

دانشگاه تهران
پردیس دانشکده‌های فنی
دانشکده مهندسی برق و کامپیوتر

تمرین شماره: ۱

مدل‌های مولد عمیق

نام و نام خانوادگی: آرتین توسلی

شماره دانشجویی: ۸۱۰۱۰۲۵۴۳

نیمسال اول
سال تحصیلی ۴۰۴-۴۰۵

فهرست مطالب

| | |
|----|--|
| ۵ | PGM ۱ |
| ۵ | شبکه بیزی ۱.۱ |
| ۵ | رسم شبکه بیزی ۱.۱.۱ |
| ۶ | توزع احتمال توأم ۲.۱.۱ |
| ۶ | بررسی استقلال ۳.۱.۱ |
| ۷ | شبکه مارکوف ۱ ۲.۱ |
| ۷ | توزع احتمال توأم ۱.۲.۱ |
| ۷ | مارکوف بلنکت ۲.۲.۱ |
| ۸ | Perfect I-Map ۲.۲.۱ |
| ۹ | گراف وتری ۴.۲.۱ |
| ۹ | توزيع توأم بر اساس کلیک بیشینه ۵.۲.۱ |
| ۱۰ | حذف متغیر از توزيع توأم ۶.۲.۱ |
| ۱۱ | شبکه مارکوف ۲ ۳.۱ |
| ۱۱ | توزيع توأم بر اساس کلیک های بیشینه ۱.۳.۱ |
| ۱۱ | بررسی استقلال ۲.۳.۱ |
| ۱۱ | اسکیل کردن پتانسیل در توزيع توأم ۲.۳.۱ |
| ۱۲ | Variational Inference ۴.۱ |
| ۱۴ | VAE Training ۲ |
| ۱۴ | VAE ۱.۲ |
| ۱۴ | تابع هزینه ۱.۱.۲ |

فهرست مطالب

| | | |
|----|-------------------------|-------|
| ۲ | | |
| ۱۵ | دیتاست | ۲.۱.۲ |
| ۱۶ | حقه گرادیان | ۲.۱.۲ |
| ۱۷ | تحلیل مدل با بتا ۱ | ۴.۱.۲ |
| ۲۱ | تأثیر بتا | ۵.۱.۲ |
| ۲۲ | تحلیل مدل با بتا ۵ و ۱۰ | ۶.۱.۲ |
| ۲۴ | MIG معیار | ۷.۱.۲ |
| ۲۶ | PCA | ۸.۱.۲ |
| ۲۹ | VAE Variants | ۲.۲ |
| ۲۹ | VQ-VAE | ۱.۲.۲ |
| ۳۱ | VampPrior | ۲.۲.۲ |
| ۳۲ | SC-VAE | ۲.۲.۲ |

فهرست تصاویر

| | | |
|----|--|------|
| ۵ | شبکه بیزی | ۱.۱ |
| ۱۶ | نمونه هایی از دیتاست dSprites | ۱.۲ |
| ۱۸ | خلاصه ساختار شبکه انکودر. | ۲.۲ |
| ۱۹ | خلاصه ساختار شبکه دیکودر. | ۳.۲ |
| ۲۰ | نمودار تغییرات تابع هزینه، بازسازی و KL برای داده های آموزش و اعتبارسنجی. | ۴.۲ |
| ۲۱ | نمونه هایی از بازسازی مدل VAE برای $\beta = 1$. سطر اول ورودی اصلی و سطر دوم بازسازی مدل است. | ۵.۲ |
| ۲۲ | تغییرات تابع هزینه برای $\beta = 5$. | ۶.۲ |
| ۲۳ | تغییرات تابع هزینه برای $\beta = 10$. | ۷.۲ |
| ۲۴ | نمونه هایی از بازسازی مدل برای $\beta = 5$. | ۸.۲ |
| ۲۴ | نمونه هایی از بازسازی مدل برای $\beta = 10$. | ۹.۲ |
| ۲۵ | مقایسه مقدار MIG برای مقادیر مختلف β . | ۱۰.۲ |
| ۲۶ | پراکندگی فضای نهان برای فاکتور orientation. | ۱۱.۲ |
| ۲۷ | پراکندگی فضای نهان برای فاکتور posX. | ۱۲.۲ |
| ۲۷ | پراکندگی فضای نهان برای فاکتور posY. | ۱۳.۲ |
| ۲۸ | پراکندگی فضای نهان برای فاکتور scale. | ۱۴.۲ |
| ۲۸ | پراکندگی فضای نهان برای فاکتور shape. | ۱۵.۲ |

فهرست جداول

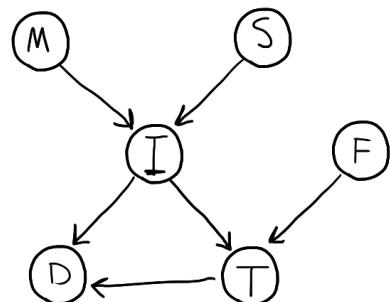
| | | | |
|----|-------|--|-----|
| ۱۶ | | عوامل پنهان در دیتاست dSprites | ۱.۲ |
| ۱۷ | | هایپرپارامترهای استفاده شده در مدل VAE. | ۲.۲ |
| ۲۳ | | مقادیر نهایی تابع هزینه برای مقادیر مختلف β | ۳.۲ |
| ۲۵ | | مقادیر MIG کلی و بهازای فاکتورهای مختلف برای مدل‌های گوناگون | ۴.۲ |

سوال ۱

PGM

۱.۱ شبکه بیزی

۱.۱.۱ رسم شبکه بیزی



شکل ۱.۱: شبکه بیزی

۲.۱.۱ توزیع احتمال توأم

قاعده‌ی فاکتورگیری در شبکه‌های بیزی می‌گوید برای مجموعه متغیرها X_1, \dots, X_n داریم:

$$P(X_1, \dots, X_n) = \prod_{i=1}^n P(X_i | \text{Pa}(X_i)),$$

که در آن $\text{Pa}(X_i)$ مجموعه والدهای X_i در گراف است.

با توجه به شبکه بیزی این سوال، توزیع توأم به صورت زیر فاکتور می‌شود:

$$P(M, S, F, I, T, D) = P(M) P(S) P(F) P(I | M, S) P(T | I, F) P(D | I, T).$$

۳.۱.۱ بررسی استقلال

طبق الگوریتم D-Separation عمل میکنیم (در این الگوریتم اگه تمامی مسیر ها بلاک بشوند آن موقع مستقل میشود اما اگر تنها یک مسیر باز بماند پس مستقل نمیشوند)

آ. نادرست است؛ مسیر $D \rightarrow T \rightarrow F$ باز است، پس F و D وابسته‌اند.

ب. درست است؛ همه مسیر های S به D از I عبور میکند و با دانستن I تمام این مسیر ها به صورت head-to-tail بلاک میشود.

ج. درست است؛ مسیر $M \rightarrow I \rightarrow T \leftarrow F$ در نقطه T بسته هست طبق حالت head-to-head و همینطور مسیر $M \rightarrow I \rightarrow D \leftarrow T \leftarrow F$ نیز در نقطه D به دلیل همین حالت بسته میباشد بسته است؛ در نتیجه M و F مستقل‌اند.

د. نادرست است؛ با دانستن نقطه T مسیر $M \rightarrow I \rightarrow T \leftarrow F$ را باز میکند، (حالت head-to-head بنا براین M و F وابسته می‌شوند).

ه. درست است؛ مسیر $M \rightarrow I \rightarrow T$ با دانستن I توسط حالت head-to-tail بسته شده است اما با اینکه مسیر $M \rightarrow I \rightarrow D \leftarrow T$ توسط D باز شده است جون I مسیر را قطع کرده بود در کل مسیر قطع میشود بنا براین M و T مستقل می‌شوند.

۲.۱ شبکه مارکوف

۱.۲.۱ توزیع احتمال توأم

$$\begin{aligned} P(C, O, A, S, T, B, M) &= P(C) P(O) P(A) P(S | O) P(T | O, A) \\ &\quad \times P(B | S) P(M | B, T, A). \end{aligned}$$

۲.۲.۱ مارکوف بلنکت

مارکوف بلنکت یک گره شامل سه دسته گره است:

- والدها (Parents)
- فرزندان (Children)
- والدهای مشترک فرزندان (Co-Parents)

طبق تعریف، مارکوف بلنکت یک گره یعنی کوچکترین مجموعه از گره هایی که اگر آنها را بدانیم، تمامی گره های دیگر گراف نسبت به آن گره مستقل خواهند بود. بدیهی است که یک گره به فرزندان و والد هایش وابسته هست پس حتما باید آنها را بدانیم اما زمانی که بچه ای را میدانیم، آن موقع باید حواسمن باشد که حالت (head-to-head) رخ ندهد، چون میدانیم با دانستن فرزند Z اولیا Y با هم وابسته میشوند پس حتما باید تمامی والدهای مشترک فرزندان را نیز بدانیم.

در گراف این سؤال، والدهای T برابرند با:

$$\text{Pa}(T) = \{O, A\}$$

فرزند T گره زیر است:

$$\text{Ch}(T) = \{M\}$$

والدهای مشترک گره M (به جز خود T) :

$$\{A, B\}$$

۱.۲. شبکه مارکوف

۸

پس مارکوف بلنکت T به صورت زیر است:

$$\boxed{\text{MB}(T) = \{O, A, M, B\}}$$

۳.۲.۱ Perfect I-Map

اگر G یک گراف و P توزیع روی همان متغیرها باشد، با $\mathcal{I}(G)$ مجموعه استقلال‌های شرطی القا شده توسط جداسازی‌های گرافی و با $\mathcal{I}(P)$ مجموعه استقلال‌های شرطی واقعی توزیع را نشان می‌دهیم.

(هر استقلالی که گراف القا کند در P هم درست است).

P برای D-map $G \iff \mathcal{I}(P) \subseteq \mathcal{I}(G)$ (هر استقلال واقعی P را گراف هم نشان می‌دهد).

P برای perfect I-map $G \iff \mathcal{I}(G) = \mathcal{I}(P)$. (D-map هم و هم I-map)

در این سوال فرض شده است که:

$$\mathcal{I}(P) = \mathcal{I}(G_{\text{Bayes}})$$

حال در گراف بیزی طبق الگوریتم D-seperation داریم:

$$S \perp T \mid O.$$

استدلال: در مسیر S به T گره‌های O ، M قطع می‌باشد و در نتیجه تمامی مسیر‌ها بلاک شدند و این دو مستقل هستند (گره O در این مسیر بنابر حالت tail-to-tail قطع شده است و گره M در این مسیر بنابر حالت head-to-head قطع شده است)

$$S \perp T \mid O \in \mathcal{I}(P).$$

اما در گراف مارکوف داده شده، با separation می‌بینیم که با داشتن O هنوز مسیر

$$S - B - T$$

۱.۲. شبکه مارکوف ۱

باز است؛ بنابراین

$$S \not\perp T \mid O \implies S \perp T \mid O \notin \mathcal{I}(G).$$

نتیجه. چون یک استقلال واقعی توزیع $(S \perp T \mid O)$ در گراف مارکوف نشان داده نشده است،

$$\mathcal{I}(P) \not\subseteq \mathcal{I}(G),$$

پس گراف مارکوف *D-map* نیست؛ در نتیجه نمی‌تواند *perfect I-map* نیز باشد.

۴.۲.۱ گراف وتری

گراف وتری گرافی است که هر دور به طول چهار یا بیشتر از آن شامل وتر باشد.

در گراف مارکوف داده شده، دور چهار رأسی زیر وجود دارد:

$$O - S - B - T - O.$$

وترهای این دور $O-B$ و $S-T$ هستند. پس گراف وتری نیست.

۵.۲.۱ توزیع توأم بر اساس کلیک بیشینه

کلیک های بیشینه، زیرگراف های کاملی هستند که با اضافه کردن گره دیگری در گراف، زیرگراف کامل بزرگتری ایجاد نمی‌شود. پس در گراف سوال داریم:

$$\{O, A, T\}, \quad \{A, T, M\}, \quad \{B, T, M\}, \quad \{O, S\}, \quad \{S, B\}, \quad \{C\}.$$

بنابراین توزیع توأم به شکل زیر نوشته می‌شود:

$$\begin{aligned} P(A, B, C, O, S, T, M) &= \frac{1}{Z} \phi_1(O, A, T) \phi_2(A, T, M) \phi_3(B, T, M) \\ &\quad \times \phi_4(O, S) \phi_5(S, B) \phi_6(C). \end{aligned}$$

۶.۲.۱ حذف متغیر از توزیع توانم

(۱) گراف بیزی. طبق زیربخش اول این قسمت داریم:

$$\begin{aligned} P(C, O, A, S, T, B, M) &= P(C) P(O) P(A) P(S | O) P(T | O, A) \\ &\quad \times P(B | S) P(M | B, T, A). \end{aligned}$$

حذف C یعنی مجموعگیری (یا در حالت پیوسته انتگرالگیری) روی C :

$$\begin{aligned} P(O, A, S, T, B, M) &= \sum_C P(C, O, A, S, T, B, M) \\ &= \left(\sum_C P(C) \right) P(O) P(A) P(S | O) P(T | O, A) P(B | S) P(M | B, T, A) \\ &= 1 \times P(O) P(A) P(S | O) P(T | O, A) P(B | S) P(M | B, T, A), \end{aligned}$$

(۲) گراف مارکوف. طبق زیربخش پنجم این قسمت داریم:

$$\begin{aligned} P(A, B, C, O, S, T, M) &= \frac{1}{Z} \phi_1(O, A, T) \phi_2(A, T, M) \phi_3(B, T, M) \\ &\quad \times \phi_4(O, S) \phi_5(S, B) \phi_6(C). \end{aligned}$$

حال:

$$\begin{aligned} P(O, A, S, T, B, M) &= \sum_C P(C, O, A, S, T, B, M) \\ &= \frac{1}{Z'} \left(\sum_C \phi_6(C) \right) \phi_1(O, A, T) \phi_2(A, T, M) \phi_3(B, T, M) \\ &\quad \times \phi_4(O, S) \phi_5(S, B) \\ &= \frac{1}{Z'} \phi_1(O, A, T) \phi_2(A, T, M) \phi_3(B, T, M) \\ &\quad \times \phi_4(O, S) \phi_5(S, B) \end{aligned}$$

$Z = Z'$ (یا در حالت پیوسته $\int \phi_C(C) dC = 1$)
 اگر $\sum_C \phi_C(C) = 1$ (آنگاه)
 مگر نه $Z' = Z / \sum_C \phi_6(C)$ در هر صورت صرفا ضریب نرمال سازی ممکن است تغییر کند و ما میتوانیم C را حذف کنیم

۳.۱ شبکه مارکوف ۲

۱.۳.۱ توزیع توأم بر اساس کلیک‌های بیشینه

کلیک‌های بیشینه گراف سوال:

$$\{A, B, C\}, \quad \{B, C, D\}, \quad \{C, D, F\} \quad \{E, B\}, \quad \{E, F\}, \quad \{E, G\}.$$

بنابراین توزیع توأم چنین فاکتور می‌شود:

$$\begin{aligned} P(A, B, C, D, E, F, G) &= \frac{1}{Z} \phi_1(A, B, C) \phi_2(B, C, D) \phi_3(C, D, F) \\ &\times \phi_4(E, B) \phi_5(E, F) \phi_6(E, G) \end{aligned}$$

۲.۳.۱ بررسی استقلال

طبق الگوریتم Separation برای گره‌های Z و یال‌هایشان را حذف می‌کنیم؛ اگر بین X و Y مسیری نماند، مستقل‌اند.

(آ) نادرست است. بدون شرط، مسیر $A - B - E - G$ وجود دارد؛ پس A و G وابسته‌اند.

(ب) نادرست است. با حذف $\{C, D\}$ هنوز مسیر $A - B - E - F$ باز است؛ پس A و F وابسته‌اند.

(ج) درست است. با حذف E ، رأس G از بقیه گراف جدا می‌شود و مسیری به C ندارد.

(د) درست است. در ابتدا با حذف گره‌های B, C گراف جدید را تولید کرده، در این گراف جدید A, E مستقل می‌باشند چون مسیری بین آنها وجود ندارد یعنی $P(A) = P(A | E)$ و یعنی در گراف

$$P(A | B, C) = P(A | B, C, E)$$

۳.۳.۱ اسکیل کردن پتانسیل در توزیع توأم

از بخش اول این قسمت داریم:

$$\begin{aligned} P(A, B, C, D, E, F, G) &= \frac{1}{Z} \phi_1(A, B, C) \phi_2(B, C, D) \phi_3(C, D, F) \\ &\times \phi_4(B, E) \phi_5(E, F) \phi_6(E, G). \end{aligned}$$

اکنون پتانسیل را ۵ برابر می‌کنیم و

$$\phi'_6(E, G) \triangleq 5\phi_6(E, G).$$

آنگاه

$$\begin{aligned} P'(A, B, C, D, E, F, G) &= \frac{1}{Z} \phi_1 \phi_2 \phi_3 \phi_4 \phi_5 \phi'_6 \\ &= \frac{1}{Z} 5 \phi_1 \phi_2 \phi_3 \phi_4 \phi_5 \phi_6 = \frac{1}{Z'} \phi_1 \phi_2 \phi_3 \phi_4 \phi_5 \phi_6, \end{aligned} \quad Z' = \frac{Z}{5}.$$

اثر «۵ برابر کردن» فقط در ثابت نرمال‌سازی جذب می‌شود و توزع تغییری نمی‌کند

Variational Inference ۴.۱

رابطه زیر جواب بهینه $q(z)$ را بدست می‌آورد.

$$q^*(z) = \arg \min_{q \in \mathcal{Q}} \text{KL}(q(z) \| p(z | x)) = \arg \min_{q \in \mathcal{Q}} \text{KL}(q(z) \| p(z, x)). \quad (4.1)$$

درستی رابطه بالا با کمک رابطه زیر اثبات می‌شود (توجه کنید $p(x)$ نسبت به z ثابت است)

$$\log p(x) = -\text{KL}(q(z) \| p(x, z)) + \text{KL}(q(z) \| p(z | x)).$$

پس داریم:

$$\theta^* = \arg \min_{\theta} \text{KL}(q(z) \| p(z, x)) = E_q[\log \frac{q(z)}{p(z, x)}] \quad (۲.۱)$$

$$= E_q[\log \frac{q(z)}{p(x | z)p(z)}] \quad (۳.۱)$$

$$= E_q[\log \frac{\theta^2 z e^{-\theta z}}{z e^{-zx} e^{-z}}] \quad (۴.۱)$$

$$= E_q[\log(\theta^2 z e^{-\theta z})] - E_q[\log(z e^{-zx-z})] \quad (۵.۱)$$

$$= E_q[\log(\theta^2 z) - \theta z] - E_q[\log(z) - zx - z] \quad (۶.۱)$$

$$= E_q[\log(\theta^2 z)] - E_q[\theta z] - E_q[\log z] + E_q[zx + z] \quad (۷.۱)$$

$$= E_q[\log(\theta^2)] + E_q[\log z] - E_q[\theta z] - E_q[\log z] + E_q[zx + z] \quad (۸.۱)$$

$$= E_q[2 \log \theta] - E_q[\theta z] + E_q[zx + z]. \quad (۹.۱)$$

توزیع احتمال روی z تعریف شده و بنابراین ترم‌های وابسته به x ثابت‌اند؛ پس داریم:

$$\theta^* = 2 \log \theta - \theta E_q[z] + (x+1)E_q[z] \quad (۱۰.۱)$$

$$= 2 \log \theta - \theta \frac{2}{\theta} + (x+1)\frac{2}{\theta} \quad (۱۱.۱)$$

$$= f(\theta) \quad (۱۲.۱)$$

پس

$$f(\theta) = 2 \log \theta - 2 \cdot \theta + (x+1) \cdot \frac{2}{\theta}, \quad (۱۳.۱)$$

$$\frac{\partial f}{\partial \theta} = \frac{2}{\theta} - \frac{2(x+1)}{\theta^2} = 0 \implies 1 = \frac{x+1}{\theta^*} \implies \boxed{\theta^* = x+1}. \quad (۱۴.۱)$$

سوال ۲

VAE Training

VAE ۱.۲

تابع هزینه ۱.۱.۲

به ما میگوید که احتمال $\log p_\theta(x)$ را بیشینه بکنیم، maximum log likelihood

$$\log p_\theta(x) = \log \int p_\theta(x, z) dz$$

اما محاسبه انتگرال فوق غیر ممکن میباشد (حتی اگر z باینری هم باشد و تنها ۱۰۰ نمونه دیده باشیم² جمع زدن نیاز هست که غیرممکن می باشد. بخاطر همین مسأله را تغییر میدهیم و از یک توزیع کمکی $(q_\phi(z | x))$ استفاده میکنیم و مینویسیم:

$$\begin{aligned} \log p_\theta(x) &= \log \int q_\phi(z | x) \frac{p_\theta(x, z)}{q_\phi(z | x)} dz \\ &\geq \mathbb{E}_{q_\phi} [\log p_\theta(x, z) - \log q_\phi(z | x)] \quad (\text{نابرابری ینسن}) \\ &= \underbrace{\mathbb{E}_{q_\phi} [\log p_\theta(x | z)]}_{\text{ترم بازسازی}} - \underbrace{D_{\text{KL}}(q_\phi(z | x) \| p(z))}_{\text{نُرم ساز}} =: \mathcal{L}_{\text{ELBO}}(\theta, \phi; x). \end{aligned}$$

از سوی دیگر تجزیه دقیق داریم:

$$\log p_\theta(x) = \mathcal{L}_{\text{ELBO}}(\theta, \phi; x) + D_{\text{KL}}(q_\phi(z | x) \| p_\theta(z | x)).$$

پس $\mathcal{L}_{\text{ELBO}}$ کران پایینی بر $\log p_\theta(x)$ است و وقتی $q_\phi(z | x) = p_\theta(z | x)$ شود، این کران دقیقاً می‌رسد. برخلاف $\mathcal{L}_{\text{ELBO}}$ عبارت $\log p_\theta(x)$ کاملاً قابل محاسبه و مشتق پذیر می‌باشد (با $p_\theta(x)$ و میتوان آن را کمینه کرد). reparameterization trick

نقش هر ترم در بهینه‌سازی.

- بازسازی $[\log p_\theta(x | z)]$: پارامترهای دیکودر θ را کنترل می‌کند تا با دریافت z نمونه شبیه x بسازد این ترم «کیفیت بازسازی likelihood» را بهبود می‌دهد.
- D_{KL} به پیشین $(q_\phi(z | x) \| p(z))$: پارامترهای انکودر ϕ را نرم‌سازی می‌کند تا پسین تقریبی برابر پیشین بشود. اگر این ترم نبود، مدل ممکن بود داده‌ها را به بخشای مختلفی از فضای نهان مپ کند که یعنی باعث حفره‌هایی در این فضا بشود و اگر موقع تولید داده از روی فضای نهان از این حفره‌ها نمونه بگیریم، به تولید معناداری منجر نمی‌شود پس در اصل این عبارت باعث می‌شود تا مدل مولد بشود.

۲.۱.۲ دیتاست

دیتاست dSprites توسط گروه DeepMind معرفی شده است و یک مجموعه داده synthetic برای ارزیابی مدل‌های مولد و به خصوص disentanglement learning استفاده می‌شود. تمامی تصاویر، شکل‌های دوبعدی ساده با رزولوشن 64×64 پیکسل و به صورت سیاه‌وسفید هستند و هر تصویر از ترکیب شش عامل پنهان^۱ به وجود می‌آید.

عوامل پنهان: شش عامل پنهان و مقادیر مربوط به هر کدام در جدول ۱.۲ آورده شده است:

Latent Factors^۱

جدول ۱.۲: عوامل پنهان در دیتاست dSprites

| تعداد حالتها | نوع مقادیر | عامل |
|--------------|------------------------------|-------------|
| 3 | (Square, Ellipse, Heart) | Shape |
| 6 | اندازه (پیوسته کوانتیزه شده) | Scale |
| 40 | [0, 2π] زاویه چرخش | Orientation |
| 1 | grayscale | Color |
| 32 | موقعیت افقی | Position X |
| 32 | موقعیت عمودی | Position Y |

بنابراین تعداد کل تصاویر برابر است با:

$$1 \times 3 \times 6 \times 40 \times 32 \times 32 = 737,280$$



شکل ۱.۲: نمونه هایی از دیتاست dSprites

۳.۱.۲ حقه گرادیان

در VAE، انکودر به جای خروجی دادن یک بردار ثابت، پارامترهای توزیع نهان را می سازد؛ مثلاً برای گاوی:

$$q_{\phi}(z | x) = \mathcal{N}(\mu_{\phi}(x), \sigma_{\phi}^2(x)).$$

سپس برای تغذیه دیکودر، از این توزیع نمونه‌گیری می‌کنیم. نمونه‌گیری یک عمل تصادفی و غیرقابل مشتق‌گیری است؛ بنابراین اگر $z \sim q_\phi(z | x)$ را مستقیماً به دیکودر بدهیم، مسیر گرادیان از در مسیر پارامترهای ϕ قطع می‌شود و آموزش شکست می‌خورد.

با یک ترفند بازپارامتری‌سازی میتوان این مشکل را حل کرد. به جای نمونه‌گیری مستقیم از $(x | z)$ ، آن را به شکل تابعی از نویز ثابت می‌نویسیم تا تصادفیت از پارامترها جدا شود:

$$\begin{aligned}\varepsilon &\sim \mathcal{N}(0, I), \\ z &= \mu_\phi(x) + \sigma_\phi(x) \odot \varepsilon.\end{aligned}$$

اکنون $g_\phi(x, \varepsilon) = z$ یک نگاشت قابل مشتق‌گیری نسبت به ϕ است (نویز ε منبع تصادفیت است و به پارامترها وابسته نیست)؛ پس گرادیان به راحتی از دیکودر به انکودر عبور می‌کند.

۴.۱.۲ تحلیل مدل با بتا ۱

مدل شامل دو بخش اصلی Encoder و Decoder است که معماری هرکدام در شکل‌های ۲.۲ و ۳.۲ نمایش داده شده است. جدول ۲.۲ هایپرپارامترهای استفاده شده در آموزش مدل را نشان می‌دهد.

جدول ۲.۲: هایپرپارامترهای استفاده شده در مدل VAE.

| پارامتر | مقدار |
|--------------------|---------------|
| Input Shape | (64, 64, 1) |
| Filters | [32, 64, 128] |
| Dense Hidden Units | 256 |
| Latent Dimension | 16 |
| Num Downsampling | 3 |
| Batch Size | 256 |
| Epochs | 50 |
| Beta | 1.0 |
| Validation Split | 0.05 |
| Learning Rate | 10^{-3} |
| Optimizer | Adam |
| Max Samples | 200,000 |

| Model: "encoder" | | | |
|--|--------------------|-----------|-------------------------------|
| Layer (type) | Output Shape | Param # | Connected to |
| encoder_input (InputLayer) | (None, 64, 64, 1) | 0 | - |
| conv1 (Conv2D) | (None, 32, 32, 32) | 320 | encoder_input[0]... |
| batch_normalization (BatchNormalization) | (None, 32, 32, 32) | 128 | conv1[0][0] |
| leaky_re_lu (LeakyReLU) | (None, 32, 32, 32) | 0 | batch_normalizat... |
| dropout (Dropout) | (None, 32, 32, 32) | 0 | leaky_re_lu[0][0] |
| conv2 (Conv2D) | (None, 16, 16, 64) | 18,496 | dropout[0][0] |
| batch_normalization (BatchNormalization) | (None, 16, 16, 64) | 256 | conv2[0][0] |
| leaky_re_lu_1 (LeakyReLU) | (None, 16, 16, 64) | 0 | batch_normalizat... |
| dropout_1 (Dropout) | (None, 16, 16, 64) | 0 | leaky_re_lu_1[0]... |
| conv3 (Conv2D) | (None, 8, 8, 128) | 73,856 | dropout_1[0][0] |
| batch_normalization (BatchNormalization) | (None, 8, 8, 128) | 512 | conv3[0][0] |
| leaky_re_lu_2 (LeakyReLU) | (None, 8, 8, 128) | 0 | batch_normalizat... |
| dropout_2 (Dropout) | (None, 8, 8, 128) | 0 | leaky_re_lu_2[0]... |
| flatten (Flatten) | (None, 8192) | 0 | dropout_2[0][0] |
| dense_h (Dense) | (None, 256) | 2,097,408 | flatten[0][0] |
| batch_normalization (BatchNormalization) | (None, 256) | 1,024 | dense_h[0][0] |
| leaky_re_lu_3 (LeakyReLU) | (None, 256) | 0 | batch_normalizat... |
| dropout_3 (Dropout) | (None, 256) | 0 | leaky_re_lu_3[0]... |
| z_mean (Dense) | (None, 16) | 4,112 | dropout_3[0][0] |
| z_log_var (Dense) | (None, 16) | 4,112 | dropout_3[0][0] |
| z (Sample) | (None, 16) | 0 | z_mean[0][0], z_log_var[0][0] |

شكل ٢.٢: خلاصة ساختار شبكة انكودر.

| Model: "decoder" | | |
|--|---------------------|---------|
| Layer (type) | Output Shape | Param # |
| input_layer (InputLayer) | (None, 16) | 0 |
| dense (Dense) | (None, 8192) | 139,264 |
| reshape (Reshape) | (None, 8, 8, 128) | 0 |
| conv2d_transpose (Conv2DTranspose) | (None, 16, 16, 128) | 147,584 |
| batch_normalization_4 (BatchNormalization) | (None, 16, 16, 128) | 512 |
| conv2d_transpose_1 (Conv2DTranspose) | (None, 32, 32, 64) | 73,792 |
| batch_normalization_5 (BatchNormalization) | (None, 32, 32, 64) | 256 |
| conv2d_transpose_2 (Conv2DTranspose) | (None, 64, 64, 32) | 18,464 |
| batch_normalization_6 (BatchNormalization) | (None, 64, 64, 32) | 128 |
| conv2d_transpose_3 (Conv2DTranspose) | (None, 64, 64, 1) | 289 |

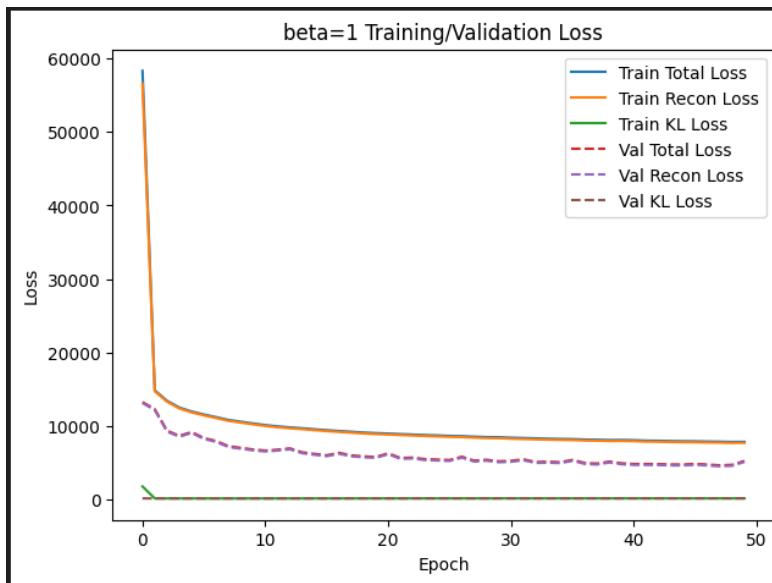
شکل ۳.۲: خلاصه ساختار شبکه دیکودر.

تابع هزینه در VAE شامل دو جزء اصلی است:

$$\mathcal{L} = \mathbb{E}_{q_\phi(z|x)}[\log p_\theta(x|z)] - \beta D_{\text{KL}}(q_\phi(z|x) \| p(z))$$

- ترم بازسازی $\mathbb{E}[\log p(x|z)]$: خطای بین ورودی و خروجی بازسازی شده را کمینه می‌کند و مدل را به تولید داده‌های مشابه ورودی وادر می‌سازد.
- ترم KL: فاصله بین توزیع پسین $q_\phi(z|x)$ و پیشین $p(z)$ را تنظیم می‌کند و فضای نهان را منظم نگه می‌دارد.
- پارامتر β نقش تنظیم‌کننده دارد: برای مدل تعادل بین دقت بازسازی و نظم فضای نهان را حفظ می‌کند.

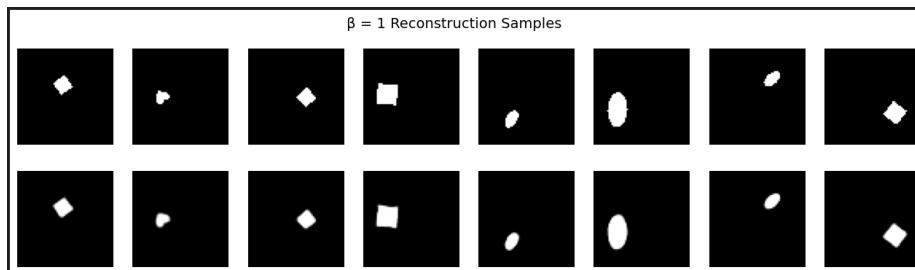
شکل ۴.۲ تغییرات مقدار هر جزء از تابع هزینه را در طول ۵۰ دوره آموزش نشان می‌دهد.



شکل ۴.۲: نمودار تغییرات تابع هزینه، بازسازی و KL برای داده‌های آموزش و اعتبارسنجی.

طبق نمودار بالا:

- ترم بازسازی (Recon loss) در اولین دوره آموزشی بسیار زیاد بوده است و به این معنی که در دوره اول تقریبا هیچ قدرت بازسازی عکس را ندارد اما بعد از چند دوره (۲ الی ۳) آموزش دیدن با سرعت تقریبا ثابت شروع به کاهش کردن میکند و یعنی مدل به قدرت بازسازی خوبی از عکس ها رسیده است.
 - ترم KL بسیار کوچک مانده که نشان‌دهنده هموار بودن فضای نهان و منظم شدن توزیع $(z|x)$ است.
- پس از پایان آموزش، ۸ نمونه از داده‌های آزمایش از مدل عبور داده شدند و خروجی بازسازی شده در شکل ۵.۲ نمایش داده شده است.



شکل ۵.۲: نمونه هایی از بازسازی مدل VAE برای $\beta = 1$. سطر اول ورودی اصلی و سطر دوم بازسازی مدل است.

تحلیل نتایج بازسازی:

- بازسازی ها شکل کلی و ویژگی های اصلی نمونه های ورودی (مانند نوع شکل، زاویه چرخش و موقعیت مکانی) را با دقت بالا حفظ کرده اند.
- در برخی موارد لبه ها کمی نرم تر یا تار هستند که به ماهیت توزیعی بازسازی در VAE مربوط است.

مدل آموزش داده شده با $\beta = 1$ عملکرد مناسبی در بازسازی داده ها داشته است. ترم بازسازی بیشترین تأثیر را در آموزش داشته، ترم KL فضای نهان را منظم نگه داشته، و نتایج تصویری کیفیت بازسازی مطلوبی را نشان می دهند.

۵.۱.۲ تأثیر بتا

با افزودن بتا به مدل VAE استاندارد، کنترل روی ترم KL داریم و انگار با یک ضریبی ELBO را داریم بیشینه می کنیم.

$$\mathcal{L}_{\beta\text{-VAE}} = \mathbb{E}_{q_{\phi}(z|x)} [\log p_{\theta}(x | z)] - \beta D_{\text{KL}}(q_{\phi}(z | x) \| p(z)), \quad \beta > 0.$$

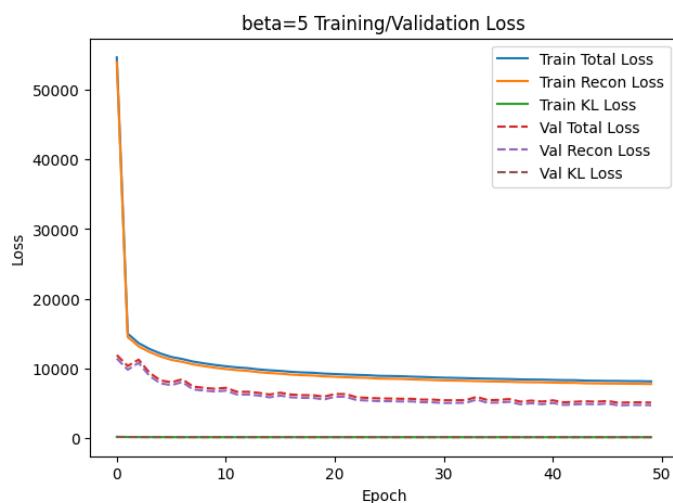
برای $\beta = 1$ VAE به استاندارد برمی گردید؛ $\beta < 1$ یعنی جریمه قوی تر و اگرایی KL، و $\beta > 1$ یعنی جریمه ضعیفتر. در حالت $\beta > 1$ مدل قادر می شود اطلاعات کمتری از x را به z عبور دهد و یعنی اطلاعات مهمتر تنها کدگذاری می شوند در فضای پنهان و ابعاد فضای پنهان ویژگی های سطح بالاتری را میتوانند نشان بدهند که یعنی فضان تفسیرپذیر تر شده است. در همین راستای تفسیرپذیر تر بودن مدل عامل دیگری نیز تأثیر میگذارد با اهمیت بیشتر ترم KL باعث نزدیک تر شدن $(x | z)$ به پیشین (معمولا گاوی) می شود و یعنی ابعاد z کمتر به هم وابسته هستند و هر کدام از آنها میتوانند ویژگی خاصی را کد کنند. با افزایش اهمیت ترم KL

همیتوپور اعتماد ما از تصاویر تولید شده نیز بیشتر میشود چون فضای خالی در فضای پنهان مدل کمتر میشود. در کل داشتن بتا باعث میشود که ما بتوانیم اولویت بازسازی و تولید کردن مدل را با توجه به خواسته هایمون تنظیم کنیم.

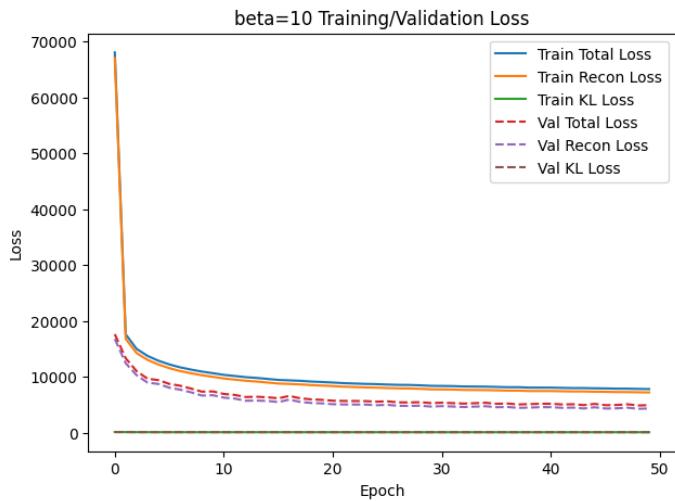
۶.۱.۲ تحلیل مدل با بتا ۵ و ۱۰

در این بخش، اثر مقادیر مختلف پارامتر β بر رفتار مدل VAE بررسی شده است. بهمنظور تحلیل دقیق‌تر، دو مقدار $\beta = 5$ و $\beta = 10$ انتخاب و مدل با همان ساختار و داده‌های بخش قبل آموزش داده شد. هدف از این آزمایش، مشاهده تأثیر ضریب منظم‌سازی KL بر همگرایی، بازسازی، و ساختار فضای پنهان است.

شکل‌های ۶.۲ و ۷.۲ روند تغییرات سه مؤلفه اصلی تابع هزینه (بازسازی، KL و کل هزینه) را برای هر دو مقدار β در طول ۵۰ ایپاک نمایش می‌دهند.



شکل ۶.۲: تغییرات تابع هزینه برای $\beta = 5$.



شکل ۷.۲: تغییرات تابع هزینه برای $\beta = 10$.

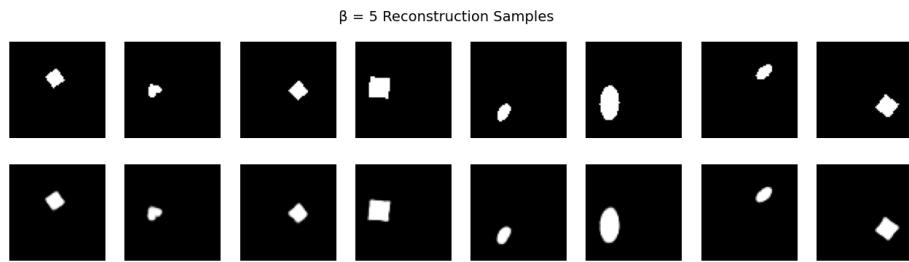
در انتهای آموزش، مقادیر نهایی تابع هزینه‌ها برای دو مدل به صورت زیر ثبت شد:

جدول ۳.۲: مقادیر نهایی تابع هزینه برای مقادیر مختلف β

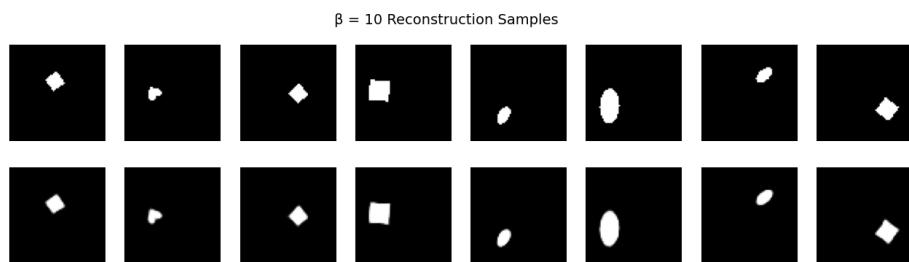
| Loss Validation | KL | Reconstruction | Loss | β |
|-----------------|-------|----------------|---------|---------|
| 5045.09 | 76.12 | 7716.18 | 8096.78 | 5 |
| 4914.43 | 60.62 | 7177.50 | 7783.67 | 10 |

هر دو مدل به خوبی همگرا شده‌اند و رفتار یکنواختی در کل فرایند آموزش دارند. در هر دو مقدار β ، بخش بازسازی (Reconstruction Loss) سهم عمدۀ تابع هزینه را دارد و به سرعت کاهش یافته و سپس در ناحیه‌ای پایدار قرار گرفته است. ترم KL نیز در هر دو مدل کوچک و ثابت باقی مانده که نشان‌دهنده پایداری فضای نهان و نزدیکی توزیع پسین $q_\phi(z|x)$ به پیشین $p(z)$ است. در مدل با $\beta = 10$ ، مقدار کل هزینه اندکی کمتر است که بیانگر فشرده‌تر شدن فضای نهان و تنظیم بهتر بین بازسازی و منظم‌سازی است. در واقع، فشار KL باعث شده مدل بازنمایی تمیزتر و مؤثرتری از داده‌ها یاد بگیره.

شکل‌های ۸.۲ و ۹.۲ نمونه‌هایی از بازسازی مدل را برای دو مقدار مختلف β نمایش می‌دهند. در هر دو حالت، مدل توانسته ویژگی‌های کلیدی داده‌های ورودی (شکل، زاویه چرخش، موقعیت و مقیاس) را بازسازی کند.



شکل ۸.۲: نمونه‌هایی از بازسازی مدل برای $\beta = 5$.



شکل ۹.۲: نمونه‌هایی از بازسازی مدل برای $\beta = 10$.

۷.۱.۲ معیار MIG

برای سنجش میزان استقلال و تفکیک‌پذیری فضای نهان، از معیار Mutual Information Gap (MIG) استفاده می‌شود. به عبارت دیگر، چقدر هر عدد از فضای نهان می‌تواند یک عامل معنایی مستقل از داده (مانند چرخش، اندازه یا موقعیت) را بازنمایی کند.

این معیار بر پایه Mutual Information میان متغیرهای نهان z و فاکتورهای اصلی داده v_j تعریف می‌شود. برای هر عامل واقعی v_j (مثلاً زاویه، موقعیت، شکل)، دو بعد از فضای نهان که بیشترین اطلاعات متقابل را با آن دارند انتخاب می‌شوند و اختلاف آن‌ها اندازه‌گیری می‌شود. سپس این اختلاف، نرمال‌سازی شده با آنتروپی فاکتور مربوطه محاسبه می‌شود:

$$\text{MIG} = \frac{1}{K} \sum_{j=1}^K \frac{1}{H(v_j)} (I(z_{i_1}; v_j) - I(z_{i_2}; v_j))$$

که در آن:

• Mutual Information $I(z_{i_1}; v_j)$ بیشترین Mutual Information بین بعد z_{i_1} و فاکتور v_j است؛

• Mutual Information $I(z_{i_2}; v_j)$ دومین مقدار بیشترین Mutual Information است؛

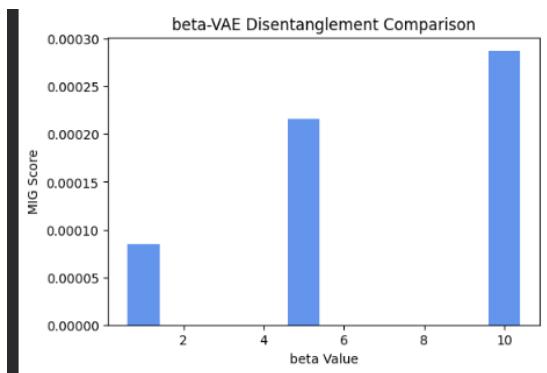
• آنتروپی فاکتور v_j می‌باشد. $H(v_j)$

هرچه مقدار MIG بزرگ‌تر باشد، نشان‌دهنده تفکیک‌پذیری بالاتر ابعاد نهان و استقلال بیشتر آن‌ها از یکدیگر است.

در این آزمایش، سه مدل با مقادیر مختلف آموزش داده شدن $\beta = 1, 5, 10$ و برای هر مدل، مقدار کلی MIG و مقادیر مربوط به هر فاکتور محاسبه گردید.

| جدول ۴.۲: مقادیر MIG کلی و بهازی فاکتورهای مختلف برای مدل‌های گوناگون | | | | | | |
|---|--------|-------------|--------|--------|--------|---------|
| posY | posX | Orientation | Scale | Shape | کل MIG | β |
| 0.0002 | 0.0002 | 0.0001 | 0.0000 | 0.0000 | 0.0001 | 1 |
| 0.0002 | 0.0008 | 0.0001 | 0.0000 | 0.0000 | 0.0002 | 5 |
| 0.0005 | 0.0005 | 0.0005 | 0.0000 | 0.0000 | 0.0003 | 10 |

همان‌طور که جدول نشان می‌دهد، با افزایش مقدار β ، نمره MIG به صورت پیوسته افزایش یافته است. مقدار کلی MIG از 0.0001 در $\beta = 1$ به 0.0003 در $\beta = 10$ رسیده است. بیشترین پیشرفت مربوط به فاکتورهای posX/posY و Orientation بوده که بیانگر استقلال بهتر ابعاد نهان در نمایش موقعیت و زاویهٔ شکل‌ها است.



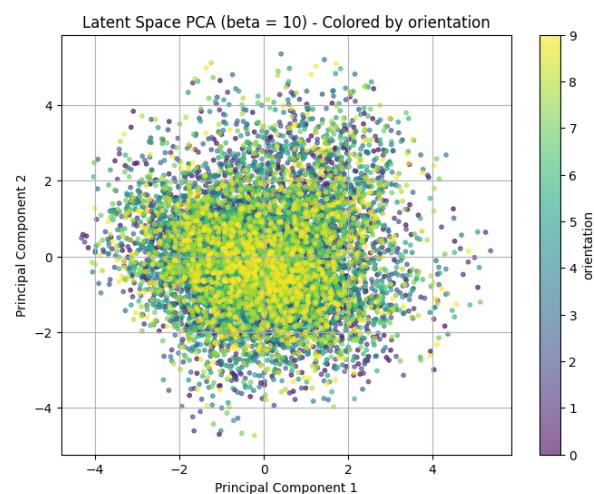
شکل ۱۰.۲: مقایسه مقدار MIG برای مقادیر مختلف β .

افزایش پیوستهٔ مقدار MIG با افزایش β ، به خوبی نشان‌دهندهٔ نقش منظم‌سازی قوی‌تر در مدل‌های VAE- β است. زمانی‌که β بزرگ‌تر می‌شود، مدل مجبور می‌شود تا اطلاعات غیرضروری را از فضای نهان حذف کند و هر بعد از z را به بازنمایی یک عامل خاص اختصاص دهد. در نتیجه، ابعاد فضای نهان مستقل‌تر و قابل تفسیرتر می‌شوند.

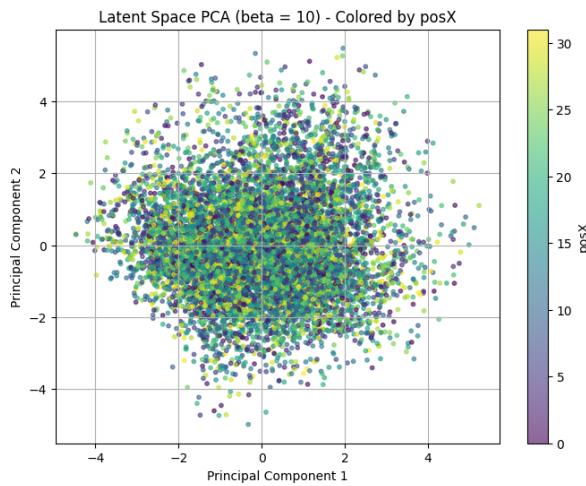
PCA ۸.۱.۲

برای بررسی تکیک‌پذیری ابعاد فضای نهان مدل VAE- β از تحلیل مؤلفه‌های اصلی (PCA) استفاده شد. در این بخش، فضای نهان مدل با $\beta = 10$ در دو مؤلفه اصلی تصویرسازی شده است. هر نمودار داده‌های نهان را در فضای دوبعدی نشان می‌دهد که رنگ نقاط نشان‌دهندهٔ مقدار یکی از عوامل اصلی داده‌ها (مانند چرخش، موقعیت یا شکل) است.

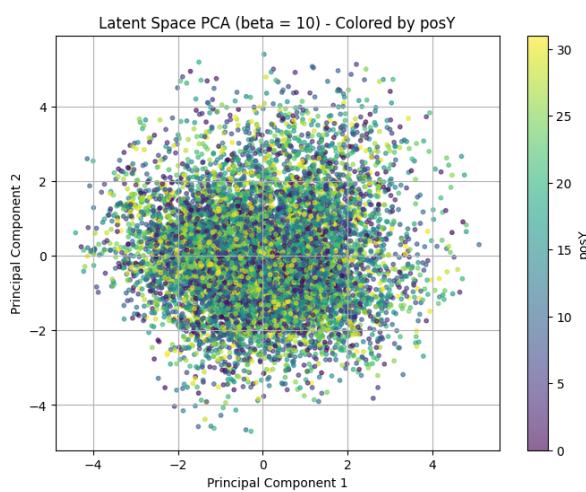
شکل‌های زیر پراکندگی داده‌ها را برای پنج فاکتور اصلی نمایش می‌دهند:



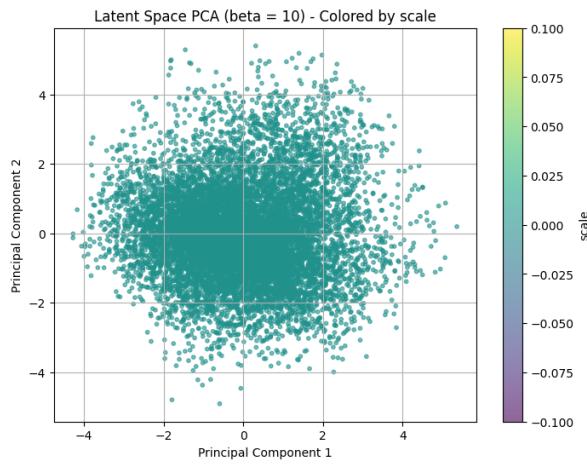
شکل ۱۱.۲: پراکندگی فضای نهان برای فاکتور orientation.



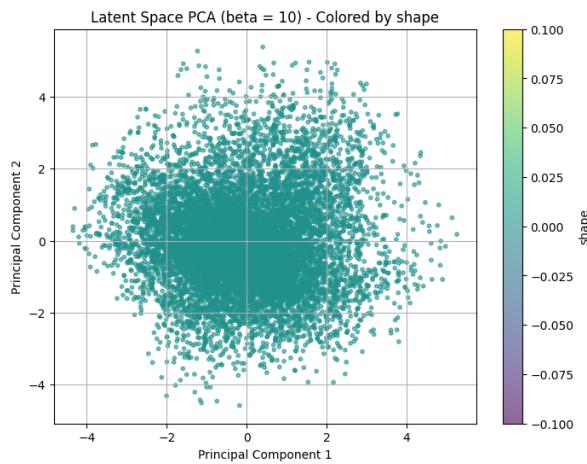
شکل ۱۲.۲: پرکندگی فضای نهان برای فاکتور posX.



شکل ۱۳.۲: پرکندگی فضای نهان برای فاکتور posY.



شکل ۱۴.۲ : پرائندگی فضای نهان برای فاکتور scale.



شکل ۱۵.۲ : پرائندگی فضای نهان برای فاکتور shape.

در نمودارهای بالا مشاهده می شود که نقاط فضای نهان در اطراف مبدأ و به صورت تقریباً کروی توزیع شده‌اند؛ این موضوع نشان می‌دهد که مدل موفق شده است تا حدودی توزیع نهان را مطابق با توزیع پیشین گاوی $p(z) = \mathcal{N}(0, I)$ نگه دارد.

با بررسی رنگبندی‌ها:

• در فاکتور orientation، گرچه تغییر رنگ‌ها تدریجی نیست، ولی می‌توان الگوی ضعیفی از خوشبندی مشاهده کرد. این بیانگر آن است که برخی ابعاد نهان توانسته‌اند اطلاعات مربوط به چرخش شکل را بازنمایی کنند.

• در فاکتورهای posX و posY توزیع رنگ‌ها نسبتاً یکنواخت‌تر است، اما نواحی مرکزی و پیرامونی تفاوت رنگی اندکی نشان می‌دهند. این موضوع حاکی از آن است که مدل در نمایش موقعیت اشکال در تصویر نیز به صورت ضعیف تفکیک انجام داده است.

• برای فاکتورهای scale و shape، تقریباً هیچ الگوی رنگی مشخصی دیده نمی‌شود؛ یعنی مدل در بازنمایی اندازه یا نوع شکل چندان موفق به جداسازی عوامل نشده است. این نتیجه با مقادیر پایین MIG برای همین فاکتورها سازگار است.

در مجموع می‌توان گفت که مدل $\beta = 10$ تا حدودی توانسته بین برخی عوامل (مخصوصاً موقعیت و جهتگیری) تایز قائل شود، اما در سایر عوامل مانند شکل و مقیاس هنوز هم پیوشنی بالایی بین ابعاد نهان وجود دارد. این نتایج با مقادیر پایین MIG و شکل توزیع گاووسی در فضای نهان هماهنگ است و نشان می‌دهد که اگرچه مدل فشرده و منظم است، اما هنوز به تفکیک کامل عوامل معنایی در ابعاد مستقل نرسیده است. برای بهبود تفکیک‌پذیری، می‌توان از مقادیر بالاتر β ، استفاده کرد.

VAE Variants ۲.۲

VQ-VAE ۱.۲.۲

تفاوت ساختاری مدل VQ-VAE با VAE در مدل‌های VAE معمولی، انکودر خروجی‌هایی پیوسته تولید می‌کند که پارامترهای یک توزیع (معمولأً گاووسی) هستند:

$$q_\phi(z | x) = \mathcal{N}(\mu_\phi(x), \sigma_\phi^2(x)I).$$

نمونه‌گیری از این توزیع به صورت پیوسته انجام می‌شود و فضای نهان نیز پیوسته است. اما در VQ-VAE به جای استفاده از توزیع پیوسته، انکودر یک بردار ویژگی (x_e) می‌سازد و سپس نزدیکترین بردار از میان مجموعه‌ای محدود از بردارهای نهان (کدبک) انتخاب می‌شود:

$$z_q(x) = e_k \rightarrow k = \arg \min_j \|z_e(x) - e_j\|_2^2.$$

مجموعه‌ی $\{e_1, e_2, \dots, e_K\}$ کدبک نام دارد و هر e_k نماینده «مرکز نقل» داده‌ایی است که به آن کد نسبت

داده شده‌اند. این کدها پارامترهای قابل یادگیری شبکه هستند و در طول آموزش به روزرسانی می‌شوند تا به طور مؤثر فضای نهان را پوشش دهند.تابع هزینه در VQ-VAE تابع هزینه کلی مدل از سه بخش تشکیل شده است:

$$\mathcal{L} = \underbrace{\|x - \hat{x}\|_2^2}_{\text{(Reconstruction)}} + \underbrace{\|\text{sg}[z_e(x)] - e_k\|_2^2}_{\text{(Codebook Loss)}} + \underbrace{\beta \|z_e(x) - \text{sg}[e_k]\|_2^2}_{\text{(Commitment Loss)}}.$$

۱. بازسازی (Reconstruction Loss). این بخش همانند VAE، مسئول بازسازی ورودی x از روی بردار گسسته‌ی انتخاب شده e_k است:

$$\|x - \hat{x}\|_2^2 = \|x - D(e_k)\|_2^2.$$

۲. به روزرسانی کدبوک (Codebook Loss). این بخش باعث می‌شود هر بردار e_k در کدبوک به سمت مرکز داده‌هایی حرکت کند که به آن اختصاص یافته‌اند:

$$\|\text{sg}[z_e(x)] - e_k\|_2^2.$$

در اینجا عملگر $\text{sg}[\cdot]$ به معنی stop-gradient است؛ یعنی گرادیان فقط برای e_k اعمال می‌شود و انکودر ثابت می‌ماند.

۳. تعهد انکودر (Commitment Loss). این بخش انکودر را وادار می‌کند تا به کدی که انتخاب کرده پایبند بماند و بین چند کد نزدیک به طور مداوم نوسان نکند:

$$\beta \|z_e(x) - \text{sg}[e_k]\|_2^2.$$

گسسته‌سازی در این مدل به این معناست که فضای نهان دیگر پیوسته نیست، بلکه از میان K کد مشخص انتخاب می‌شود. هر ورودی در واقع به یکی از کدهای گسسته‌ی کدبوک نگاشت می‌شود. بنابراین فضای نهان به جای پیوستگی، ساختار خوش‌های پیدا می‌کند و هر کد نمایندهٔ مجموعه‌ای از ورودی‌های مشابه است. مزایای VQ-VAE مدل

- رفع مشکل فروپاشی پسین (Posterior Collapse): اگر دیکودر بسیار قوی شده باشد، مدل می‌تواند بدون استفاده از متغیر پنهان z ، ورودی x را بازسازی کند. در این حالت، برای کمینه کردن

ترم KL ، انکودر تمایل دارد توزیع پسین خود را به پیشین نزدیک کند:

$$q_\phi(z | x) \approx p(z).$$

در نتیجه z دیگر حاوی هیچ اطلاعات خاصی از ورودی x نخواهد بود و بازنمایی نهان معنای خود را از دست می‌دهد. اما در $VQ\text{-VAE}$ ، چون دیکودر فقط از کدهای گسسته استفاده می‌کند، انکودر ناچار است اطلاعات معنی‌دار را در $(x_q(z))$ رمز کند.

- فضای نهان تفسیرپذیرتر کدهای گسسته معمولاً قابل تفسیرتر از بردارهای پیوسته‌اند و می‌توانند مفاهیم سطح بالایی را نشان دهند.
- پایداری در آموزش: حذف نمونه‌گیری تصادفی از توزیع گاووسی موجب پایداری بیشتر گردید.
- راحت تر مدل کردن وابستگی های طولانی فضای z گسسته و کوچکتر از فضای پیکسل ها هست و آموزش مدل مولد روی این فضا (شبیه توکن ها) سریعتر و پایدارتر می‌باشد.

VampPrior ۲.۲.۲

در مدل‌های VAE معمولی، پیش‌فرض را معمولاً از پیش‌انتخاب می‌کنیم، مانند یک پیش‌فرض گاووسی ساده. اما می‌توان پیش‌فرضی پیدا کرد که \mathcal{L} را بهینه کند با حداکثر کردن تابع لاغرانژ زیر به کمک ضریب لاغرانژ β :

$$\max -\mathbb{E}_{z \sim q(z)} [-\ln p_\lambda(z)] + \beta \int p_\lambda(z) dz - 1.$$

جواب این عبارت:

$$p_\lambda^*(z) = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N q_\phi(z | x_n).$$

اما این انتخاب ممکن است منجر به overfitting بشود و همینطور پیچیدگی محاسباتی بالایی دارد از اون طرف هم پیش‌فرض های ساده‌ای مانند توزیع نرمال استاندارد باعث می‌شود مدل‌ها over-regularized بشوند و بسیاری از ابعاد فضای نهان فعل نشود برای حل تمامی این مشکلات، می‌توان از ایده بهینه posterior تجمعی استفاده کرد اما با ترکیب تعدادی داده مصنوعی pseudo-inputs که خود اینها توسط مدل یادگرفته می‌شوند.

$$p_\lambda(z) = \frac{1}{K} \sum_{k=1}^K q_\phi(z | u_k),$$

K : تعداد pseudo-inputs است. این‌ها داده‌های مصنوعی قابل یادگیری هستند.

۲. u_k : داده‌های مصنوعی (pseudo data points) هستند که به طور همزمان با پارامترهای مدل (انکودر و دیکودر) یادگرفته می‌شوند.تابع هزینه در این مدل به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$\mathcal{L} = \mathbb{E}_{q_\phi(z|x)}[\log p_\theta(x|z)] - D_{\text{KL}}(q_\phi(z|x)\|p_\lambda(z)),$$

۳. $q_\phi(z|u_k)$: توزیع posterior است که انکودر مدل بر اساس داده u_k تولید می‌کند.

این ورودی‌های مصنوعی در اصل به عنوان نماینده‌هایی از منیفولد داده عمل می‌کنند

مقایسه پیش فرض‌های VAE و VampPrior

بیشینه کردن ELBO برابر است با پسین تجمعی روی کل داده‌ها:

$$p_\lambda^*(z) = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N q_\phi(z|x_n),$$

اما این انتخاب از نظر محاسباتی پرهزینه است. در مقابل، پیش‌فرض ساده‌گاووسی استاندارد موجب بیش‌منظم‌سازی و فعال‌نشدنِ بسیاری از ابعاد نهان می‌شود. روش VampPrior یک تقریب عملی از جواب بهینه هست که بدون هزینه چشمگیری این توزیع را تقریب می‌زند و دیگر نیازی نیست به یک توزیع همگی مپ بشوند و یک پیش‌فرض چند حالت و منطبق با داده به ما میدهد.. همینطور پیش‌فرض و پسین به صورت جفت آموزش می‌بینند (در VAE پیش‌فرض ثابت است و پسین باید خودش را با آن تطبیق بدهد).

VampPrior استفاده بهتری از ظرفیت نهان دارد (یعنی برخلاف نرمال استاندارد که فقط یک قله دارد، این پیش‌فرض چندین مرکز (mode) در فضای نهان دارد. در نتیجه هر داده‌ی واقعی می‌توانه نزدیک به یکی از این mode قرار بگیره و نیازی نیست همه چیز تویی یه نقطه متمرکز بشه. بنابراین مدل می‌توانه از بخش‌های مختلف فضای نهان برای نمایش گروه‌های متفاوت داده استفاده کنه).

SC-VAE ۳.۲.۲

بازنمایی تنک (Sparse) به این معناست که بیشتر درایه‌های بردار نهان صفر یا نزدیک به صفر باشند و تنها چند بعد واقعاً فعال باشند. برای بازنمایی یک داده خاص معمولاً فقط چند ویژگی کافی است، بنابراین مدل باید به جای پخش‌کردن اطلاعات در تمام ابعاد، تنها چند بعد مرتبط را روشن کند.

تنکسازی معمولاً با استفاده از قید یا جریمه ℓ_1 در تابع هزینه بیان می‌شود:

$$\min_z \frac{1}{2} \|x - Dz\|_2^2 + \lambda \|z\|_1,$$

که در آن:

- D دیکشنری است،
- z بردار بازنمایی تنک است،
- $\|z\|_1 = \sum_i |z_i|$ جریمه‌ای است که مقدارهای کوچک را به صفر نزدیک می‌کند.

در واقع ترم ℓ_1 باعث می‌شود بسیاری از مؤلفه‌های z صفر شوند.

الگوریتم ISTA (Iterative Shrinkage-Thresholding Algorithm) برای حل مسئله بالا استفاده می‌شود. در هر گام از ISTA دو مرحله انجام می‌شود:

۱. بروزرسانی گرادیانی برای کاهش خطای بازسازی،
۲. اعمال آستانه‌گذاری نرم برای صفر کردن مقادیر کوچک.

فرمول تکراری کلاسیک آن چنین است:

$$z^{(t+1)} = \mathcal{S}_{\alpha\lambda}\left(z^{(t)} + \alpha D^\top(x - Dz^{(t)})\right),$$

که (α) Soft Thresholding عملگر آستانه‌گذاری نرم $\mathcal{S}_\tau(v) = \text{sign}(v) \max(|v| - \tau, 0)$ است و نرخ یادگیری می‌باشد.

در مدل SC-VAE، نسخه آموختنی این الگوریتم با نام LISTA (Learned ISTA) استفاده می‌شود، که در آن پارامترهای ماتریس‌ها و آستانه‌ها نیز قابل یادگیری هستند:

$$z^{(t+1)} = \mathcal{S}_\theta(W_1 x + W_2 z^{(t)}),$$

چند گام از این تکرار به صورت یک زیرشبکه در دل VAE تعبیه می‌شود. به این ترتیب، LISTA یک نگاشت مستقیم و سریع از x به z یاد می‌گیرد و آموزش مدل به صورت end-to-end قابل انجام است.

ساختر مدل SC-VAE، انکودر، ماثول LISTA و دیکودر در یک زنجیره‌ی واحد

قرار دارند:

$$x \xrightarrow{\text{Encoder}} h \xrightarrow{\text{LISTA}} z \xrightarrow{\text{Decoder}} \hat{x}.$$

- انکودر ویژگی اولیه را از ورودی استخراج می‌کند.
- بلوک LISTA چند گام تکرار گرادیانی + آستانه‌گذاری را برای تنکسازی انجام می‌دهد و z را تولید می‌کند.
- دیکودر با استفاده از z داده را بازسازی می‌کند.

تمام پارامترها (انکودر، دیکودر، آستانه‌ها و وزن‌های LISTA) به صورت همزمان آموزش داده می‌شوند.

تابع هزینه در SC-VAE

$$\mathcal{L} = \mathbb{E}_{q_\phi(z|x)}[\log p_\theta(x|z)] - D_{\text{KL}}(q_\phi(z|x) \| p(z)) + \lambda \|z\|_1.$$

مزایای بازنمایی تنک :

- تفسیرپذیرتر: هر داده تنها چند ویژگی را فعال می‌کند و تفسیر هر ویژگی راحت‌خواهد بود؛
- استفاده بهتر از ظرفیت فضای نهان: برخلاف VAE کلاسیک که بسیاری از ابعاد نهان غیرفعال می‌مانند، در اینجا ابعاد خاصی برای هر نمونه واقعاً فعال‌اند و مدل از ظرفیت فضای نهان استفاده کامل‌تری دارد.
- کاهش posterior collapse: به دلیل قید تنکی، مدل مجبور است ویژگی‌های متمایز را در مؤلفه‌های خاص z ذخیره کند و نمی‌تواند تمام اطلاعات را در دیکودر پنهان کند.
- فضای نهان شبیه گسسته بودار z هنوز پیوسته است، اما چون بیشتر درایه‌ها صفرند، رفتار آن شبیه انتخاب چند گُد محدود است (گویی از کدبُک گسسته انتخاب می‌شود).
- robust تر: کدهای تنک اغلب بازنمایی‌های فشرده و مقاوم به نویز تولید می‌کنند.