

Auto-encoders y variational auto-encoders

Auto-encoders y variational auto-encoders

Introducción

Introducción

Aprendizaje no supervisado

Hasta ahora hemos estado hablando siempre de **aprendizaje profundo supervisado**, pero también podemos resolver problemas **no supervisados**.

Objetivo:

- Extraer patrones directamente de los datos “sin etiquetar”, solo tenemos x y no y .

Tareas comunes:

- Modelos generativos: Entender la distribución de x y generar nuevas muestras.
- Autoencoders: “Comprimir” x proyectándolo en un espacio de menor dimensión.

Introducción

Aprendizaje no supervisado



*The brain has about 10^{14} synapses and we only live for about 10^9 seconds. So we have a lot more parameters than data. This motivates the idea that we must do a lot of **unsupervised learning** since the perceptual input (including proprioception) is the only place we can get 10^5 dimensions of constraint per second.*

Geoffrey Hinton, 2014

Introducción

Aprendizaje no supervisado



We need tremendous amount of information to build machines that have common sense and generalize.

Yann LeCun, 2016

■ "Pure" Reinforcement Learning (cherry)

- ▶ The machine predicts a scalar reward given once in a while.
- ▶ **A few bits for some samples**



■ Supervised Learning (icing)

- ▶ The machine predicts a category or a few numbers for each input
- ▶ Predicting human-supplied data
- ▶ **10→10,000 bits per sample**

■ Unsupervised/Predictive Learning (cake)

- ▶ The machine predicts any part of its input for any observed part.
- ▶ Predicts future frames in videos
- ▶ **Millions of bits per sample**

■ (Yes, I know, this picture is slightly offensive to RL folks. But I'll make it up)

Introducción

Modelos generativos

Un **modelo generativo** es un modelo probabilístico p que puede ser utilizado como un “simulador de datos”.

Su propósito es generar datos sintéticos pero realistas de alta dimensión

$$\mathbf{x} \sim p_{\theta}(\mathbf{x}),$$

que se asemejen lo más posible a la distribución desconocida de datos $p(\mathbf{x})$.

Introducción

Modelos generativos



Ley de Moore de los modelos generativos de imágenes

Introducción

Modelos generativos

Algunas aplicaciones:

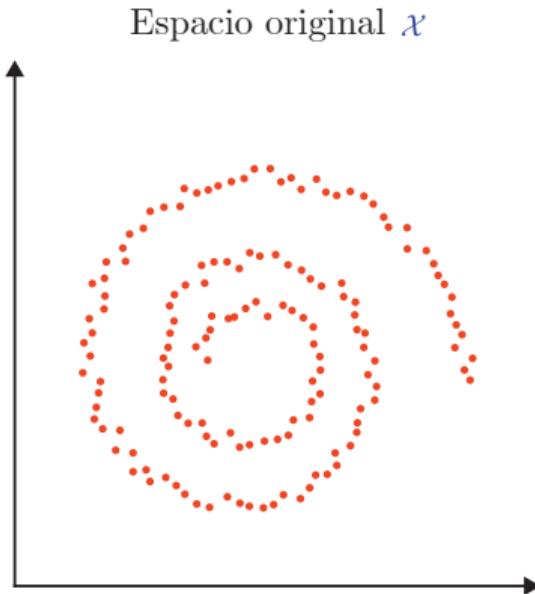


Los modelos generativos tienen un rol muy importante en muchos problemas actuales

Auto-encoders y variational auto-encoders

Auto-encoders

Auto-encoders



Auto-encoders



Auto-encoders



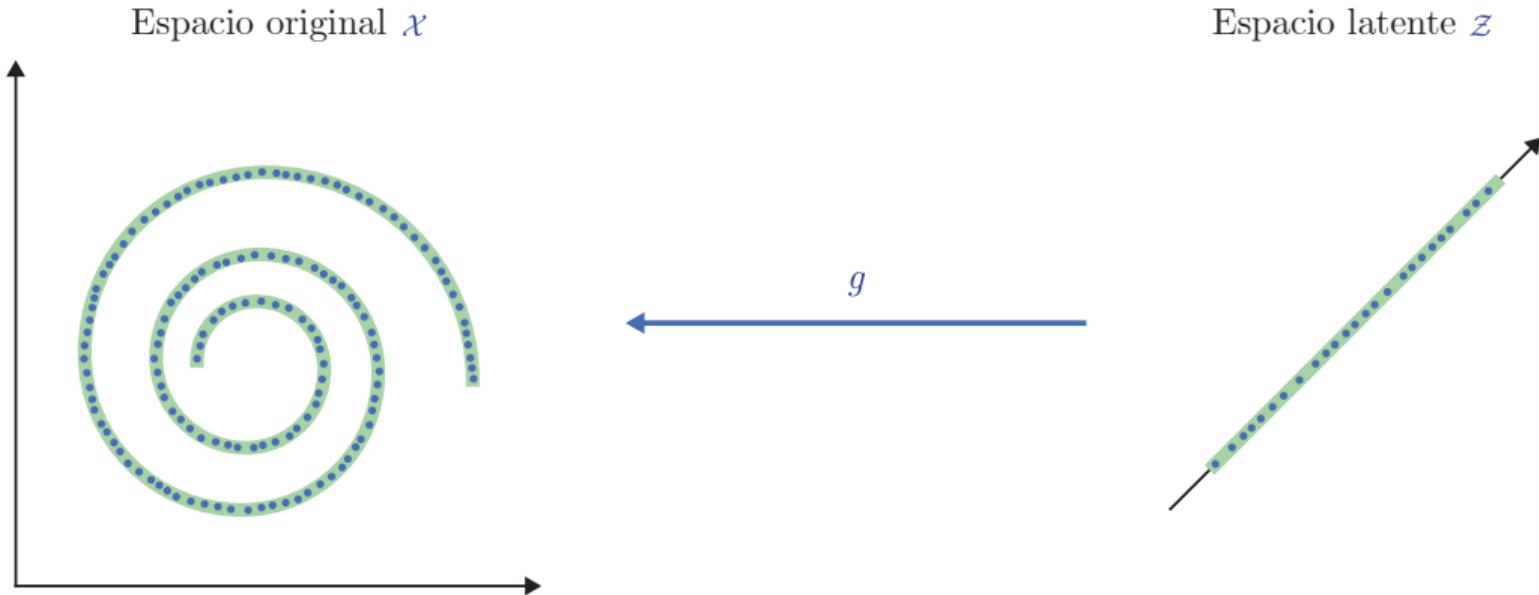
Auto-encoders



Auto-encoders

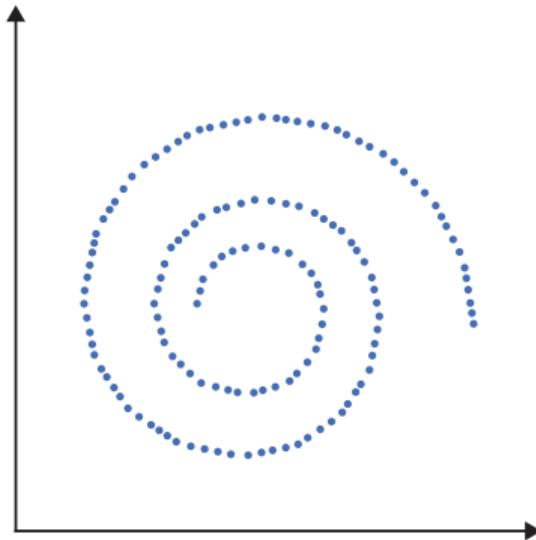


Auto-encoders



Auto-encoders

Espacio original \mathcal{X}

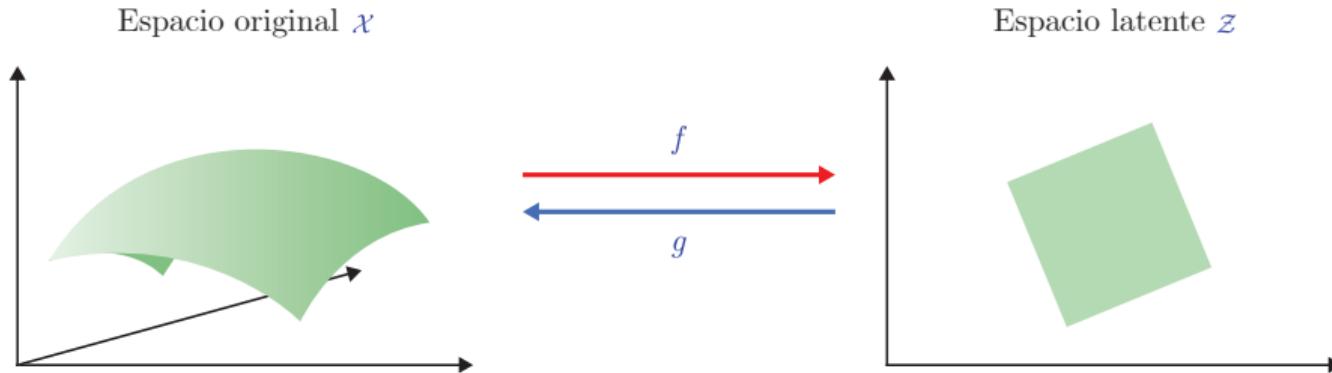


Auto-encoders

Un **auto-encoder** es una función compuesta a partir de:

- Un **encoder** f que proyecta del espacio original \mathcal{X} al espacio latente \mathcal{Z} .
- Un **decoder** g que proyecta de vuelta al espacio original.

El objetivo es que $g \circ f$, es decir, que la composición de funciones se aproxime lo máximo posible a los datos originales o función identidad.



Auto-encoders

Siendo $p(\mathbf{x})$ la distribución de los datos en \mathcal{X} , un buen auto-encoder puede caracterizarse con la *reconstruction loss*:

$$\mathbb{E}_{\mathbf{x} \sim p(\mathbf{x})} [||\mathbf{x} - g \circ f(\mathbf{x})||^2] \approx 0.$$

Esta función de pérdida mide como de bien el auto-encoder puede reconstruir los datos originales.

Dadas dos funciones de proyección con parámetros $f(\cdot; \theta_f)$ and $g(\cdot; \theta_g)$, el entrenamiento consiste aprender los parámetros que minimicen dicha loss:

$$\theta_f, \theta_g = \arg \min_{\theta_f, \theta_g} \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N ||\mathbf{x}_i - g(f(\mathbf{x}_i, \theta_f), \theta_g)||^2.$$

Auto-encoders

Ejemplo

Imaginemos, por ejemplo, un auto-encoder lineal con

$$f : \mathbf{z} = \mathbf{U}^T \mathbf{x}$$

$$g : \hat{\mathbf{x}} = \mathbf{U}\mathbf{z},$$

con $\mathbf{U} \in \mathbb{R}^{p \times d}$, el *reconstruction loss* se reduce a

$$\mathbb{E}_{\mathbf{x} \sim p(\mathbf{x})} \left[\|\mathbf{x} - \mathbf{U}\mathbf{U}^T \mathbf{x}\|^2 \right].$$

Auto-encoders y variational auto-encoders

Deep Auto-encoders

Deep Auto-encoders

Mayor profundidad

Para obtener mejores resultados, en vez de proyecciones lineales se suelen utilizar redes neuronales profundas en f y g .

Algunos ejemplos:

- Combinando un MLP encoder $f : \mathbb{R}^p \rightarrow \mathbb{R}^d$ con un MLP decoder $g : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^p$.
- Combinando un convolutional network encoder $f : \mathbb{R}^{w \times h \times c} \rightarrow \mathbb{R}^d$ con un decoder decoder $g : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^{w \times h \times c}$ compuesto de capas convolucionales reciprocas.



Deep Auto-encoders

Ejemplo MNIST

Datos originales \mathbf{x} con $d = 784$.

7 2 1 0 4 1 4 9 5 9 0 6
9 0 1 5 9 7 3 4 9 6 6 5
4 0 7 4 0 1 3 1 3 4 7 2

Resultado de auto-encoder $g \circ f$ creado a partir de CNN con $d = 2$.

7 2 1 0 9 1 9 9 8 9 0 6
9 0 1 5 9 7 5 9 9 6 6 5
9 0 7 9 0 1 5 1 5 9 7 2

Resultado de auto-encoder $g \circ f$ creado a partir de PCA con $d = 2$.

9 3 1 0 9 1 9 9 0 9 0 0
9 0 1 3 9 9 3 9 9 0 9 0
9 0 9 9 0 1 3 1 3 0 9 0

Deep Auto-encoders

Ejemplo MNIST

Datos originales \mathbf{x} con $d = 784$.

7 2 1 0 4 1 4 9 5 9 0 6
9 0 1 5 9 7 3 4 9 6 6 5
4 0 7 4 0 1 3 1 3 4 7 2

Resultado de auto-encoder $g \circ f$ creado a partir de CNN con $d = 4$.

7 2 1 0 4 1 4 9 9 9 0 6
9 0 1 5 9 7 3 4 9 6 6 5
4 0 7 4 0 1 3 1 3 0 7 2

Resultado de auto-encoder $g \circ f$ creado a partir de PCA con $d = 4$.

9 2 1 0 9 1 9 9 0 9 0 0
9 0 1 3 9 9 3 9 9 0 6 5
9 0 9 9 0 1 3 1 3 0 9 0

Deep Auto-encoders

Ejemplo MNIST

Datos originales \mathbf{x} con $d = 784$.

7 2 1 0 4 1 4 9 5 9 0 6
9 0 1 5 9 7 3 4 9 6 6 5
4 0 7 4 0 1 3 1 3 4 7 2

Resultado de auto-encoder $g \circ f$ creado a partir de CNN con $d = 8$.

7 2 1 0 4 1 4 9 5 9 0 6
9 0 1 5 9 7 3 4 9 6 6 5
4 0 7 4 0 1 3 1 3 4 7 2

Resultado de auto-encoder $g \circ f$ creado a partir de PCA con $d = 8$.

7 3 1 0 4 1 9 9 0 7 0 0
9 0 1 0 9 7 3 4 9 6 0 5
4 0 7 4 0 1 3 1 3 4 7 0

Deep Auto-encoders

Ejemplo MNIST

Datos originales \mathbf{x} con $d = 784$.

7 2 1 0 4 1 4 9 5 9 0 6
9 0 1 5 9 7 8 4 9 6 6 5
4 0 7 4 0 1 3 1 3 4 7 2

Resultado de auto-encoder $g \circ f$ creado a partir de CNN con $d = 16$.

7 2 1 0 4 1 4 9 5 9 0 6
9 0 1 5 9 7 8 4 9 6 6 5
4 0 7 4 0 1 3 1 3 4 7 2

Resultado de auto-encoder $g \circ f$ creado a partir de PCA con $d = 16$.

7 2 1 0 9 1 4 9 6 9 0 6
9 0 1 5 9 7 8 4 9 6 6 5
4 0 7 4 0 1 3 1 3 4 7 2

Deep Auto-encoders

Ejemplo MNIST

Datos originales \mathbf{x} con $d = 784$.

7 2 1 0 4 1 4 9 5 9 0 6
9 0 1 5 9 7 8 4 9 6 6 5
4 0 7 4 0 1 3 1 3 4 7 2

Resultado de auto-encoder $g \circ f$ creado a partir de CNN con $d = 32$.

7 2 1 0 4 1 4 9 5 9 0 6
9 0 1 5 9 7 8 4 9 6 6 5
4 0 7 4 0 1 3 1 3 4 7 2

Resultado de auto-encoder $g \circ f$ creado a partir de PCA con $d = 32$.

7 2 1 0 4 1 4 9 5 9 0 6
9 0 1 5 9 7 8 4 9 6 6 5
4 0 7 4 0 1 3 1 3 4 7 2

Deep Auto-encoders

Interpolación

Interpolación de puntos

Para comprender la representación latente aprendida, podemos elegir dos muestras x y x' al azar e interpolar muestras a lo largo de la línea en el espacio latente.



Deep Auto-encoders

Interpolación

Interpolación de puntos

Para comprender la representación latente aprendida, podemos elegir dos muestras \mathbf{x} y \mathbf{x}' al azar e interpolar muestras a lo largo de la línea en el espacio latente.



Deep Auto-encoders

Interpolación

Interpolación de puntos

Para comprender la representación latente aprendida, podemos elegir dos muestras \mathbf{x} y \mathbf{x}' al azar e interpolar muestras a lo largo de la línea en el espacio latente.



Deep Auto-encoders

Interpolación

Interpolación de puntos

Para comprender la representación latente aprendida, podemos elegir dos muestras \mathbf{x} y \mathbf{x}' al azar e interpolar muestras a lo largo de la línea en el espacio latente.



Deep Auto-encoders

Interpolación

Interpolación de PCA ($d = 32$).



Deep Auto-encoders

Interpolación

Interpolación de Auto-encoder ($d = 32$).

5 5 5 5 5 5 5 5 5 5 6 6 6 6 6 6

8 8 8 8 8 8 8 8 8 9 9 9 9 9 9 9

6 6 6 6 6 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0

6 6 6 6 6 6 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4

3 3 3 3 3 3 3 7 7 7 7 7 7 7 7 7

2 2 2 2 2 2 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3

Deep Auto-encoders

Generación

Generar nuevos datos

Además de generar valores intermedios entre dos datos existentes, también podemos utilizar el decoder para obtener la representación en \mathcal{X} de valores desconocidos en \mathcal{Z} .

Se introduce un modelo de densidad q en \mathcal{Z} y se utiliza g para mapear en \mathcal{X} .



Deep Auto-encoders

Generación

Generar nuevos datos

Además de generar valores intermedios entre dos datos existentes, también podemos utilizar el decoder para obtener la representación en \mathcal{X} de valores desconocidos en \mathcal{Z} .

Se introduce un modelo de densidad q en \mathcal{Z} y se utiliza g para mapear en \mathcal{X} .



Deep Auto-encoders

Generación

Generar nuevos datos

Además de generar valores intermedios entre dos datos existentes, también podemos utilizar el decoder para obtener la representación en \mathcal{X} de valores desconocidos en \mathcal{Z} .

Se introduce un modelo de densidad q en \mathcal{Z} y se utiliza g para mapear en \mathcal{X} .



Deep Auto-encoders

Generación

Generar nuevos datos

Además de generar valores intermedios entre dos datos existentes, también podemos utilizar el decoder para obtener la representación en \mathcal{X} de valores desconocidos en \mathcal{Z} .

Se introduce un modelo de densidad q en \mathcal{Z} y se utiliza g para mapear en \mathcal{X} .



Deep Auto-encoders

Generación

Generar nuevos datos

Además de generar valores intermedios entre dos datos existentes, también podemos utilizar el decoder para obtener la representación en \mathcal{X} de valores desconocidos en \mathcal{Z} .

Se introduce un modelo de densidad q en \mathcal{Z} y se utiliza g para mapear en \mathcal{X} .



Deep Auto-encoders

Generación

Por ejemplo, si utilizamos una distribución gaussiana $q(\mathbf{z}) = \mathcal{N}(\hat{\mu}, \hat{\Sigma})$, donde $\hat{\mu}$ y $\hat{\Sigma}$ se estiman a partir de los datos de entrenamiento:

Generación de datos con auto-encoder ($d = 16$).

Three rows of handwritten digits generated by a 16-dimensional auto-encoder. The digits are somewhat blurry and lack fine detail.

Row 1: 4 8 8 3 2 7 3 4 3 6 5 3
Row 2: 0 9 3 4 8 5 8 5 3 1 6
Row 3: 3 5 8 4 9 2 3 4 8 3 3 3

Generación de datos con auto-encoder ($d = 32$).

Three rows of handwritten digits generated by a 32-dimensional auto-encoder. These digits appear more distinct and closer to the original training data than those from the 16-dimensional model.

Row 1: 2 7 3 5 8 4 7 8 4 5 3 8 3
Row 2: 4 5 8 2 0 4 9 3 2 8 8 7
Row 3: 1 4 5 3 6 2 4 7 5 3 6 3 8

Los resultados son malos porque la distribución seleccionada es **simple e inadecuada**.

Auto-encoders y variational auto-encoders

Denoising Auto-encoders

Denoising Auto-encoders

Eliminar ruido

Además de la ya mencionada reducción de dimensión, los auto-encoders también son capaces de **restaurar datos dañados o con ruido**.

En este caso particular podemos ignorar la estructura encoder/decoder, lo que nos dejaría con:

$$h : \mathcal{X} \rightarrow \mathcal{X}$$

Esta expresión hace referencia a un **denoising auto-encoder**.

El objetivo es optimizar h de tal forma que, cualquier perturbación $\tilde{\mathbf{x}}$ de la señal \mathbf{x} sea restaurada a \mathbf{x} de nuevo, por tanto

$$h(\tilde{\mathbf{x}}) \approx \mathbf{x}.$$

Denoising Auto-encoders

Ejemplo 2D

Podemos ilustrar este comportamiento con datos en 2D, añadiendo ruido Gaussiano y utilizando la MSE:

$$\hat{\theta} = \underset{\theta}{\operatorname{argmin}} \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \|x_n - h(x_n + \epsilon_n; \theta)\|^2$$

donde x_n son los datos originales y ϵ_n el ruido Gaussiano.

Denoising Auto-encoders

Ejemplo 2D



Conjunto de datos original \mathbf{x} .

Denoising Auto-encoders

Ejemplo 2D



Datos con ruido adicional $\tilde{x} = x + \epsilon$.

Denoising Auto-encoders

Ejemplo 2D



Distribución aprendida por el denoising auto-encoder.

Denoising Auto-encoders

Ejemplo 2D



Denoising Auto-encoders

Ejemplo 2D



Resultado $h(\tilde{x})$ del decoder.

Denoising Auto-encoders

Ejemplo MNIST

Podemos hacer lo mismo con datos más complejos, por ejemplo el conjunto MNIST.

Cuando trabajamos con imágenes, los tipos de *ruido* que podemos aplicar son más variados.

Original



Eliminar pixels



Desenfoque



Máscara de bloqueo



Denoising Auto-encoders

Ejemplo MNIST

Datos originales.

7 2 1 0 4 1 4 9 5 9 0 6
9 0 1 5 9 7 8 4 9 6 6 5
4 0 7 4 0 1 3 1 3 4 7 2

Datos con el 50% de los pixels eliminados.

7 2 1 0 4 1 4 9 5 9 0 6
9 0 1 5 9 7 8 4 9 6 6 5
4 0 7 4 0 1 3 1 3 4 7 2

Datos reconstruidos.

7 2 1 0 4 1 4 9 5 9 0 6
9 0 1 5 9 7 8 4 9 6 6 5
4 0 7 4 0 1 3 1 3 4 7 2

Denoising Auto-encoders

Ejemplo MNIST

Datos originales.

7 2 1 0 4 1 4 9 5 9 0 6
9 0 1 5 9 7 8 4 9 6 4 5
4 0 7 4 0 1 3 1 3 4 7 2

Datos con el 90% de los pixels eliminados.

7 3 1 0 4 1 4 9 4 9 0 6
9 0 1 5 9 7 8 4 9 6 4 5
4 0 7 4 0 1 3 1 3 4 7 2

Datos reconstruidos.

7 3 1 0 4 1 4 9 4 9 0 6
9 0 1 5 9 7 8 4 9 6 4 5
4 0 7 4 0 1 3 1 3 4 7 2

Denoising Auto-encoders

Ejemplo MNIST

Datos originales.

7 2 1 0 4 1 4 9 5 9 0 6
9 0 1 5 9 7 8 4 9 6 6 5
4 0 7 4 0 1 3 1 3 4 7 2

Datos con desenfoque ($\sigma = 4$).

7 2 1 0 4 1 4 9 5 9 0 6
9 0 1 5 9 7 8 4 9 6 6 5
4 0 7 4 0 1 3 1 3 4 7 2

Datos reconstruidos.

7 2 1 0 4 1 4 9 5 9 0 6
9 0 1 5 9 7 8 4 9 6 6 5
4 0 7 4 0 1 3 1 3 4 7 2

Denoising Auto-encoders

Ejemplo MNIST

Datos originales.

7 2 1 0 4 1 4 9 5 9 0 6
9 0 1 5 9 7 8 4 9 6 6 5
4 0 7 4 0 1 3 1 3 4 7 2

Datos con máscara de bloqueo de tamaño 16×16 pixels.



Datos reconstruidos.

7 2 1 0 4 1 4 9 6 7 0 6
9 0 1 5 9 7 8 4 9 6 6 5
4 0 7 4 3 1 3 1 3 4 7 2

Denoising Auto-encoders

Ejemplo MNIST

Multiples soluciones

La distribución previa $p(\mathbf{x}|\tilde{\mathbf{x}})$ (probabilidad de obtener \mathbf{x} dado $\tilde{\mathbf{x}}$), **puede ser multimodal**, es decir, puede tener **múltiples soluciones posibles**.

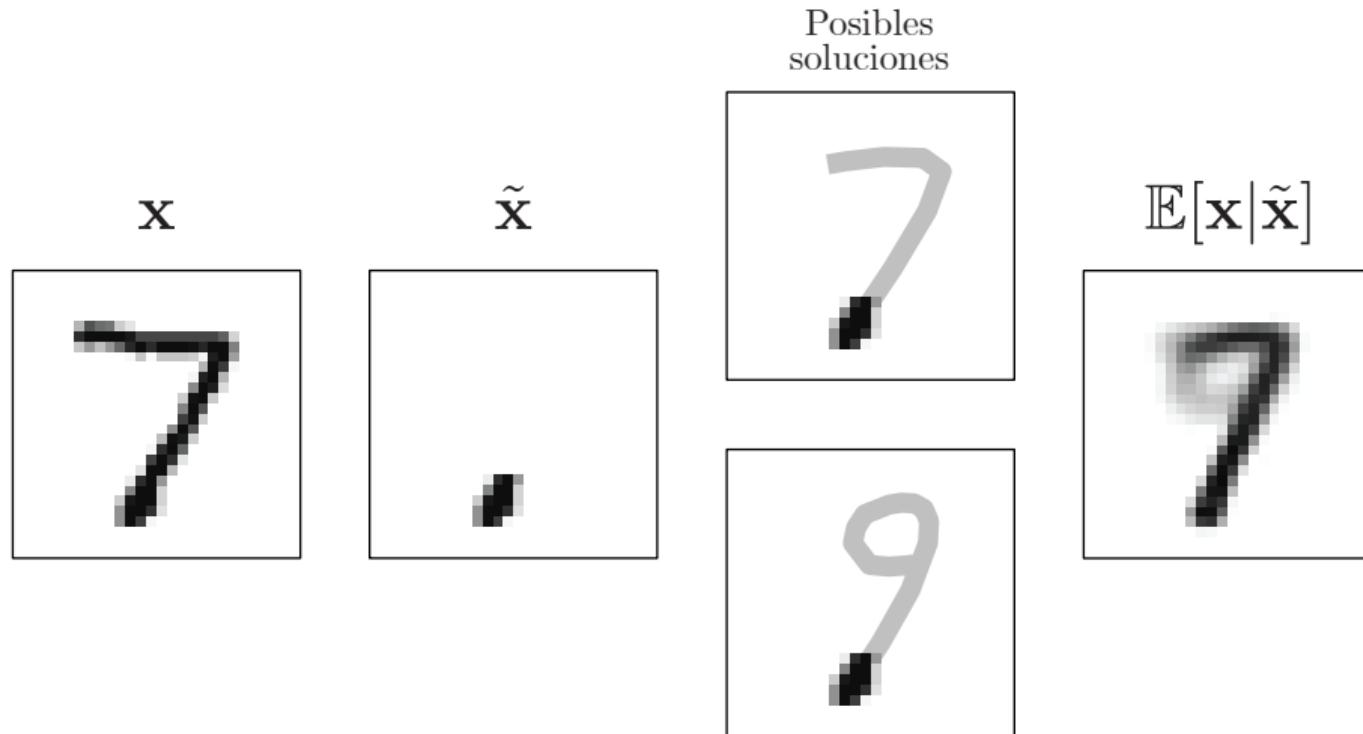
Si entrenamos un autoencoder utilizando MSE entonces la mejor reconstrucción que podemos esperar es el “promedio” de las posibles soluciones

$$h(\tilde{\mathbf{x}}) = \mathbb{E}[\mathbf{x}|\tilde{\mathbf{x}}],$$

lo que es improbable que coincida con $p(\mathbf{x}|\tilde{\mathbf{x}})$.

Denoising Auto-encoders

Ejemplo MNIST



Auto-encoders y variational auto-encoders

Variational Auto-encoders

Variational Auto-encoders

Como veíamos en la transparencia 38...

Auto-encoders y variational auto-encoders

Referencias

Referencias

- ① **Lecture 11: Auto-encoders and variational auto-encoders**
- ② **Deep Learning Course**