nulla. Curabitur auctor semper nulla. Donec varius orci eget risus. Duis nibh mi, congue eu, accumsan eleifend, sagittis quis, diam. Duis eget orci sit amet orci dignissim rutrum.

Nam dui ligula, fringilla a, euismod sodales, sollicitudin vel, wisi. Morbi auctor lorem non justo. Nam lacus libero, pretium at, lobortis vitae, ultricies et, tellus. Donec aliquet, tortor sed accumsan bibendum, erat ligula aliquet magna, vitae ornare odio metus a mi. Morbi ac orci et nisl hendrerit mollis. Suspendisse ut massa. Cras nec ante. Pellentesque a nulla. Cum sociis natoque penatibus et magnis dis parturient montes, nascetur ridiculus mus. Aliquam tincidunt urna. Nulla ullamcorper vestibulum turpis. Pellentesque cursus luctus mauris.



Rysunek 1.5: Grafika przedstawia porównanie obrazu wejściowego, prawdziwego oraz wynikowego odkodowanego z czterech wartości.

1.4 Problemy z generacją nowych danych

Dobrym pytaniem jest czy przy pomocy kodu jesteśmy generować nowe dane bardzo podobne do tych co model otrzymał na wejściu. Wytrenowaliśmy sieć, która jest w stanie

ze zmiennych ukrytych odkodować obraz, więc ustawiając wejście dekodera na losowy punkt z przestrzeni zmiennych powinniśmy być w stanie dostać obraz, który jest podobny do tych na których sieć została wytrenowana. Aby model mógł generować nowe dane muszą zostać spełnione dwa warunki:

- Nasza przestrzeń kodu (tzw. zmiennych ukrytych) musi być ciągła co znaczy że dwa punkty znajdujące się obok siebie będą dawać podobne dane jak zostaną odkodowane
- Przestrzeń musi być kompletna co znaczy, ze punkty wzięte z dystrybucji muszą dawaj wyniki mające sens

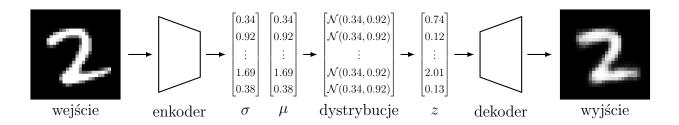
Tradycyjna architektura nie zapewnia nam a priori czy przestrzeń zmiennych ukrytych będzie spełniała te warunki. Zadaniem modelu jest jak najlepsze odzwierciedlenie skompresowanych danych, a nie dbanie o to, czy rozkład zmiennych kodu spełnia nasze warunki. Może się tak zdarzyć, że siec nauczy się akurat takiej dystrybucji, która by nam pasowała, ale jest to bardzo mało prawdopodobne. Jeśli chcemy zbudować model generacyjny musimy mieć zagwarantowane, że za każdym razem dostaniemy rozkład spełniający nasze warunki.

Rozdział 2

Wariacyjny autoenkoder

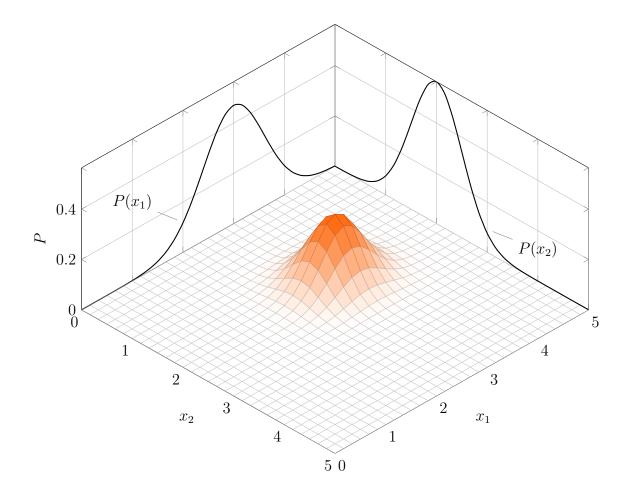
2.1 Informacje ogóle

Wariacyjny autoenkoder rozwiązuje problemy generacyjny tradycyjnego modelu. VAE ma na celu skompresowanie danych do określonego wielowymiarowego rozkładu ukrytego, a następnie z próbki z tej dystrybucji, próbuje jak najlepiej zrekonstruować wejście. Najczęściej rozkładami wybieranymi do tego celu są rozkłady normalne. Rozkład normalny jest opisywany przy pomocy dwóch wartości: średnia, która oznaczana jest znakiem μ oraz odchylenie standardowe oznaczane σ . Jeśli chcemy dane skompresować do kodu o długości n, enkoder wygeneruje dwa wektory n-wymiarowe, z którego jeden będzie przechowywał wartości średniej a drugi odchylenia standardowego dla każdego z n rozkładów normalnych.



Rysunek 2.1: Schemat budowy wariacyjnego autoenkodera.

Ograniczając enkoder do nauki wyłącznie tej dystrybucji z której próbkujemy losowo zmienne ukryte z których rekonstruujemy obrazy zapewniamy sobie gładką oraz ciągłą dystrybucje zmiennych losowych. Oczekujemy, że dowolna próbka z przestrzeni zostanie celnie odwzorowana przez dekoder. Dlatego wartości, które sa blisko będą generowały podobne wyjście.



Rysunek 2.2: Wielowymiarowy rozkład zmiennej.

2.2 Motywacja statystyczna

Powiedzmy ze istnieje zmienna ukryta z, która generuje obserwację x. Posiadamy tylko informację o x i chcemy się dowiedzieć z jakiego z dana obserwacja powstała. Aby tego dokonać powinniśmy policzyć p(z|x). Z twierdzenia Bayesa wiemy że:

$$p(z|x) = \frac{p(x|z)p(z)}{p(x)}$$

Aby obliczyć rozkład marginalny p(x) musimy policzyć:

$$p(x) = \int_{z} p(x, z) dz$$

Obliczenie tej całki jest bardzo trudne ponieważ z jest często wielowymiarowe i przestrzeń przeszukiwań jest kombinatorycznie zwyczajnie za duża aby korzystać z takich metod jak próbkowanie Monte Carlo łańcuchami Markowa.

2.3 Wnioskowanie wariacyjne

Rozwiązaniem tego problemu jest próba policzenia rozkładu q(z|x), które będzie jak najlepiej odzwierciedlać p(z|x) i będzie miał rozkład, który będziemy mogli policzyć.

2.3.1 Dywergencji Kullbacka-Leiblera

Jest to miara określająca rozbieżność między dwoma rozkładami prawdopodobieństwa. Nie można określić jej mianem metryki ponieważ nie jest symetryczna $(D_{KL}(P||Q) \neq D_{KL}(Q||P))$.

Naszym celem będzie zminimalizowanie jej.

$$q^*(z|x) = \operatorname{argmin}_{q(z|x) \in Q}(D_{KL}(q(z|x)||p(z|x)))$$

gdzie Q to rodzina prostych dystrybucji, na przykład rozkładu Gaussa

Policzmy:

$$D_{KL}(q(z|x)||p(z|x)) = \mathbb{E}_{z \sim q(z|x)} \log \frac{p(z|x)}{q(z|x)} = \int_{z} q(z|x) \log \frac{q(z|x)}{p(z|x)} dz$$

Natrafiamy na kolejny problem ponieważ nie możemy p(z|x) jednak jesteśmy w stanie to przepisać jako:

$$p(z|x) = \frac{p(z,x)}{p(x)}$$

Tu jest dużo matmy której nie chce mi się na razie pisać ale tu będzie ELBO (dolna granica dowodów).

Wybieramy sobie że nasza funkcja q(z|x) będzie $\mathcal{N}(0, \mathbf{I})$. Dywergencja dla dwóch rozkładów normalnych wygląda w następujący sposób.

$$\frac{1}{2} \left\{ \left(\frac{\sigma_0}{\sigma_1} \right)^2 + \frac{(\mu_1 - \mu_0)^2}{\sigma_1^2} - 1 + 2 \log \frac{\sigma_1}{\sigma_0} \right\}$$

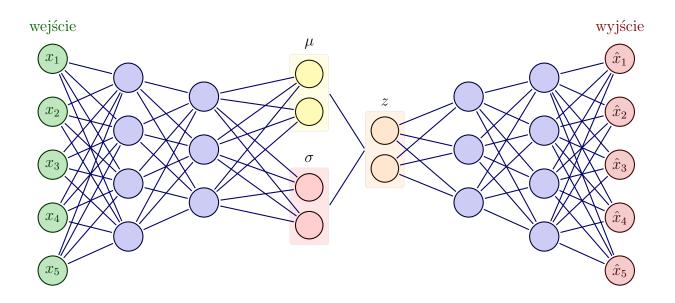
Co w naszym przypadku gdzie $\mu_1=0$ ora
z $\sigma_1=1$ uprości się do:

$$\frac{1}{2} \sum_{m}^{i=1} \sigma_i^2 + \mu_i^2 - 2\log(\sigma_i) - 1$$

Jest to pierwsza część naszej funkcji straty.

2.4 Budowa tmp 17

2.4 Budowa tmp

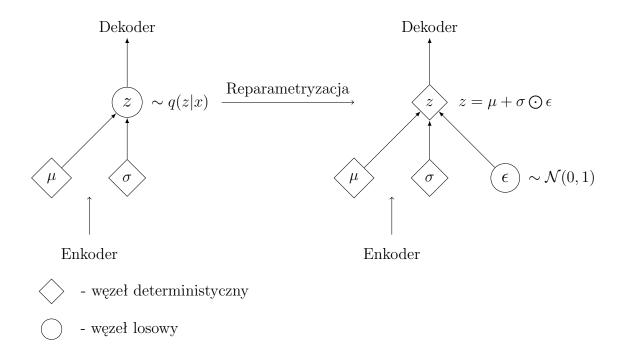


2.5 Sztuczka reparametryzacyjna

Model VAE po zakodowaniu wejścia dokonuje operacji próbkowania (sampling) z dystrybucji na nauczonych parametrach. Przy propagacji do przodu nie jest to problem, jednak podczas propagacji wstecznej jest to nie możliwe. Operacja próbkowania nie jest różniczkowalna co sprawia, że nie możemy policzyć gradientu po którym będziemy schodzić. Sposobem obejścia tego problemu jest zastosowanie sztuczki (reparameterization trick). Próbkowanie z dystrybucji $z \sim \mathcal{N}(\mu, \sigma)$ jesteśmy w stanie zapisać jako:

$$\epsilon \sim \mathcal{N}(0,1)$$
$$z = \mu + \sigma \odot \epsilon$$

Pozornie nic się nie zmieniło, jednak teraz jesteśmy w stanie poprowadzić gradient przez z, które jest teraz deterministycznie. W poprzednim przypadku było ono losowe wybierane z dystrybucji.



Rysunek 2.3: Graficzna reprezentacja reparametryzacji.

Rozdział 3

Implementacja

3.1 Tensorflow oraz Keras

Lorem ipsum dolor sit amet, consectetuer adipiscing elit. Ut purus elit, vestibulum ut, placerat ac, adipiscing vitae, felis. Curabitur dictum gravida mauris. Nam arcu libero, nonummy eget, consectetuer id, vulputate a, magna. Donec vehicula augue eu neque. Pellentesque habitant morbi tristique senectus et netus et malesuada fames ac turpis egestas. Mauris ut leo. Cras viverra metus rhoncus sem. Nulla et lectus vestibulum urna fringilla ultrices. Phasellus eu tellus sit amet tortor gravida placerat. Integer sapien est, iaculis in, pretium quis, viverra ac, nunc. Praesent eget sem vel leo ultrices bibendum. Aenean faucibus. Morbi dolor nulla, malesuada eu, pulvinar at, mollis ac, nulla. Curabitur auctor semper nulla. Donec varius orci eget risus. Duis nibh mi, congue eu, accumsan eleifend, sagittis quis, diam. Duis eget orci sit amet orci dignissim rutrum. [6]

Implementacja

Spis tabel

22 SPIS TABEL

Spis rysunków

1.1	Schemat budowy autoenkodera	8
1.2	Przykładowe obrazy ze zbioru danych	8
1.3	Wizualizacja sieci tworzącej autoenkoder	9
1.4	Obraz z szumem, odzyskany oraz prawdziwy	11
1.5	Grafika przedstawia porównanie obrazu wejściowego, prawdziwego oraz	
	wynikowego odkodowanego z czterech wartości	11
2.1	Schemat budowy wariacyjnego autoenkodera.	13
2.2	Wielowymiarowy rozkład zmiennej	14
2.3	Graficzna reprezentacja reparametryzacji	18

24 SPIS RYSUNKÓW

Bibliografia

- [1] D. P. Kingma and M. Welling, "Auto-encoding variational bayes," 2014.
- [2] D. Bank, N. Koenigstein, and R. Giryes, "Autoencoders," 2021.
- [3] Y. LeCun and C. Cortes, "MNIST handwritten digit database," 2010.
- [4] M. Telgarsky, "Benefits of depth in neural networks," 2016.
- [5] R. Eldan and O. Shamir, "The power of depth for feedforward neural networks," 2016.
- [6] C. Doersch, "Tutorial on variational autoencoders," 2021.