RCP211 – Auto-encodeurs variationnels

Conditionnement – extensions – modèles autorégréssifs

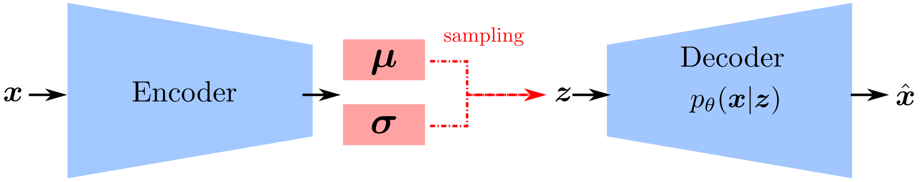
Nicolas Audebert nicolas.audebert@lecnam.net

Conservatoire national des arts & métiers

9 novembre 2021

Plan du cours

Auto-encodeur variationnel



$$p_\phi(\boldsymbol{z}|\boldsymbol{x}) = \mathcal{N}(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\sigma I})$$

Fonction de coût du VAE

$$\mathcal{L}(\theta, \phi; x) = \underbrace{\mathbb{E}_{q_\phi(z|x)}[||\hat{x} - x||]}_{\text{vraisemblance (reconstruction)}} + \underbrace{D_{\mathsf{KL}}(q_\phi(z|x)|p(z))}_{\text{régularisation (distance au prior)}}$$

- **Reconstruction** : "similarité" entre l'entrée et la sortie
  - dépend du problème (MSE, MAE, BCE...)
- **Régularisation** : divergence-KL (contrainte de proximité au *prior*)
  - Expression analytique dans le cas où tout est gaussien :

Plan du cours

Génération conditionnelle

Modèles génératifs

Le décodeur des auto-encodeurs forme un modèle génératif $p_\theta(x|z)$.

- on ne connaît (généralement) pas $p(z) \implies$ VAE
- comment spécifier une **connaissance *a priori*** sur l'observation x que l'on souhaite générer ?

Exemples de problématiques

- générer une séquence cohérente d'objets,
- réaliser une prédiction probabiliste,
- générer un exemple d'une certaine classe,
- générer un exemple présentant des propriétés de plusieurs classes.

Génération conditionnelle

Modèles génératifs

Le décodeur des auto-encodeurs forme un modèle génératif $p_\theta(x|z)$.

- on ne connaît (généralement) pas $p(z) \implies$ VAE
- comment spécifier une **connaissance *a priori*** sur l'observation x que l'on souhaite générer ?

Exemples de problématiques

- générer une séquence cohérente d'objets,
- réaliser une prédiction probabiliste,
- générer un exemple d'une certaine classe,
- générer un exemple présentant des propriétés de plusieurs classes.

Génération conditionnelle

Modèles génératifs

Le décodeur des auto-encodeurs forme un modèle génératif $p_\theta(x|z)$.

- on ne connaît (généralement) pas $p(z) \implies$ VAE
- comment spécifier une **connaissance *a priori*** sur l'observation x que l'on souhaite générer ?

Exemples de problématiques

- générer une séquence cohérente d'objets,
- réaliser une prédiction probabiliste,
- générer un exemple d'une certaine classe,
- générer un exemple présentant des propriétés de plusieurs classes.

Génération conditionnelle

Modèles génératifs

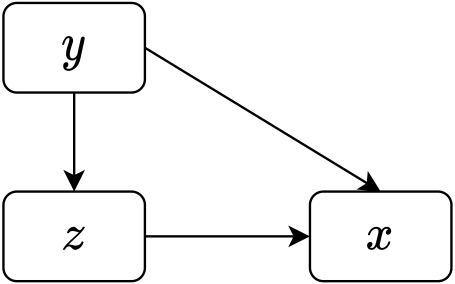
Le décodeur des auto-encodeurs forme un modèle génératif $p_\theta(x|z)$.

- on ne connaît (généralement) pas $p(z) \implies$ VAE
- comment spécifier une **connaissance *a priori*** sur l'observation x que l'on souhaite générer ?

Exemples de problématiques

- générer une séquence cohérente d'objets,
- réaliser une prédiction probabiliste,
- générer un exemple d'une certaine classe,
- générer un exemple présentant des propriétés de plusieurs classes.

VAE conditionnel



Conditionnement

Construire le modèle génératif $p_\theta(x|y,z)$

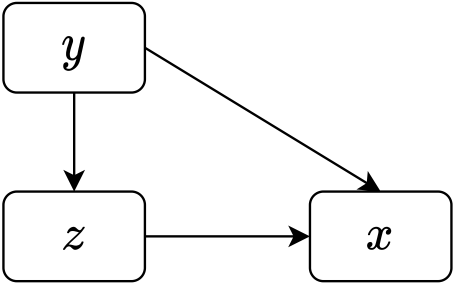
$\rightarrow$ on injecte une information spécifique (y) dans l'espace latent ($\mathcal{Y} \times \mathcal{Z}$)

Cadre formel

On cherche un modèle θ permettant de générer x à partir de z sachant y.
On maximise la (log-)vraisemblance *conditionnelle* sur $\mathcal{D} = \{(x_1, y_1), \ldots, (x_n, y_n)\}$:

$$\hat{\theta} = \arg\max_\theta \mathbb{E}_{p_\mathcal{D}} \log p_\theta(x|y) = \frac{1}{N} \sum_i \log p_\theta(x_i|y_i)$$

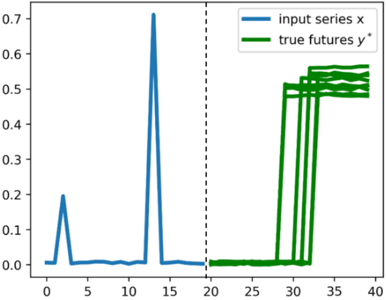
VAE conditionnel



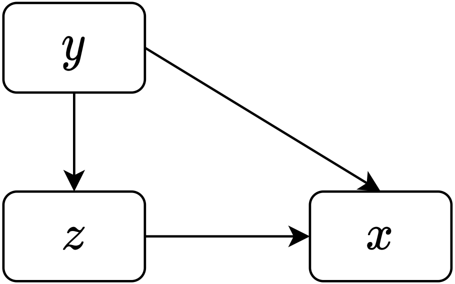
Conditionnement

Construire le modèle génératif $p_\theta(x|y, z)$

$\rightarrow$ on injecte une information spécifique (y) dans l'espace latent ($\mathcal{Y} \times \mathcal{Z}$)



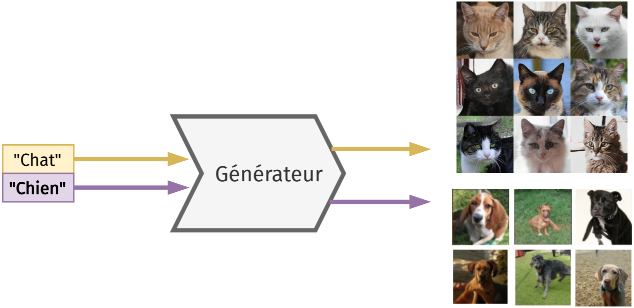
VAE conditionnel



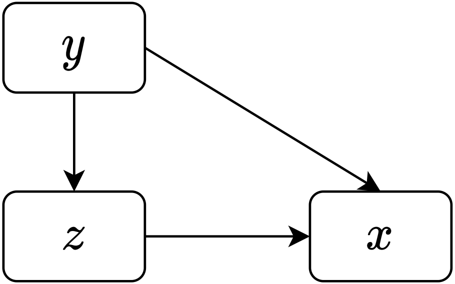
Conditionnement

Construire le modèle génératif $p_\theta(x|y, z)$

$\rightarrow$ on injecte une information spécifique (y) dans l'espace latent ($\mathcal{Y} \times \mathcal{Z}$)



VAE conditionnel



Conditionnement

Construire le modèle génératif $p_\theta(x|y,z)$

→ on injecte une information spécifique (y) dans l'espace latent ($\mathcal{Y} \times \mathcal{Z}$)

Cadre formel

On cherche un modèle θ permettant de générer x à partir de z sachant y.
On maximise la (log-)vraisemblance *conditionnelle* sur $\mathcal{D} = \{(x_1, y_1), \dots, (x_n, y_n)\}$:

$$\hat{\theta} = \arg\max_\theta \mathbb{E}_{p_\mathcal{D}} \log p_\theta(x|y) = \frac{1}{N} \sum_i \log p_\theta(x_i|y_i)$$

Cadre formel

VAE conditionnel

Soit x les données, z les variables latentes, c le *conditionnement*.
Le VAE conditionnel s'intéresse :

- au modèle génératif $p_\theta(x|z, c)$ ($\simeq$ décodeur)
- au modèle conditionnel $q_\phi(z|x, c)$ ($\simeq$ encodeur)

Objectif

Déterminer les paramètres θ et ϕ tels que :

- $p_\theta(x|c)$ soit une bonne approximation de $p(x|c) \to$ génération conditionnelle,
- $q_\phi(z|x, c)$ soit une bonne approximation de $p_\theta(x|c) \to$ encodage dans l'espace latent.

Cadre formel

VAE conditionnel

Soit x les données, z les variables latentes, c le *conditionnement*.
Le VAE conditionnel s'intéresse :

- au modèle génératif $p_\theta(x|z, c)$ ($\simeq$ décodeur)
- au modèle conditionnel $q_\phi(z|x, c)$ ($\simeq$ encodeur)

Objectif

Déterminer les paramètres θ et ϕ tels que :

- $p_\theta(x|c)$ soit une bonne approximation de $p(x|c)$ $\rightarrow$ génération conditionnelle,
- $q_\phi(z|x, c)$ soit une bonne approximation de $p_\theta(x|c)$ $\rightarrow$ encodage dans l'espace latent.

Cadre formel

VAE conditionnel

Soit x les données, z les variables latentes, c le *conditionnement*.
Le VAE conditionnel s'intéresse :

- au modèle génératif $p_\theta(x|z, c)$ ($\simeq$ décodeur)
- au modèle conditionnel $q_\phi(z|x, c)$ ($\simeq$ encodeur)

Objectif

Déterminer les paramètres θ et ϕ tels que :

- $p_\theta(x|c)$ soit une bonne approximation de $p(x|c)$ $\rightarrow$ génération conditionnelle,
- $q_\phi(z|x, c)$ soit une bonne approximation de $p_\theta(x|c)$ $\rightarrow$ encodage dans l'espace latent.

Cadre formel

VAE conditionnel

Soit x les données, z les variables latentes, c le *conditionnement*.
Le VAE conditionnel s'intéresse :

- au modèle génératif $p_\theta(x|z, c)$ ($\simeq$ décodeur)
- au modèle conditionnel $q_\phi(z|x, c)$ ($\simeq$ encodeur)

Objectif

Déterminer les paramètres θ et ϕ tels que :

- $p_\theta(x|c)$ soit une bonne approximation de $p(x|c)$ $\to$ génération conditionnelle,
- $q_\phi(z|x, c)$ soit une bonne approximation de $p_\theta(x|c)$ $\to$ encodage dans l'espace latent.

Cadre formel

VAE conditionnel

Soit x les données, z les variables latentes, c le *conditionnement*.
Le VAE conditionnel s'intéresse :

- au modèle génératif $p_\theta(x|z, c)$ ($\simeq$ décodeur)
- au modèle conditionnel $q_\phi(z|x, c)$ ($\simeq$ encodeur)

Objectif

Déterminer les paramètres θ et ϕ tels que :

- $p_\theta(x|c)$ soit une bonne approximation de $p(x|c)$ $\rightarrow$ génération conditionnelle,
- $q_\phi(z|x, c)$ soit une bonne approximation de $p_\theta(x|c)$ $\rightarrow$ encodage dans l'espace latent.

Cadre formel

VAE conditionnel

Soit x les données, z les variables latentes, c le *conditionnement*.
Le VAE conditionnel s'intéresse :

- au modèle génératif $p_\theta(x|z, c)$ ($\simeq$ décodeur)
- au modèle conditionnel $q_\phi(z|x, c)$ ($\simeq$ encodeur)

Objectif

Déterminer les paramètres θ et ϕ tels que :

- $p_\theta(x|c)$ soit une bonne approximation de $p(x|c)$ $\rightarrow$ génération conditionnelle,
- $q_\phi(z|x, c)$ soit une bonne approximation de $p_\theta(x|c)$ $\rightarrow$ encodage dans l'espace latent.

ELBO conditionnelle

Définition

$$\mathrm{ELBO}(x, \theta, \phi | c) = \mathbb{E}_{q_\phi(z|x,c)} \log p_\theta(x|c) - \mathrm{KL}(q_\phi(z|x, c) || p_\theta(z|c)$$

Équivalence

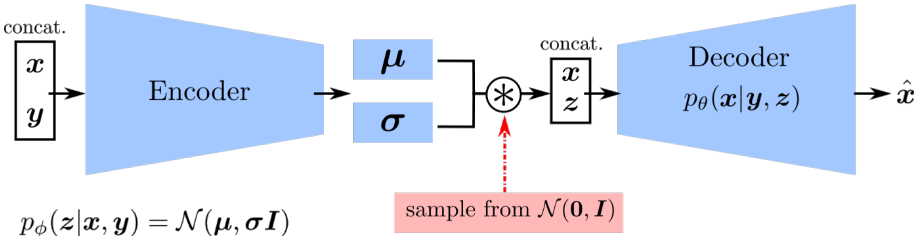
$$\hat{\phi} = \arg\min_\phi \mathrm{KL}(q_\phi(z|x, c) || p_\theta(z|x, c))$$

$$\Updownarrow$$

$$\hat{\phi} = \arg\max_\phi \mathrm{ELBO}(\theta, \phi; x, c)$$

(extension naturelle du cas non-conditionnel)

Entraînement du VAE conditionnel

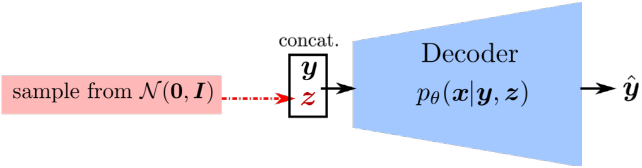


Optimisation

Analogue au VAE classique :

- Astuce de la reparamétrisation,
- Concaténation du conditionnement au code latent.

Inférence dans le VAE conditionnel



Génération

1. Choix de y (ou tirage aléatoire),
2. Échantillonnage de $z \sim p(z)$,
3. Concaténation $[y, z]$,
4. Génération de $\hat{x}$ par décodage.

Plan du cours

Processus autorégressif

Supposons un processus :

- dont on peut estimer les prochaines réalisations à partir des observations déjà rencontrées,
- dont les prochaines réalisations ne dépendent pas du futur (i.e. **causal**).

Définition

Un processus $\{x_t\}_{0 \leq t \leq N}$ satisfait la *propriété d'autorégression* si :

$$p(x_t) = p(x_t | x_{t-1}, \ldots, x_1)$$

Exemple : les chaînes de Markov sont des processus autorégressifs d'ordre 1 ($p(x_t) = p(x_t | x_{t-1})$).

Processus autorégressif

Supposons un processus :

- dont on peut estimer les prochaines réalisations à partir des observations déjà rencontrées,
- dont les prochaines réalisations ne dépendent pas du futur (i.e. **causal**).

Définition

Un processus $\{x_t\}_{0 \leq t \leq N}$ satisfait la *propriété d'autorégression* si :

$$p(x_t) = p(x_t | x_{t-1}, \dots, x_1)$$

Exemple : les chaînes de Markov sont des processus autorégressifs d'ordre 1 ($p(x_t) = p(x_t | x_{t-1})$).

Processus autorégressif

Supposons un processus :

- dont on peut estimer les prochaines réalisations à partir des observations déjà rencontrées,
- dont les prochaines réalisations ne dépendent pas du futur (i.e. **causal**).

Définition

Un processus $\{x_t\}_{0 \leq t \leq N}$ satisfait la *propriété d'autorégression* si :

$$p(x_t) = p(x_t | x_{t-1}, \dots, x_1)$$

Exemple : les chaînes de Markov sont des processus autorégressifs d'ordre 1 ($p(x_t) = p(x_t | x_{t-1})$).

Modélisation

Ordonnancement

Soit $\mathcal{D}$ un jeu de données contenant les observations d'une variable aléatoire $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^d$.
On peut toujours écrire (à l'aide de la *chain rule**) :

$$p(\mathbf{x}) = \prod_{i=1}^{d} p(x_i|x_{<i}) = \prod_{i=1}^{d} p(x_i|x_1, x_2, \ldots, x_{i-1})$$

$\rightarrow \mathbf{x}$ devient un processus autorégressif pour peu que l'on accepte d'imposer un *ordonnancement* sur ses dimensions

Modèle génératif autorégressif

On suppose $p_{\theta_i}(x_i|\mathbf{x}_{<i})$: les lois conditionnelles sont paramétrées par θ_i.

* Formule des probabilités composées : $P(A \cap B) = P(B \mid A) \cdot P(A)$

Exemple

Soit $\{x_t\}_{0 \leq t \leq N}$ avec $x_i \in 0, 1$:

$$p_{\theta_i}(x_i | \mathbf{x}_{<i}) = \mathrm{Bern}(f_i(x_1, x_2, \ldots, x_{i-1}))$$

c'est-à-dire que la probabilité de passer d'obtenir $x_i = 1$ est donnée par une loi de Bernouilli dont la probabilité est une fonction f_i de $x_1, x_2, \ldots, x_{i-1}$, paramétrée par θ_i.

Cas simple

$$f_i(x_1, x_2, \ldots, x_{i-1}) = \sigma(\alpha_0^{(i)} + \alpha_1^{(i)} x_1 + \cdots + \alpha_{i-1}^{(i)} x_{i-1})$$

avec σ la sigmoide et $\theta_i = \{\alpha_0^{(i)}, \ldots, \alpha_{i-1}^{(i)}\}$ les paramètres.
$\implies$ *fully-visible sigmoid belief network* (FVSBN)

NADE

Neural Autoregressive Density Estimator

f_i est remplacé par un perceptron multi-couche :

$$\mathbf{h}_i = \sigma(A_i \mathbf{x}_{<i} + \mathbf{c}_i)$$

$$f_i(x_1, x_2, \ldots, x_{i-1}) = \sigma(\alpha^{(i)} \mathbf{h_i} + b_i)$$

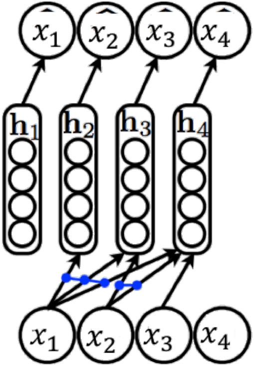
Partage des poids

En pratique, tous les MLP utilisent la même matrice de poids W et on utilise $A_i = W_{\cdot,<i}$:

$$\mathbf{h}_i = \sigma(\mathbf{a}_i)$$

$$\mathbf{a}_{i+1} = \mathbf{a}_i + W[:, i] x_i$$

avec $\mathbf{a}_1 = \mathbf{c}$.



NADE

MADE : principe

Comment rendre un autoencodeur autorégressif ?

Pour un ordonnancement donné $x_1, \ldots, x_n$, il ne doit pas y avoir de chemin dans le réseau qui mène de $\mathbf{x}_{<\mathbf{i}}$ à $\hat{x}_i$.

Masked Autoencoders for Density Estimation

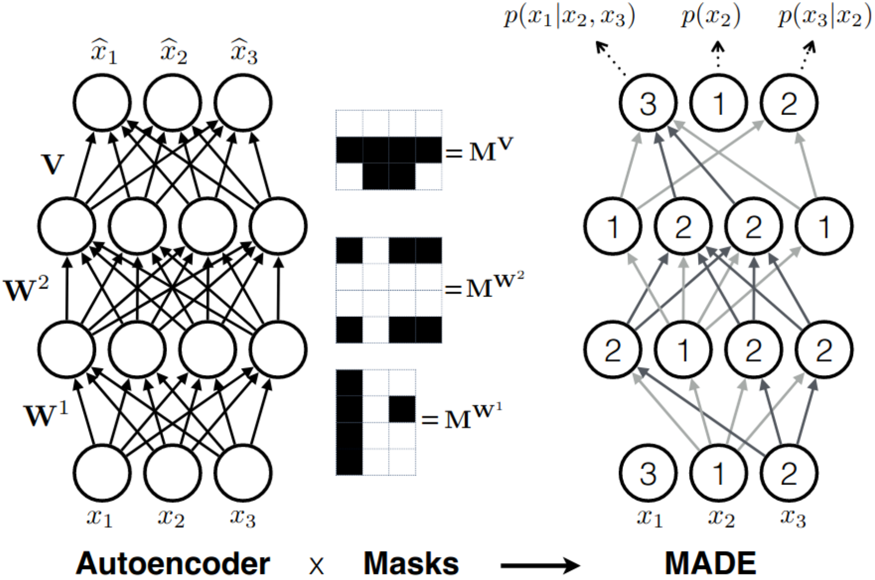
Autoencodeur : *multi-layer perceptron*

$$\mathbf{z} = f(\mathbf{b} + (\mathbf{W} \odot \mathbf{M}^{\mathbf{W}})\mathbf{x})$$
$$\hat{\mathbf{x}} = \sigma(\mathbf{c} + (\mathbf{V} \odot \mathbf{M}^{\mathbf{V}})\mathbf{z})$$

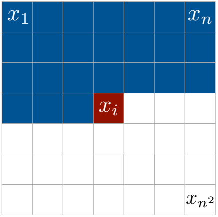
On assigne un numéro $m(k) < D$ à chaque neurone et on "masque" tous les neurones d'un numéro inférieur au neurone courant :

$$\mathbf{M}^{\mathbf{W}}_{m(k),d} = \begin{cases} 1 \text{ si } m(k) \geq d \\ 0 \text{ sinon} \end{cases} \quad \text{et } \mathbf{M}^{\mathbf{V}}_{m(k),d} = \begin{cases} 1 \text{ si } m(k) > d \\ 0 \text{ sinon} \end{cases}$$

MADE : illustration



Génération d'images



Context

Pixels = séquence

$$p(\mathbf{x}) = \prod_{i=1}^{n^2} p(x_i | x_1, \ldots, x_{i-1})$$

Image couleur : trois canaux RVB ($x_i = (x_{i,R}, x_{i,V}, x_{i,B})$)

$$p(x_i|\mathbf{x}_{<\mathbf{i}}) = p(x_{i,R}|\mathbf{x}_{<\mathbf{i}})p(x_{i,V}|\mathbf{x}_{<\mathbf{i}}, x_{i,R})p(x_{i,B}|\mathbf{x}_{<\mathbf{i}}, x_{i,R}, x_{i,V})$$

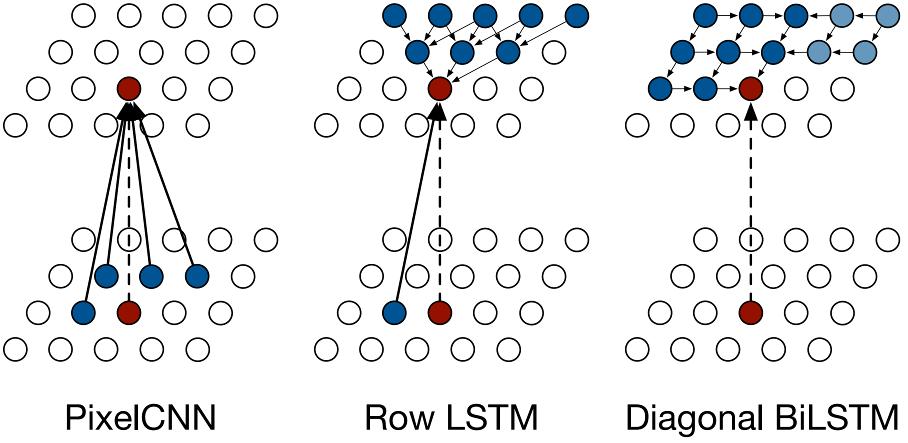
Pixels discrets ou continus ?

Deux possibilités :

- $p(\mathbf{x})$ est une distribution continue ($\sim$ régression)
- $p(\mathbf{x})$ est une distribution discrète (256 valeurs) $\rightarrow$ softmax

PixelRNN/PixelCNN

Architectures autorégressives



Plan du cours

Distribution postérieure dans le VAE

Approximation du postérieur

$q_\phi(z|x_i) = \mathcal{N}(\mu_{x_i}, \sigma_{x_i}\mathbf{I}) \rightarrow$ obtenue par l'encodeur

Avantages

- Simple à calculer, dérivation facile pour la rétropropagation
- Échantillonnage aisé à l'aide du *reparametrization trick*
- Possibilité d'approcher $q_\phi(z|x) = \sum_i q_\phi(z|x_i)$ (par ex., modèle de mélange gaussien)

Inconvénients

- Capacité d'approximation limitée (gaussienne...)
- La régularisation (proximité au *prior*) limite les possibilités pour μ_x
- Pas de corrélations entre les dimensions de $z \rightarrow$ interprétabilité limitée

Distribution postérieure dans le VAE

Approximation du postérieur

$q_\phi(z|x_i) = \mathcal{N}(\mu_{x_i}, \sigma_{x_i}\mathbf{I}) \rightarrow$ obtenue par l'encodeur

Avantages

- Simple à calculer, dérivation facile pour la rétropropagation
- Échantillonnage aisé à l'aide du *reparametrization trick*
- Possibilité d'approcher $q_\phi(z|x) = \sum_i q_\phi(z|x_i)$ (par ex., modèle de mélange gaussien)

Inconvénients

- Capacité d'approximation limitée (gaussienne...)
- La régularisation (proximité au *prior*) limite les possibilités pour μ_x
- Pas de corrélations entre les dimensions de $z \rightarrow$ interprétabilité limitée

Discrétiser l'espace latent

Pourquoi discrétiser ?

Facilite la manipulation

Postérieur catégoriel

Distribution catégorielle

Considérons un ensemble latent de K vecteurs $\{e_1, \dots, e_K\}$. On définit alors la distribution postérieure $q_\phi(z|x)$ telle que :

$$q_\phi(z = k|x) = \begin{cases} 1 \text{ si } k = \arg\min_j \|z_e(x) - e_j\|_2 \\ 0 \text{ sinon} \end{cases}$$

Autrement dit, z prend pour valeur le vecteur e_i qui est le plus proche du code $z_e(x)$ obtenu en sortie de l'encodeur.

- l'espace latent est divisé en K entrées d'un dictionnaire,
- la catégorie latente est obtenue par recherche du plus proche voisin.

Optimisation

VQ-ELBO

$$q_\phi(z=k|x) = \begin{cases} 1 \text{ si } k = \arg\min_j \|z_e(x) - e_j\|_2 \\ 0 \text{ sinon} \end{cases}$$

$q_\phi(z=k|x)$ est déterministe. En supposant l'a priori sur z **uniforme** :

$$\mathrm{KL}(q_\phi(z|x)||p_\theta(z)) = \log K$$

La fonction objectif du VQ-VAE est alors :

$$\mathcal{L}(\theta,\phi;x) = \underbrace{\mathbb{E}_{q_\phi(z|x)}[\log p_\theta(x|z)]}_{\log p_\theta(x|z) \text{ car } q_\phi(z|x) \text{ est déterministe}} - \underbrace{\mathrm{KL}(q_\phi(z|x)||p_\theta(z))}_{\log K}$$

Apprentissage

Quantification

Le décodeur reçoit $z_q(x) = e_i$ qui est le plus proche voisin de $z_e(x)$:

$$z_q(x) = \underset{e_j \in \{e_1, \ldots, e_K\}}{\arg\min} \|z_e(x) - e_j\|$$

Non-dérivabilité

L'opérateur $\arg\min$ n'est pas dérivable :

- on "copie" le gradient en entrée du décodeur D_θ à la sortie de l'encodeur E_ϕ,

$\rightarrow$ on calcule les gradients de $z_e(x)$ comme si c'était $z_q(x)$

$$\mathcal{L}(\theta, \phi; x) = \underbrace{\log p_\theta(x | z_q(x))}_{\text{vraisemblance}} + \underbrace{\|\mathrm{sg}[z_e(x)] - e\|_2^2}_{\text{apprentissage des atomes, sg = "stop gradient"}}$$

Commitment loss

Problème

$$\mathcal{L}(\theta, \phi; x) = \underbrace{\log p_\theta(x|z_q(x))}_{\text{vraisemblance}} + \underbrace{\|\mathrm{sg}[z_e(x)] - e\|_2^2}_{\text{apprentissage des atomes, sg = ``stop gradient''}}$$

Rien n'empêche l'encodeur de dériver par rapport au dictionnaire ou d'osciller entre plusieurs valeurs pour e.

Régularisation

$$\mathcal{L}(\theta, \phi; x) = \underbrace{\log p_\theta(x|z_q(x))}_{\text{vraisemblance}} + \underbrace{\|\mathrm{sg}[z_e(x)] - e\|_2^2}_{\text{apprentissage des atomes}} + \beta \underbrace{\|z_e(x) - \mathrm{sg}[e]\|_2^2}_{\text{commitment loss}}$$

Prior

Encodage en pratique

En réalité, une observation x est encodée en N vecteurs latents. Par exemple, une image $224 \times 224 \rightarrow 32 \times 32$ codes entiers.

Échantillonnage ?

Selon quelle distribution échantilloner les valeurs des codes z pour la génération ?
$\rightarrow$ apprentissage d'un modèle autorégressif (PixelCNN) pour apprendre la distribution des z