# Прикладные задачи анализа данных

Лекция 4

Нормализационные потоки

Михаил Гущин

mhushchyn@hse.ru

НИУ ВШЭ, 2021

НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ

# План

- Повторение
- Теорема о замене переменных
- Нормализационные потоки
- Real-NVP
- MAF, IAF

# Повторение

# Генеративные модели

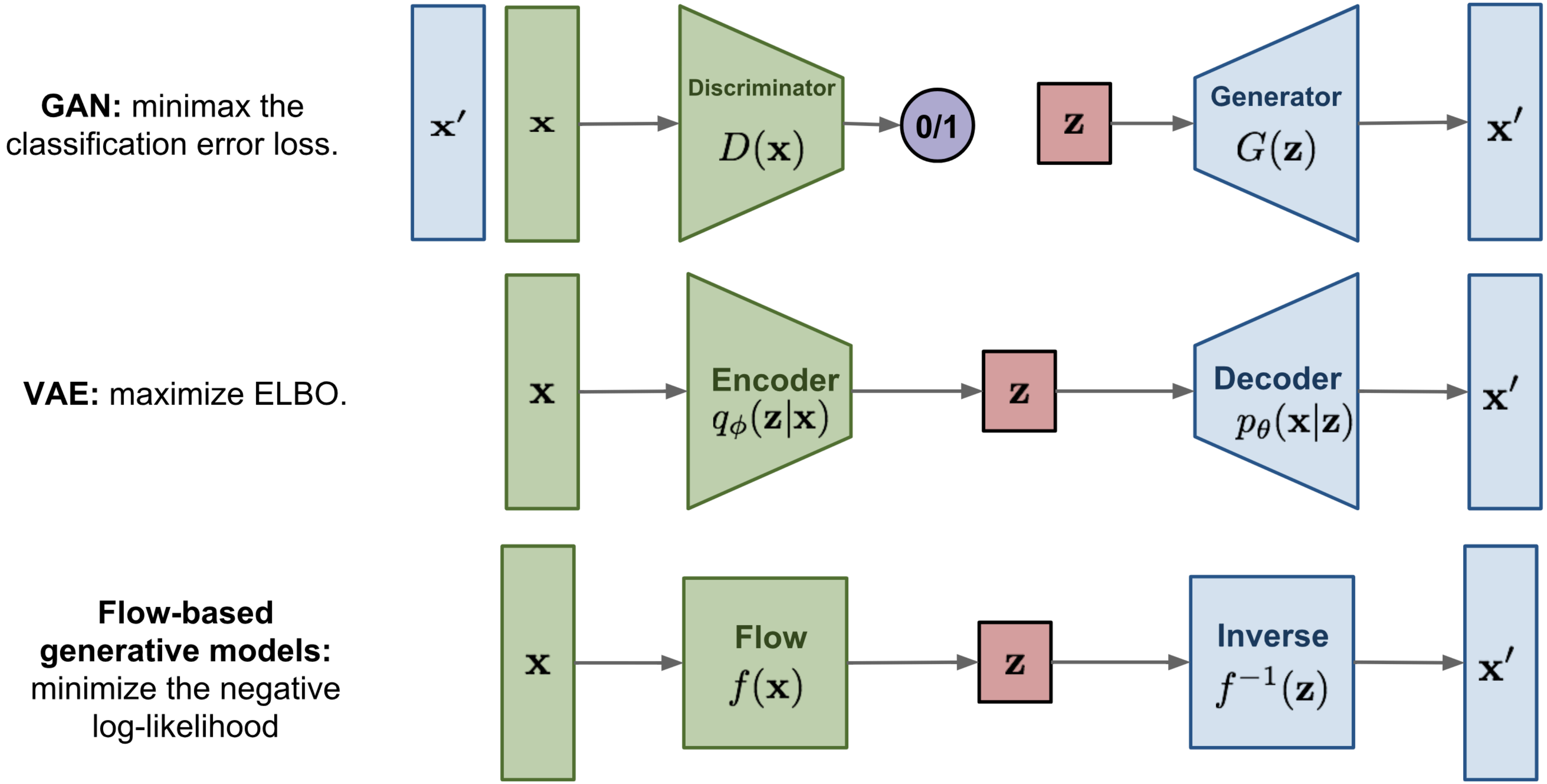


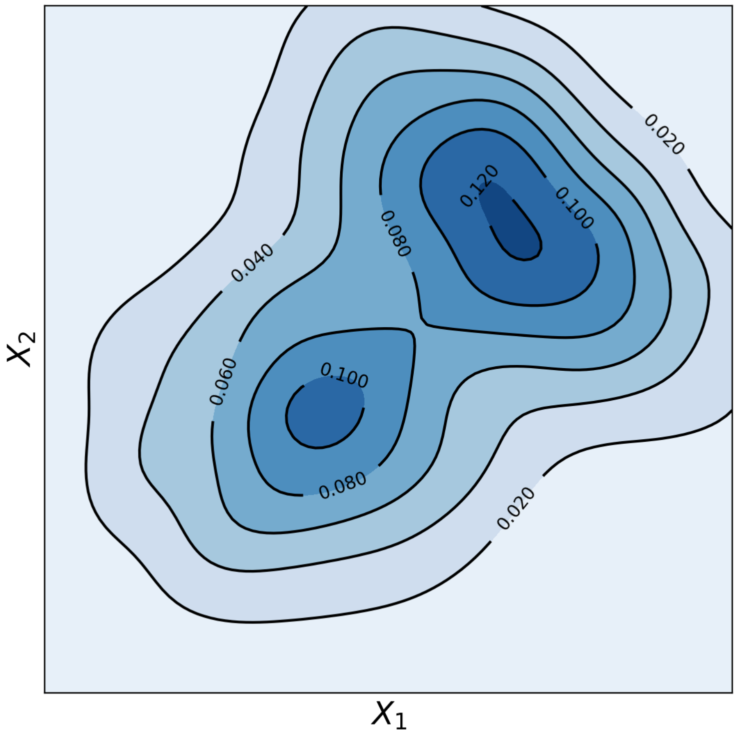

Рис.: https://lilianweng.github.io/lil-log/2018/10/13/flow-based-deep-generative-models.html

# Генеративные модели

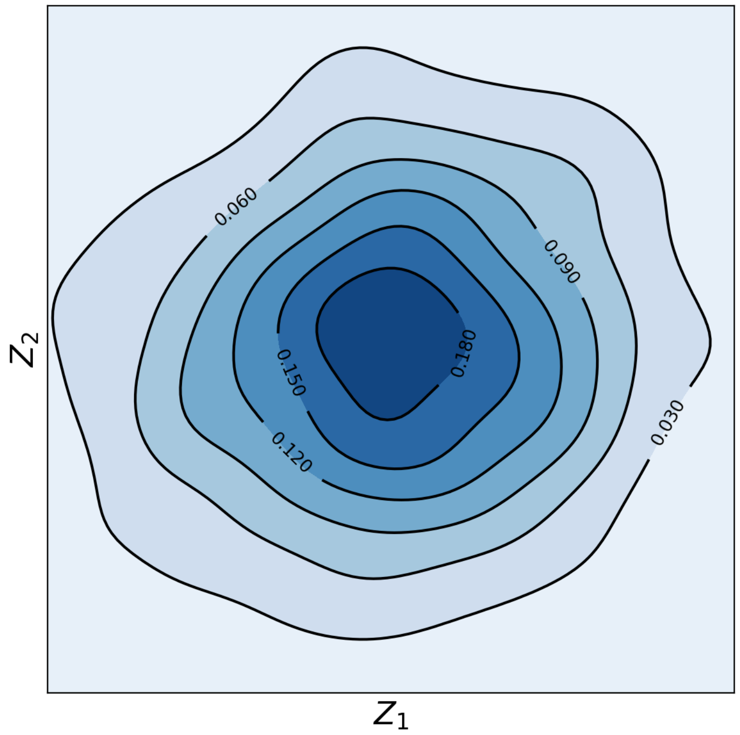
- VAE и GAN преобразуют $Z$ в $X$ необратимо.
- Для преобразования $X$ в $Z$ требуется обучать отдельную сеть **Encoder**.
- Нормализационные потоки выучивают **обратимое** преобразование $Z$ в $X$.
- Нормализационные потоки позволяют посчитать $p_x(x)$.

# Теорема о замене переменных

# Замена переменных




$$\boldsymbol{z} = \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x})$$




$x_i \sim p_x(x)$

$p_x(x)$ - ?

$z_i \sim p_z(z)$

$p_z(z)$ - известно

# Теорема о замене переменных

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

Отношение объема $\partial z$ к новому объему $\partial x$

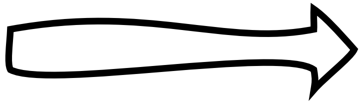
$$p_x(x_i) = \boldsymbol{p_z}\left(\boldsymbol{f}(x_i)\right)\left|\det \frac{\partial \boldsymbol{f}(x_i)}{\partial x_i}\right|,$$

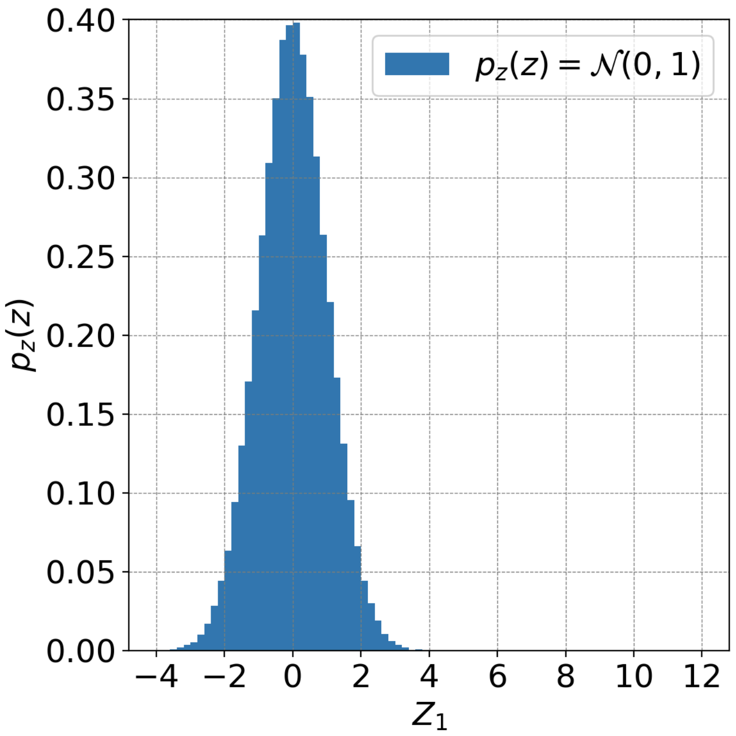
где матрица первых производных определяется так:

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

# 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 $\boldsymbol{f}(x)$:

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

Тогда, матрица первых производных:

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

И значение Якобиана:

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

# Пример 1

Формула замены пременных:

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

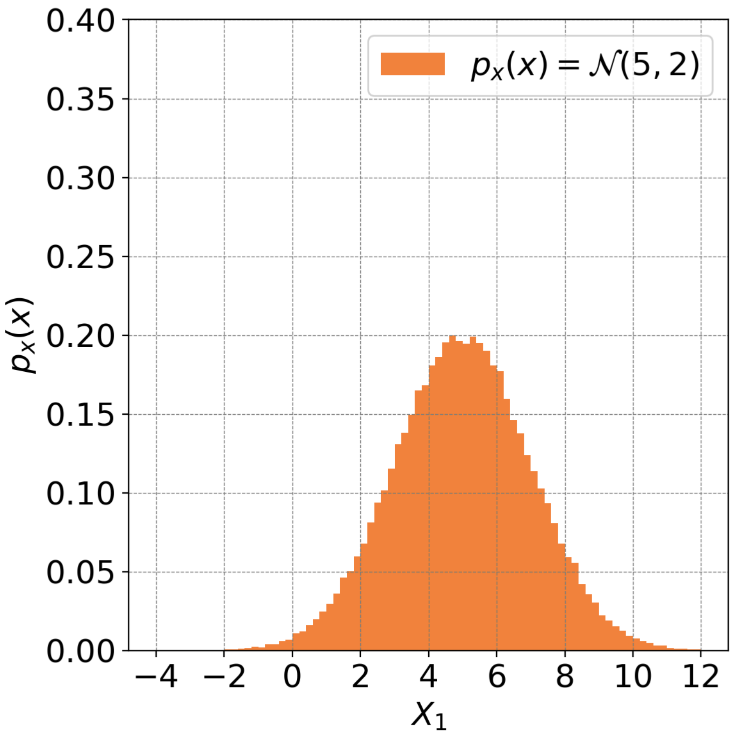
Подставим известные выражения:

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

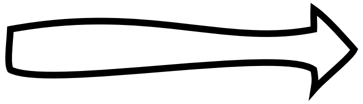
$$p_x(x_i) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{-\frac{(0.5x_i-2.5)^2}{2}} * 0.5$$

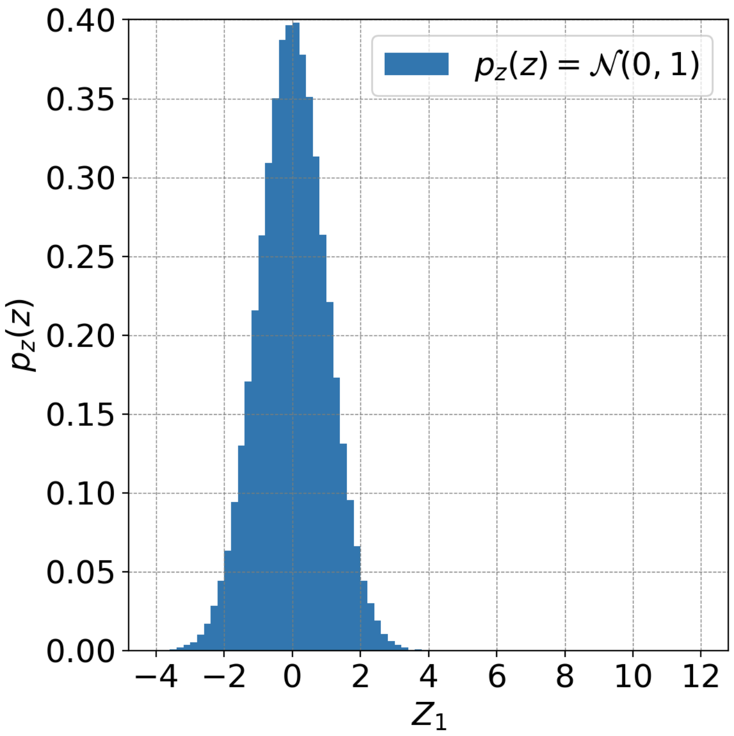
$$= \frac{1}{2\sqrt{2\pi}}e^{-\frac{(x_i-5)^2}{2*2^2}} = \mathcal{N}(5, 2)$$

# Пример 1




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





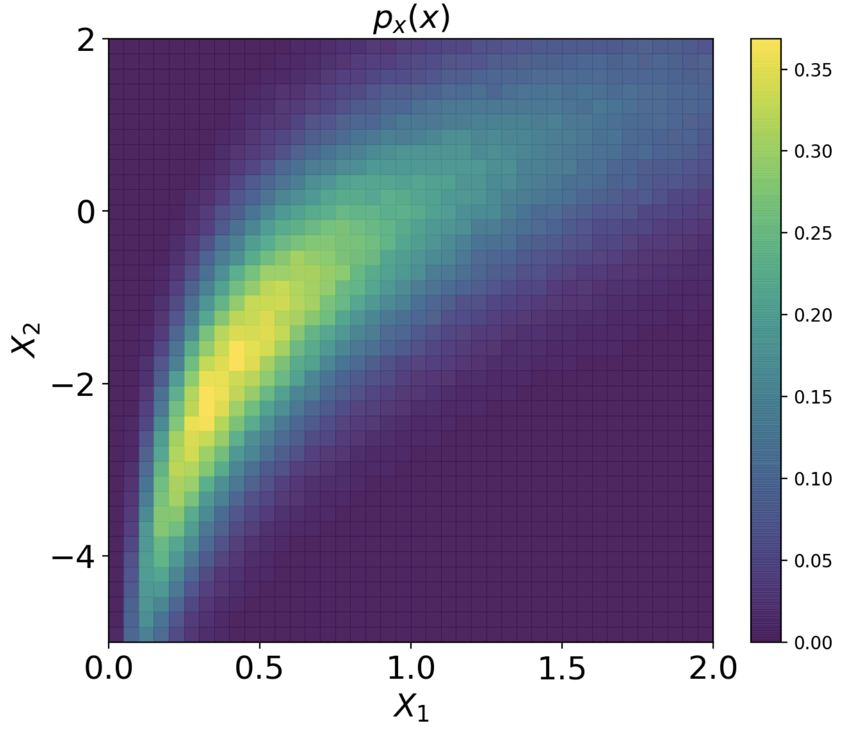

$$x_i \sim p_x(x)$$

$p_x(x)$ - ?

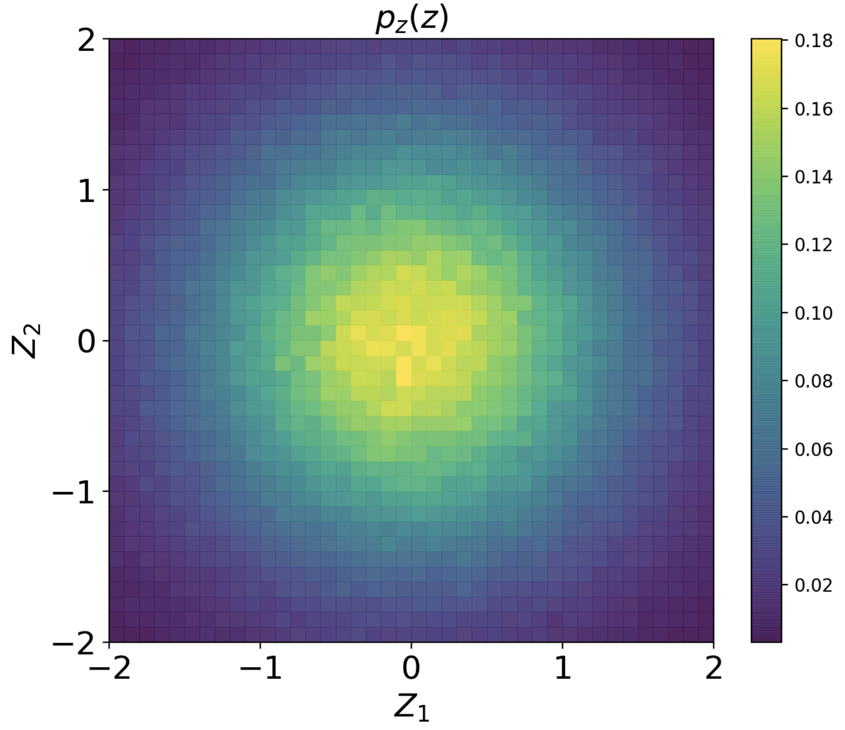
$$z_i \sim p_z(z)$$

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

# Пример 2




$$\boldsymbol{f}(x) = \begin{cases} z_{i1} = \ln x_{i1} \\ z_{i2} = x_{i2} - 2\ln x_{i1} \end{cases}$$




$$x_i \sim p_x(x)$$

$$z_i \sim p_z(z)$$

$p_x(x)$ - ?

$$p_z(z) = \frac{1}{2\pi} e^{-\frac{z_1^2 + z_2^2}{2}}$$

# Пример 2

Дана функция:

$$z = \boldsymbol{f}(x) = \begin{cases} z_{i1} = \ln x_{i1} \\ z_{i2} = x_{i2} - 2\ln x_{i1} \end{cases}$$

Тогда, матрица первых производных:

$$\frac{\partial \boldsymbol{f}(x_i)}{\partial x_i} = \begin{pmatrix} {}^{1}/_{x_{i1}} & 0 \\ {}^{-2}/_{x_{i1}} & 1 \end{pmatrix}$$

И значение Якобиана:

$$\left|\det \frac{\partial \boldsymbol{f}(x_i)}{\partial x_i}\right| = \frac{1}{x_{i1}}$$

# Пример 2

Формула замены преременных:

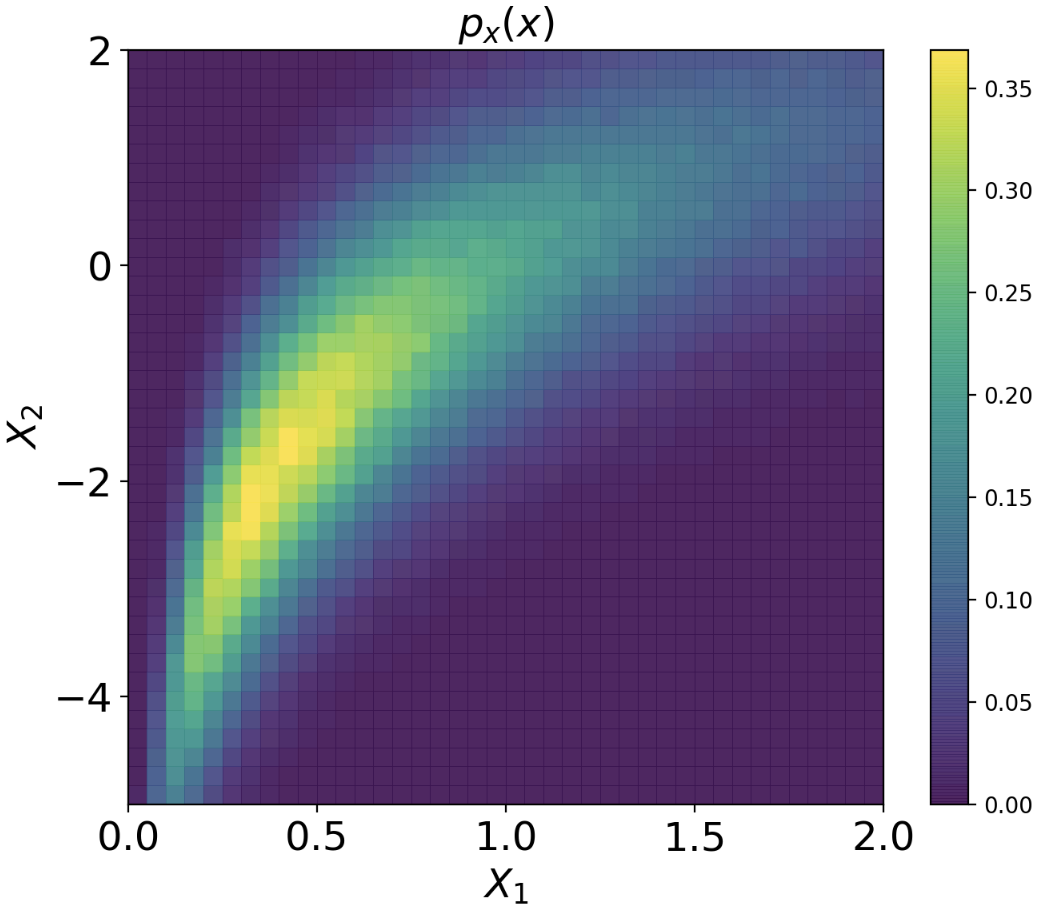
$$p_x(x_i) = \boldsymbol{p_z}(\boldsymbol{f}(x_i)) \left|\det \frac{\partial \boldsymbol{f}(x_i)}{\partial x_i}\right|,$$

Подставим известные выражения:

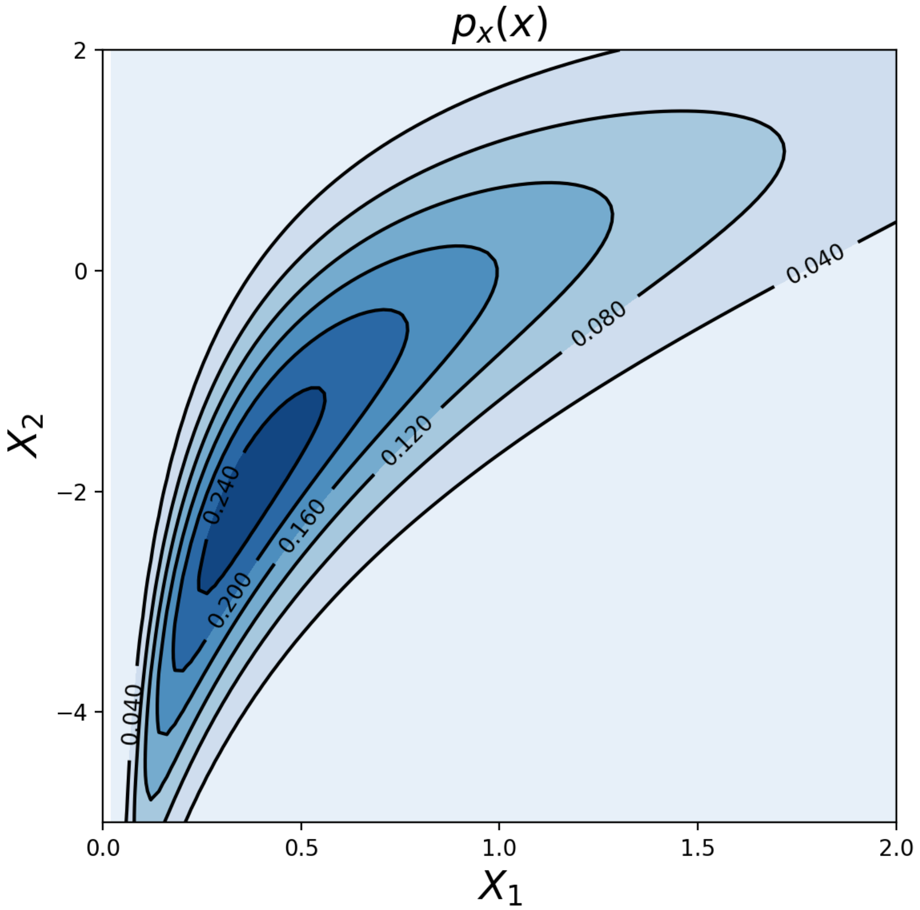
$$\boldsymbol{p_z}(z_i) = \frac{1}{2\pi} e^{-\frac{z_1^2 + z_2^2}{2}}$$

$$p_x(x_i) = \frac{1}{2\pi} e^{-\frac{(\ln x_{i1})^2 + (x_{i2} - 2\ln x_{i1})^2}{2}} * \frac{1}{x_{i1}}$$

# Пример 2




Эксперимент




Теория

# Теорема о замене переменных

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

Отношение объема $\partial z$ к новому объему $\partial x$

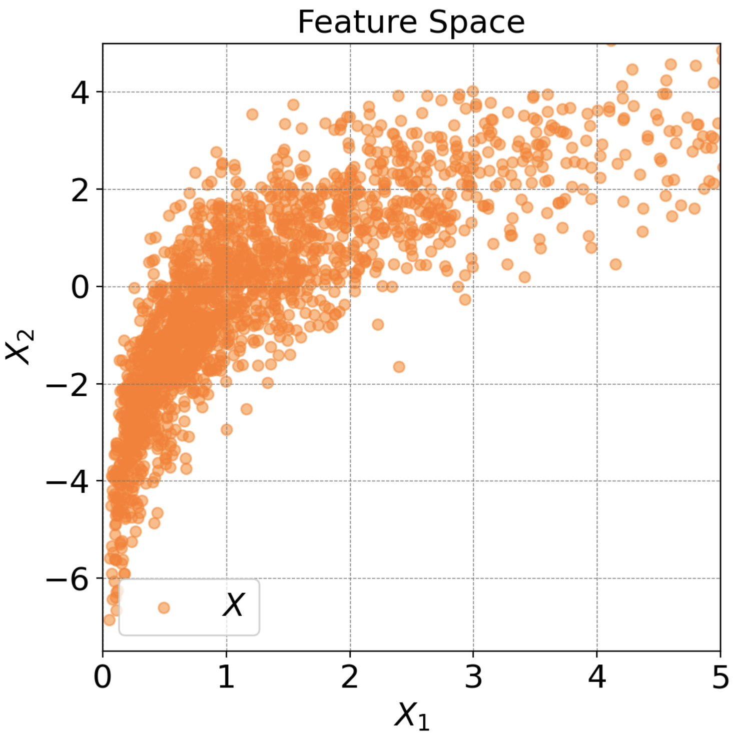
$$p_x(x_i) = \boldsymbol{p_z}\left(\boldsymbol{f}(x_i)\right)\left|\det \frac{\partial \boldsymbol{f}(x_i)}{\partial x_i}\right|,$$

Обратная замена переменных:

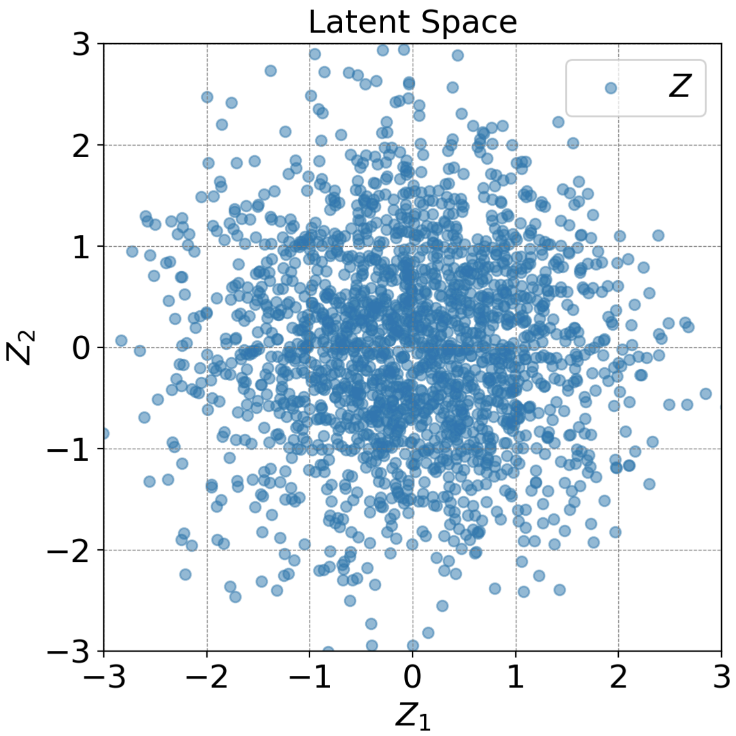
$$\boldsymbol{p_z}(z_i) = p_x\left(\boldsymbol{f}^{-1}(z_i)\right)\left|\det \frac{\partial \boldsymbol{f}^{-1}(z_i)}{\partial z_i}\right|$$

# Нормализационные потоки

# Постановка задачи




$$z = \boldsymbol{f}(x) - ?$$




$$x_i \sim p_x(x)$$

$$p_x(x) - ?$$

$$z_i \sim p_z(z)$$

$p_z(z)$ - известно

# Постановка задачи

- **Дано:** матрица реальных объектов $X$
- **Задача:** найти такую $z_i = \boldsymbol{f}(x_i)$, чтобы $z_i \sim \boldsymbol{p_z}(z)$. При этом, $\boldsymbol{p_z}(z)$ известно и задано.

# Решение

- Как будем находить $z_i = \boldsymbol{f}(x_i)$?
- **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:

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

Подставим в функцию потерь:

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

# Алгоритм

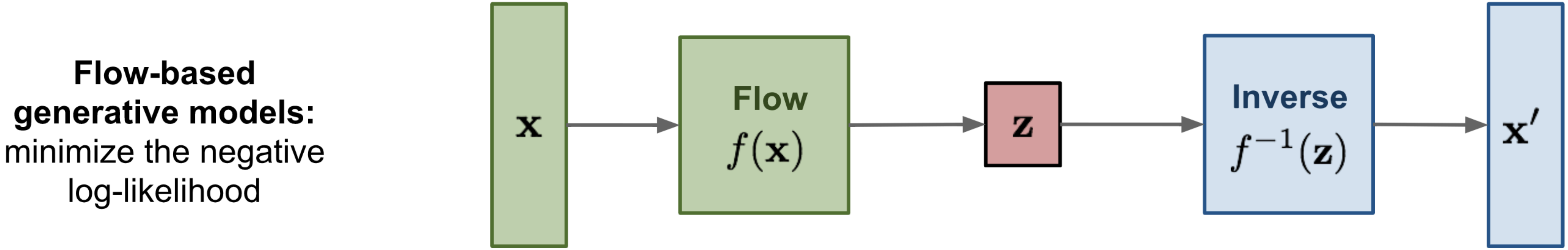



Рис.: https://lilianweng.github.io/lil-log/2018/10/13/flow-based-deep-generative-models.html

# Алгоритм обучения

**for** number of training iterations **do:**

- Sample $m$ of real objects $\{x_1, x_2, \dots, x_m\}$.
- Calculate loss function:

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

- Update parameters of the function $z_i = \boldsymbol{f}(x_i)$:

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

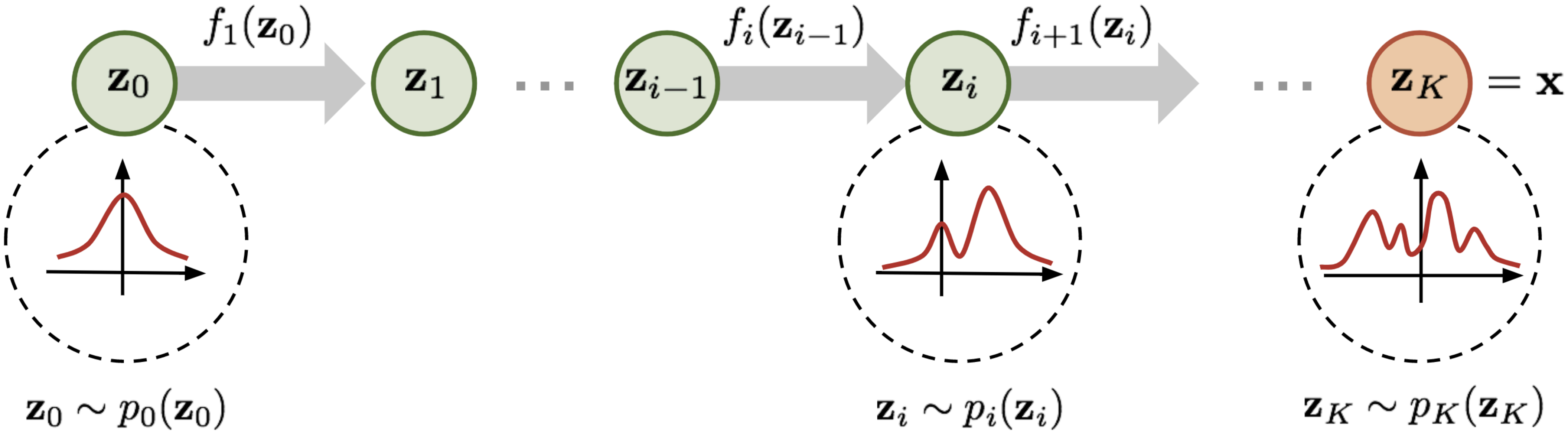
# Алгоритм генерации

- Sample $m$ of noise objects $\{z_1, z_2, \dots, z_m\}$.
- Generate new objects using the learned function:

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

# Больше слоев!

Что если несколько преобразований?




* На рисунке заменить $f_i(z_{i-1})$ на $f_i^{-1}(z_{i-1})$

# Больше слоев!

Пусть $z_i = \boldsymbol{f_2}(y_i), y_i = \boldsymbol{f_1}(x_i)$.

Тогда:

$$p_x(x_i) = \boldsymbol{p_y}\left(\boldsymbol{f_1}(x_i)\right) \left|\det \frac{\partial \boldsymbol{f}_1(x_i)}{\partial x_i}\right|$$

$$p_y(y_i) = \boldsymbol{p_z}\left(\boldsymbol{f_2}(y_i)\right) \left|\det \frac{\partial \boldsymbol{f}_2(y_i)}{\partial y_i}\right|$$

В итоге получим:

$$p_x(x_i) = \boldsymbol{p_z}\left(\boldsymbol{f}_2\left(\boldsymbol{f}_1(x_i)\right)\right) \left|\det \frac{\partial \boldsymbol{f}_2(y_i)}{\partial y_i}\right| \left|\det \frac{\partial \boldsymbol{f}_1(x_i)}{\partial x_i}\right|$$

# Выбор функции

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

- была дифференцируемой,
- была обратимой?

# Примеры: Real-NVP

# Real-NVP

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

где:

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

https://arxiv.org/abs/1605.08803

# Real-NVP

- Матрица первых производных:

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

- Значение Якобиана:

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

https://arxiv.org/abs/1605.08803

# Real-NVP

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

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

# Примеры:
# Masked Autoregressive Flow (MAF)

# Masked Autoregressive Flow (MAF)

$$z = \boldsymbol{f}(x) = \begin{cases} z_1 = (x_1 - \mu_1)\exp(-s_1) \\ z_d = (x_d - \boldsymbol{\mu_d}(x_{1:d-1})) \odot \exp(-\boldsymbol{s_d}(x_{1:d-1})) \end{cases}$$

где:

- $z_{1:d}$ - первые $d$ компонент вектора $z$;
- $\boldsymbol{\mu_d}(x_{1:d-1})$ и $\boldsymbol{s_d}(x_{1:d-1})$ – **нейронные сети** с $d-1$ входами и 1 выходом;
- $\odot$ - поэлементное умножение.

https://arxiv.org/abs/1705.07057

# Masked Autoregressive Flow (MAF)

- Матрица первых производных **нижнетреугольная**:

$$\frac{\partial \boldsymbol{f}(x)}{\partial x} = \begin{pmatrix} \exp(-\boldsymbol{s}_1) & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial z_D}{\partial x_1} & \cdots & \exp(-\boldsymbol{s}_D(x_{1:D-1})) \end{pmatrix}$$

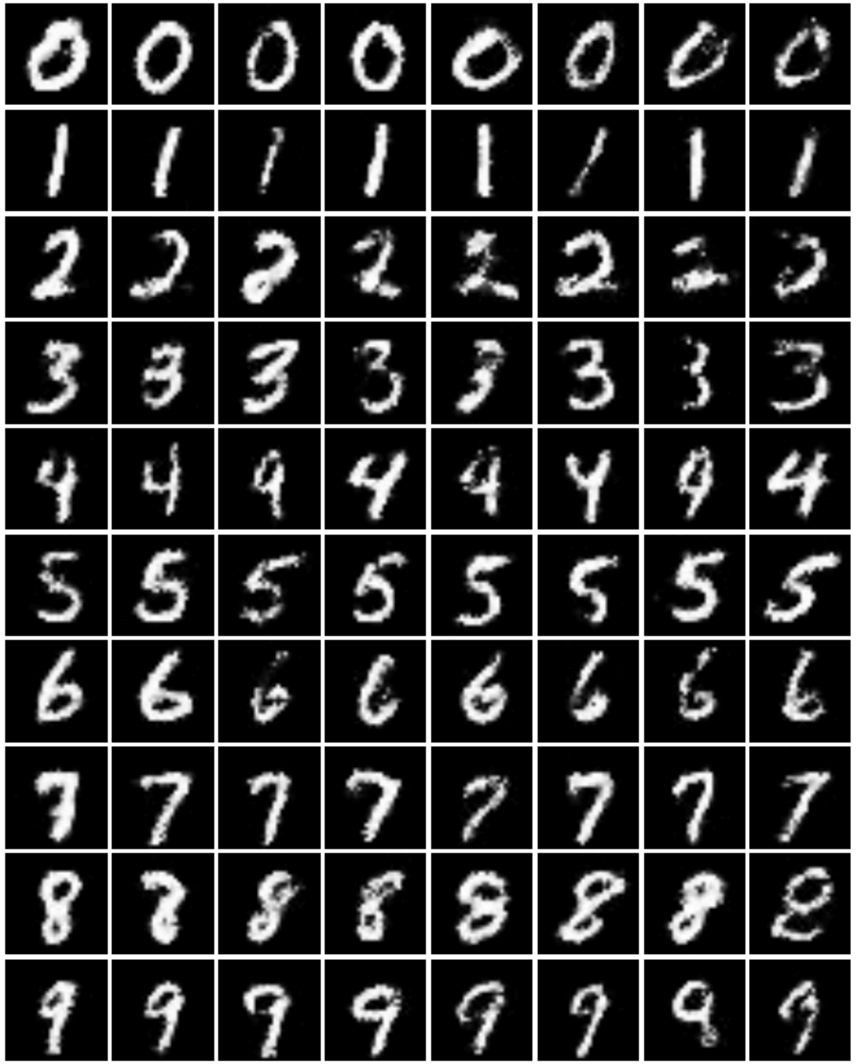
- Значение Якобиана:

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

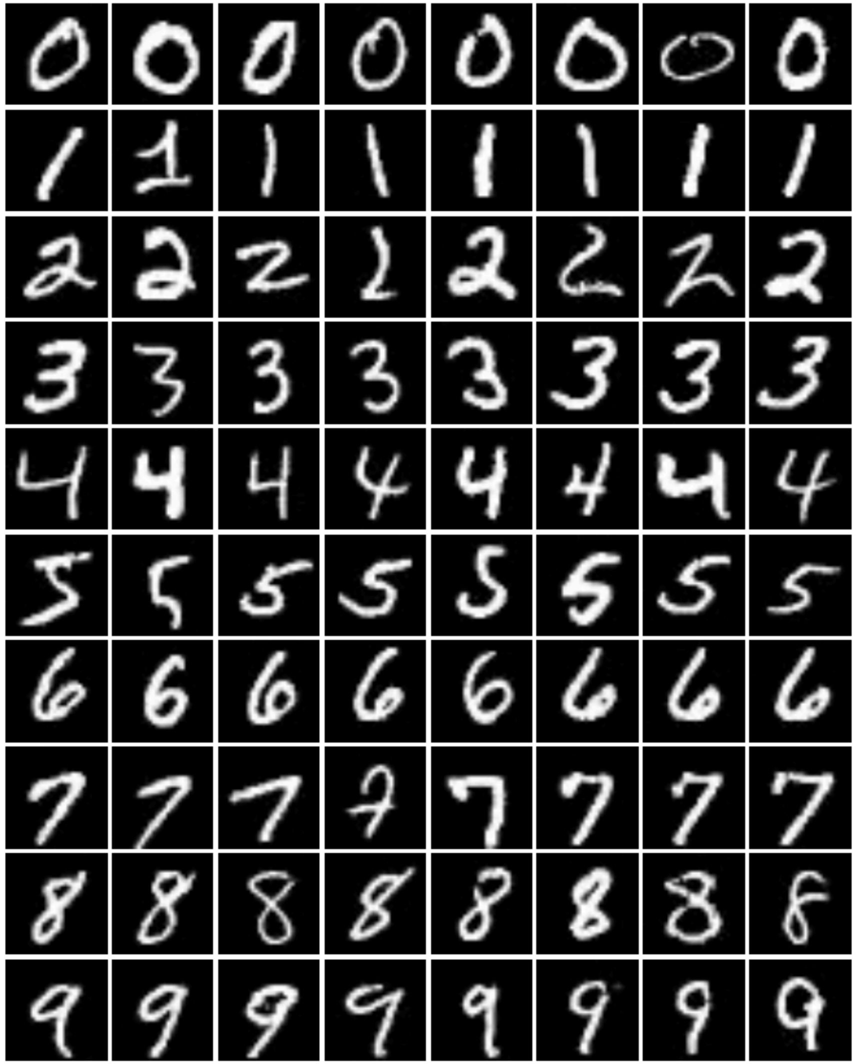
# Masked Autoregressive Flow (MAF)

$$x = \boldsymbol{f}^{-1}(z) = \begin{cases} x_1 = z_1 \exp(s_1) + \mu_1 \\ x_d = z_d \exp(\boldsymbol{s_d}(x_{1:d-1})) + \boldsymbol{\mu_d}(x_{1:d-1}) \end{cases}$$

# Пример



(a) Generated images



(b) Real images

# Примеры:
# Inverse Autoregressive Flow (IAF)

# Inverse Autoregressive Flow (IAF)

$$z = \boldsymbol{f}(x) = \begin{cases} z_1 = (x_1 - \mu_1)\exp(-s_1) \\ \quad z_d = (x_d - \boldsymbol{\mu_d}(z_{1:d-1}))\exp(-\boldsymbol{s_d}(z_{1:d-1})) \end{cases}$$

$$x = \boldsymbol{f}^{-1}(z) = \begin{cases} x_1 = z_1 \exp(s_1) + \mu_1 \\ x_d = z_d \exp(\boldsymbol{s_d}(z_{1:d-1})) + \boldsymbol{\mu_d}(z_{1:d-1}) \end{cases}$$

https://arxiv.org/abs/1606.04934

# Заключение

# Заключение

- Теорема о замене переменных
- Нормализационные потоки
  - Real-MVP
  - MAF, IAF