UMCS
UNIWERSYTET MARII CURIE-SKŁODOWSKIEJ

UNIWERSYTET MARII CURIE-SKŁODOWSKIEJ
W LUBLINIE
Wydział Matematyki, Fizyki i Informatyki

Kierunek: **Informatyka**
Specjalność: **Sztuczna inteligencja**

Filip Ręka
nr albumu: 296595

Variational Autoencoder

Variational Autoencoders

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

Lublin 2021

Spis treści

Wstęp

Wariacyjne Autoenkodery stają się coraz bardziej popularnymi modelami uczenia maszynowego. Zostały zaproponowane przez Diederika P Kingma i Maxa Wellinga. Najczęściej zostają one skategoryzowane do modeli uczenia częściowo nadzorowanego. Znajdują zastosowanie w generacji obrazów, tekstu, muzyki, odszumianiu obrazków, sygnałów 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 go przy pomocy metod gradientowych.

Rozdział 1

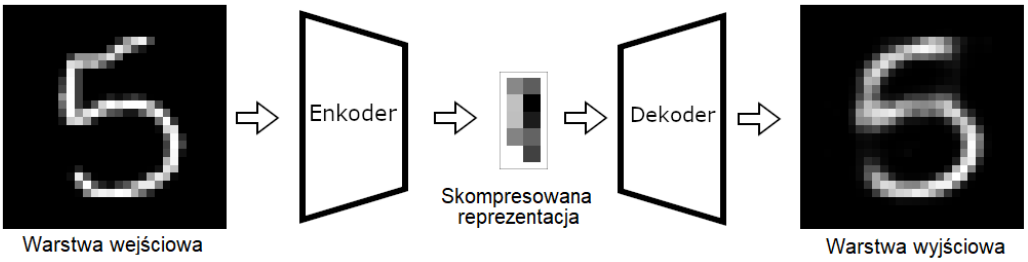
Tradycyjny autoenkoder

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.[1] Architektura enkodera wymaga aby jego warstwa wyjściowa generująca reprezentacje danych była mniejsza niż warstwa wejściowa. Często zwężenie jest nazywane *bottle neck*. Model na swoją warstwę wejściową oraz wyjściową dostaję te same dane. 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, który powie nam, jak wynik różni się od wejścia.
Powiedzmy że mamy dane wejściowe X o wymiarze m oraz chcemy je zakodować do wymiaru n. Formalnie możemy zapisać, że model próbuje nauczyć się funkcji:

$$\text{Enkoder } E : \mathbb{R}^m \to \mathbb{R}^n$$
$$\text{Dekoder } D : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^m$$
$$\text{gdzie } n < m$$
$$\mathcal{L}(x, \hat{x}) = \frac{1}{m}\sum_{i=0}^{m}(x_i - \hat{x}_i)^2 = \frac{1}{m}\sum_{i=0}^{m}(x_i - D(E(x_i)))^2$$

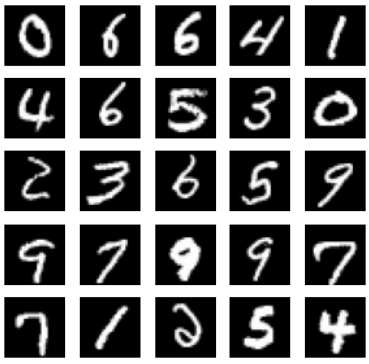
Calem *bottle neck-a* jest skompresowanie wejścia i zachowanie w ukrytych wartościach jak najwięcej informacji. W momencie, kiedy $n = m$ model przekazałby wartości z pierwszej warstwy na ostatnią bez potrzeby kompresji.



Rysunek 1.1: Obrazek jest zakodowany do skompresowanej reprezentacji, a następnie zostaje odkodowany przez dekoder.

1.1.1 Zbiór danych MNIST

Zbiór danych MNIST (*Modified National Institute of Standards and Technology*)[2] jest zbiorem wielu odręcznie pisanych cyfr. Jest szeroko używany w zastosowaniach uczenia maszynowego. W jego skład wchodzi 60,000 obrazów przeznaczonych do treningu modeli oraz 10,000 do testów. Obrazki są czarno-białe i mają wymiary 28x28 pikseli.



Rysunek 1.2: Przykładowe obrazy ze zbioru danych.

1.2 Zastosowania

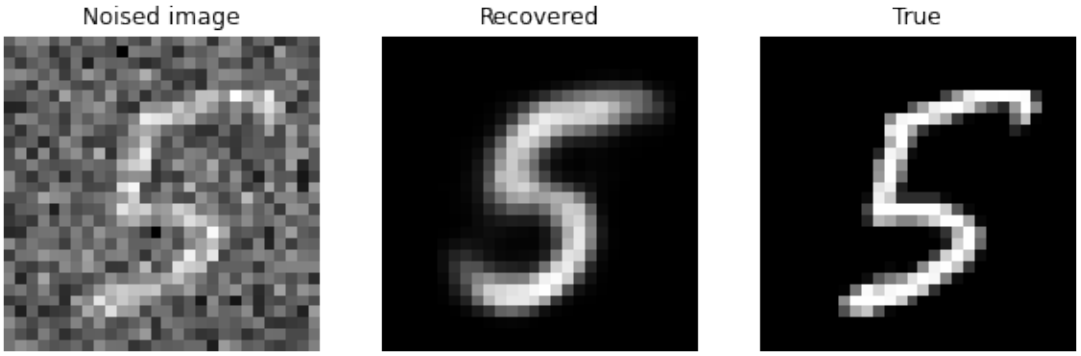
1.2.1 Redukcja wymiarów

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.

1.2.2 Odszumianie obrazów

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.



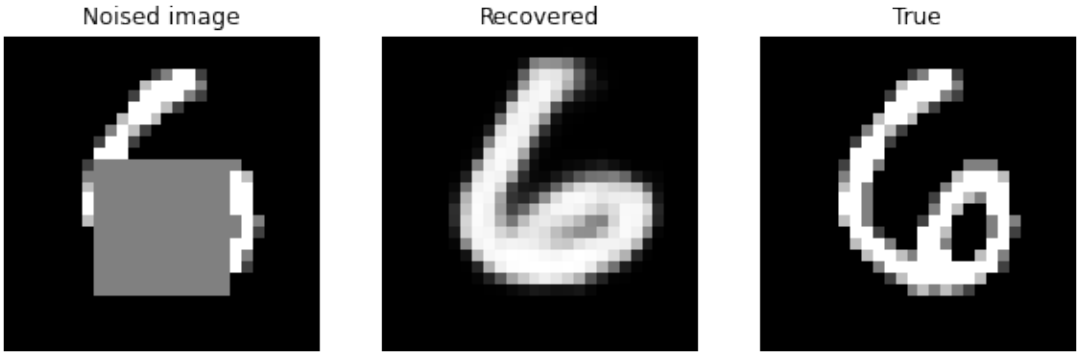
Rysunek 1.3: Grafika przedstawia porównanie obrazu z szumem, prawdziwego oraz wynikowego odkodowanego z czterech wartości.

1.2.3 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, 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 1.4: Grafika przedstawia porównanie obrazu wejściowego, prawdziwego oraz wynikowego odkodowanego z czterech wartości.

1.3 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 ma inne podejście do generowania zmiennych ukrytych. Zamiast generować jedną zmienną dla każdego wymiaru, generuje dwie liczby, σ oraz μ, które traktujemy jako odchylenie standardowe oraz średnią rozkładu normalnego. Dla przykładu jeśli uznamy ze chcemy dane reprezentować jako siedmio-wymiarowy wektor, nasz enkoder wygeneruje dwa wektory siedmio-wymiarowe, z którego jeden będzie przechowywał wartości średniej a drugi odchylenia standardowego dla każdego z siedmiu rozkładu normalnego. Kolejną istotną zmiana jest funkcja straty, która oprócz błędu rekonstrukcji obrazu składa się z dywergencji Kullbacka-Leiblera.

2.2 Motywacja statystyczna

Powiedzmy ze istnieje zmienna ukryta z, która generuje obserwację x. Mamy tylko informację o x i chcemy się dowiedzieć jakiej jest z. Aby to zrobić 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 zwyczajnie kombinatorycznie 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.

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

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 $\mathcal{N}(0, \boldsymbol{I})$. 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 $\mu_1 = 0$ oraz $\sigma_1 = 1$ uprości się do:

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

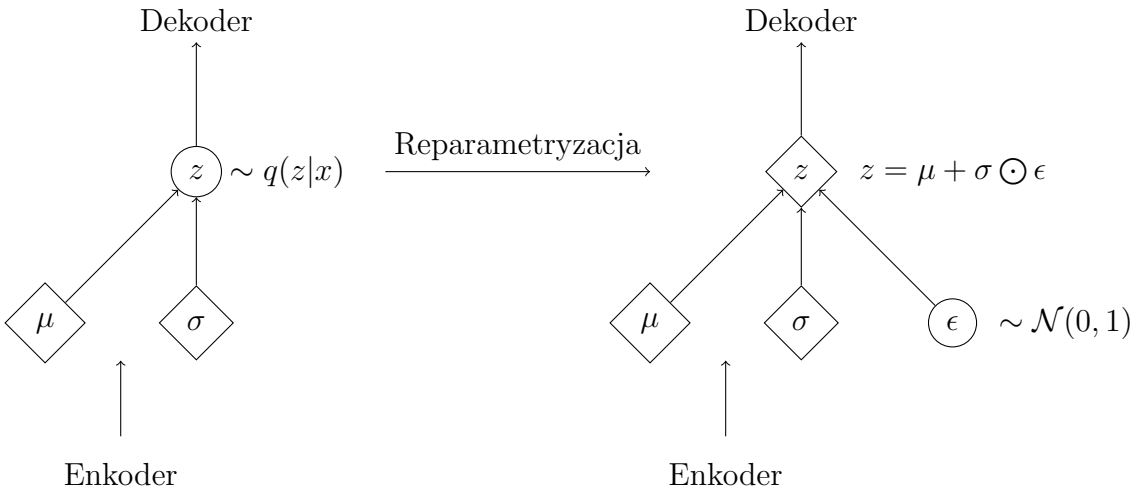
Jest to pierwsza część naszej funkcji straty.

2.4 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:

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

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.



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.[3]

Spis tabel

Spis rysunków

Bibliografia

[1] D. Bank, N. Koenigstein, and R. Giryes, “Autoencoders,” 2021.

[2] Y. LeCun and C. Cortes, “MNIST handwritten digit database,” 2010.

[3] C. Doersch, “Tutorial on variational autoencoders,” 2021.