Tutorial:
Sparse Variational Dropout

Wu Hyun Shin
MLAI, KAIST
7. 24. 2019.

진행방식

- 실제 Variational Dropout을 위한 코드 구현은 간단
    - 다른 수업에서 했던 모델링 + Dropout layer
    - BNN 학습을 위한 전체적 코드 구조는 두번째 시간과 유사
- 왜 이렇게 하고, 어떻게 해야하는지 원리를 이해하는 것이 더 중요
    - 수학적 이해 및 공식 유도가 다소 요구됨
    - 실제 주요 공식은 코드 한 줄로 구현
- 수업목표
    - 수학적 디테일을 모두 이해하지 못하더라도, 논리적 흐름을 파악하는 것이 목표
    - 이론 수업에서 보다는 더 자세한 이해
    - ~~코드를 보고 실제 어떻게 구현되는지 이해~~

읽어야 할 논문?

Binary Dropout (**BD**)

- Improving neural networks by preventing co-adaptation of feature detectors. Hinton et al. arXiv:1207.0508. 2012. 4002
- Dropout: a simple way to prevent neural networks from overfitting. Srivastava et al. JMLR 2014. 13126

Gaussian Dropout (**GD**)

- Fast dropout training. Wang et al. ICML 2013. 249

Variational Dropout (**VD**)

- Variational Dropout and the Local Reparameterization Trick. Kingma et al. NIPS 2015. 326

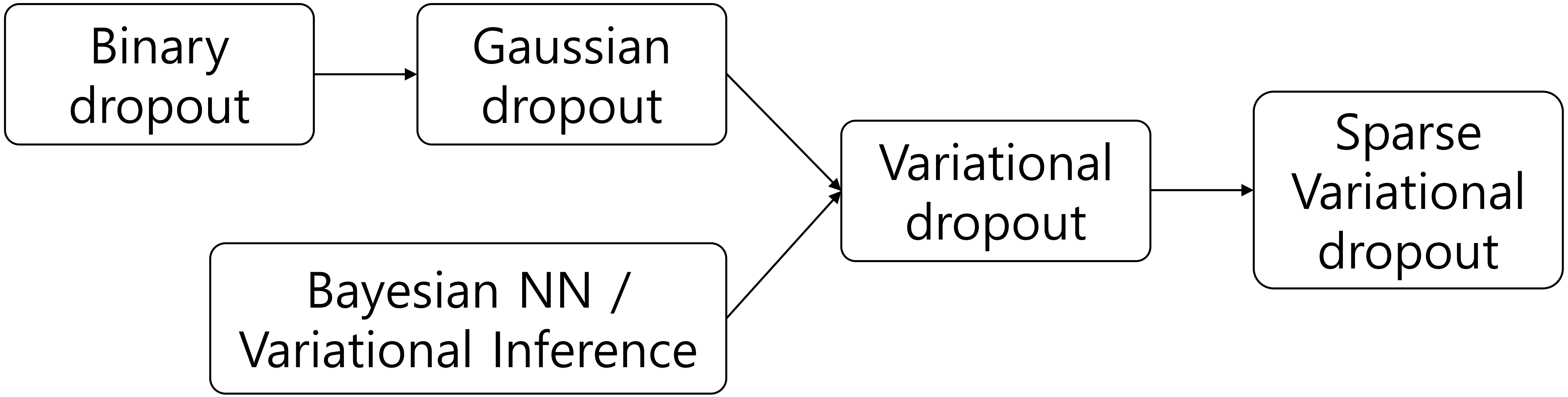
Sparse Variational Dropout (**Sparse VD**) ← Final goal!

- Variational Dropout Sparsifies Deep Neural Networks. Molchanov et al. ICML 2017. 148

→ 해당 논문들의 내용에서 차례차례 building block을 확보

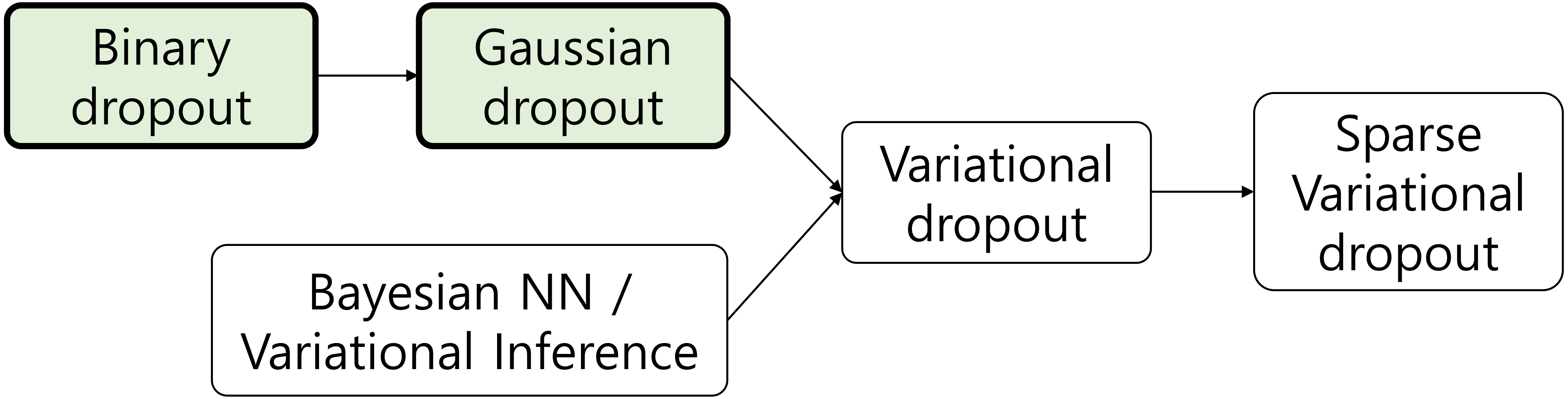
→ 그 building block들을 조립하여 최종 논문 이해

Big Picture

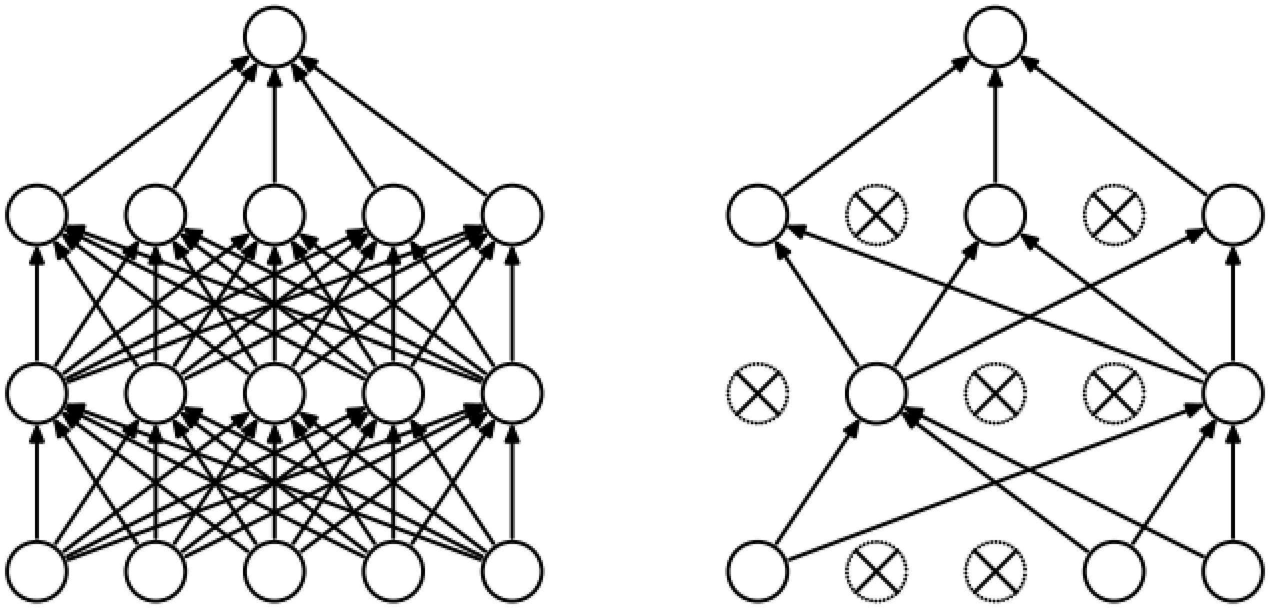


Binary dropout
Gaussian dropout
Bayesian NN / Variational Inference
Variational dropout
Sparse Variational dropout

Big Picture


Binary dropout
Gaussian dropout
Bayesian NN / Variational Inference
Variational dropout
Sparse Variational dropout

BD를 GD로 일반화

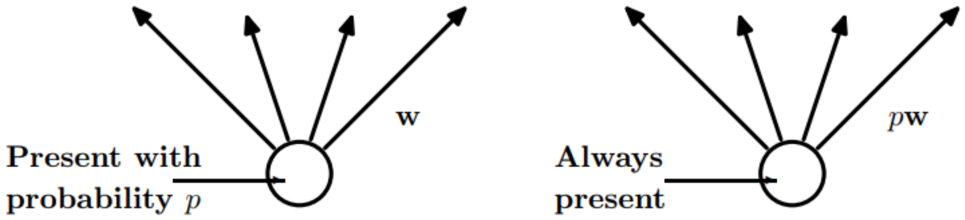


(a) Standard Neural Net (b) After applying dropout.

- Binary Dropout?
  - 우리가 잘 알고 있는 그 dropout
    - **p**의 확률로 **retain**
    - **1-p**의 확률로 **drop**
      - 반대로 표기하기도 함
  - Multiplicative Bernoulli Noise
    - $h_i^{new} = h_i^{old} * \boldsymbol{r_b}$
    - $p(\boldsymbol{r_b}) = \begin{cases} p & \text{if } k = 1, \\ q = 1 - p & \text{if } k = 0. \end{cases}$

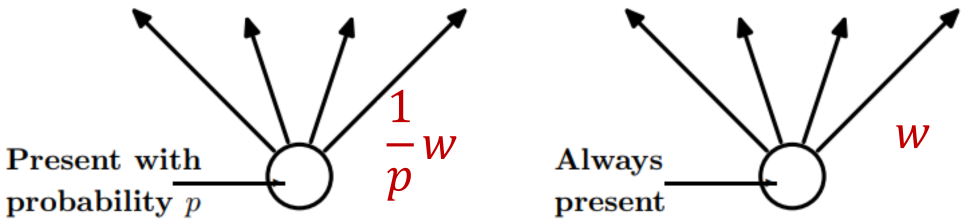
BD를 GD로 일반화

$$f(k;p)=\begin{cases} p & \text{if } k=1,\\ q=1-p & \text{if } k=0.\end{cases}$$



(a) At training time (b) At test time

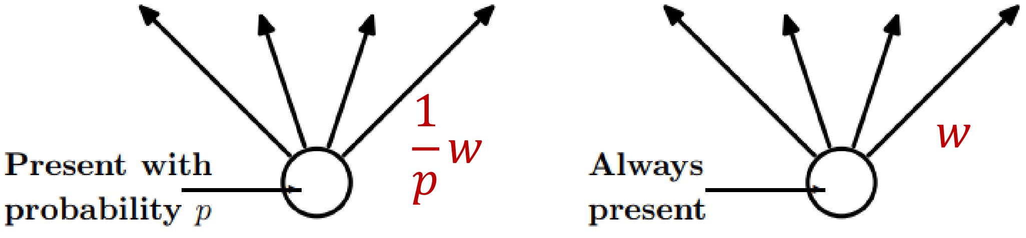
$$f(k;p)=\begin{cases} p & \text{if } k=1/p,\\ q=1-p & \text{if } k=0.\end{cases}$$



(a) At training time (b) At test time

- **학습**과 **테스트** 시의 차이
  - 두 가지 상황, 같은 효과
  - PyTorch에서는 두번째 케이스로 구현되어 있음.
  - Test time에 특별한 조치가 없다는 점에서 더 편리
  - 앞으로 두번째 케이스를 전제!

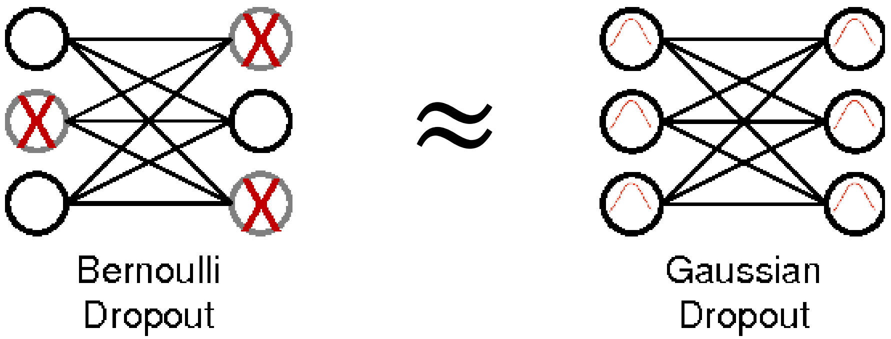
BD를 GD로 일반화



(a) At training time (b) At test time

- 두번째 케이스를 살펴보자.
- Bernoulli random variable r_b
  - 평균? $\sum \boldsymbol{xp(x)}$
    - $E[r_b] = \frac{1}{p} \cdot \Pr\left(r_b = \frac{1}{p}\right) + 0 \cdot \Pr(r_b = 0) = \frac{1}{p} \cdot p + 0 \cdot (1-p) = \mathbf{1}$
  - 분산? $\boldsymbol{E[r_b^2] - E[r_b]^2}$
    - $E[r_b^2] = \left(\frac{1}{p}\right)^2 \cdot p + 0^2 \cdot (1-p) = \frac{1}{p}$
    - $Var[r_b] = E[r_b^2] - E[r_b]^2 = \frac{1}{p} - 1^2 = \boldsymbol{\frac{1-p}{p}}$

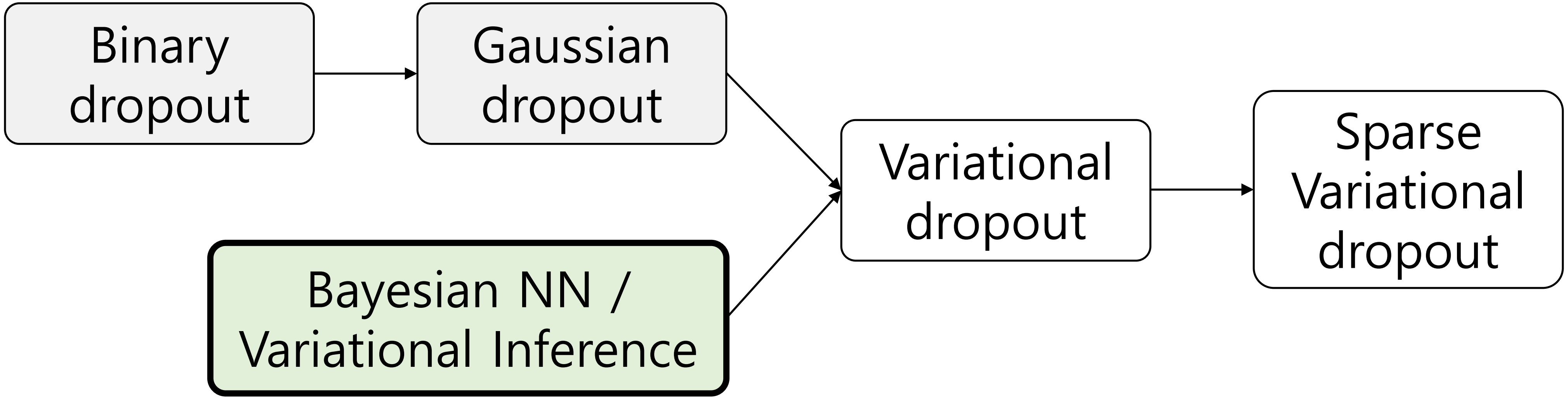
BD를 GD로 일반화



- 같은 평균과 분산을 갖는 Gaussian random variable r_g은?
  - $\mu = 1, \sigma = \sqrt{\frac{1-p}{p}}$
  - $r_g \sim \mathrm{N}(\mu, \sigma^2) \; = \; N\left(\mathbf{1}, \frac{\mathbf{1-p}}{\boldsymbol{p}}\right)$
- 새로운 파라미터 $\alpha = \frac{1-p}{p}$를 도입
  - $N(1, \alpha)$ ← 앞으로 계속 보게 될 형태!

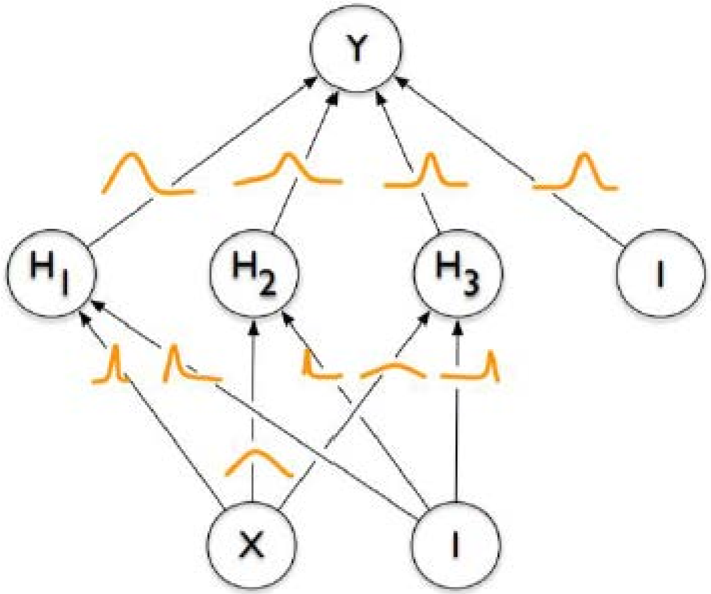
- Multiplicative Gaussian Noise
  - $h_i^{new} = h_i^{old} * r_g$
  - $r_g \sim N(1, \alpha)$ $(\alpha = \frac{1-p}{p})$

Big Picture



Binary dropout
Gaussian dropout
Bayesian NN / Variational Inference
Variational dropout
Sparse Variational dropout

Recap: Bayesian Neural Networks



- **BNN**이란?
  - Weight의 **분포**를 학습하는 네트워크

- 어떻게?
  - Bayes' theorem을 이용

- $p(\theta|\mathcal{D}) = \dfrac{p(\mathcal{D}|\theta)p(\theta)}{p(\mathcal{D})}$, $Posterior = \dfrac{Likelihood * Prior}{Evidence}$

- 그런데 문제가 있다.
  - 분모를 계산할 수 없음.

    $P(\mathcal{D}) = \int_{\theta} P(X|\theta)p(\theta)d\theta$

- 해결방법?
  - 직접 구할 수 없다면 **근사**하자.
  - 우리가 쓸 방법: Variational Inference

Recap: Variational Inference

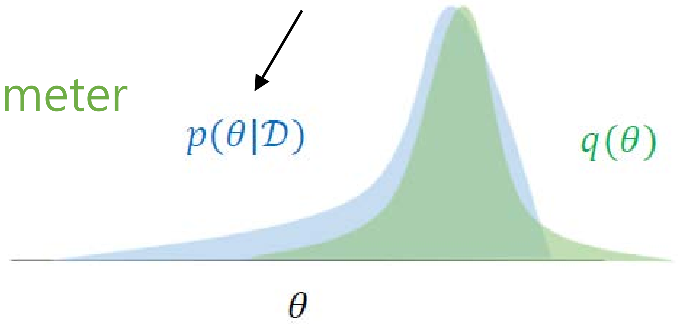
- **Variational Inference**란?
  - 우리의 posterior $p(\theta|D)$를 근사하는 기법
- 어떻게?
  - 우리가 쉽게 알 수 있는 분포를 설정하고: $q_\phi(\theta)$
  - 이 분포를 $p(\theta|D)$와 가깝게 만들자!

Variational distribution

Variational parameter

- 가까움의 기준?
  - **KL Divergence** $D_{\mathrm{KL}}(P \parallel Q) = \sum_{x \in \mathcal{X}} P(x) \log\left(\frac{P(x)}{Q(x)}\right)$
- *우리가 풀어야할 문제?*
  - *두 분포의 거리를 줄이는 문제*
  - $q_\phi(\theta) = \underset{\phi}{\operatorname{argmin}}\, KL[q_\phi(\theta)||p(\theta|D)]$
  - Inference → optimization problem

Posterior distribution

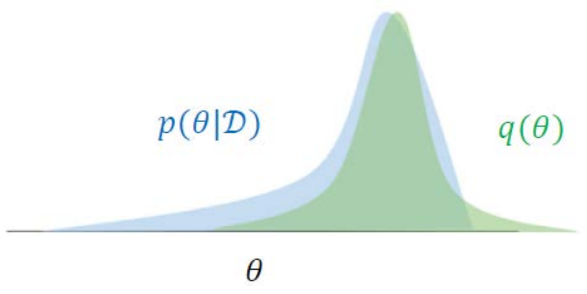


Recap: Variational Inference

- 유도를 해보면?
  - $KL[q_\phi(\theta)||p(\theta|D)] + L(?) = \log p(D)$

상수

- 이제 $L(?)$를 maximize하면 되는 문제로 치환!



- $L(?)$의 실체?
  - $L(?) = \int q_\phi(\theta)\log p(D|\theta)d\theta - KL[q_\phi(\theta)||p(\theta)]$
  - 직관적 해석: Expected Log-likelihood + KL regularization
  - ELBO(Evidence lower bound)라고 불림.
    - 왜? $\log p(\mathrm{D}) \geq L(?)$

- 결론: ELBO를 maximize하자!

Recap: Variational Inference

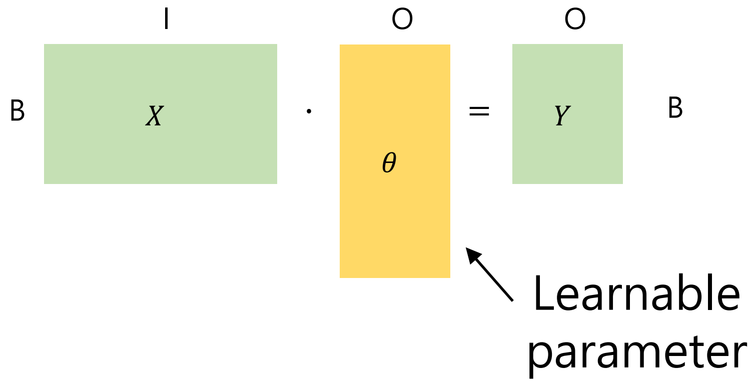
- 그래서 **어떻게 구현**?

- 상황을 **가정**해보자.
    - 일반적인 classification 태스크 / FC네트워크 & single 레이어
    - Weight가 Gaussian $N(0, I)$를 따를 것이 라는 사전(prior) 믿음
    - 자연스럽게 weight의 사후 확률도 Gaussian으로 모델링
    - 데이터에 대한 적절한 사후(posterior) 확률을 학습

    - Weight 학습의 기대효과?
        - 우리의 사전 믿음을 기반으로 하되, (min KL term)
        - 데이터를 잘 표현하는 적절한 사후 확률분포를 학습 (min NLL term)

Recap: Variational Inference

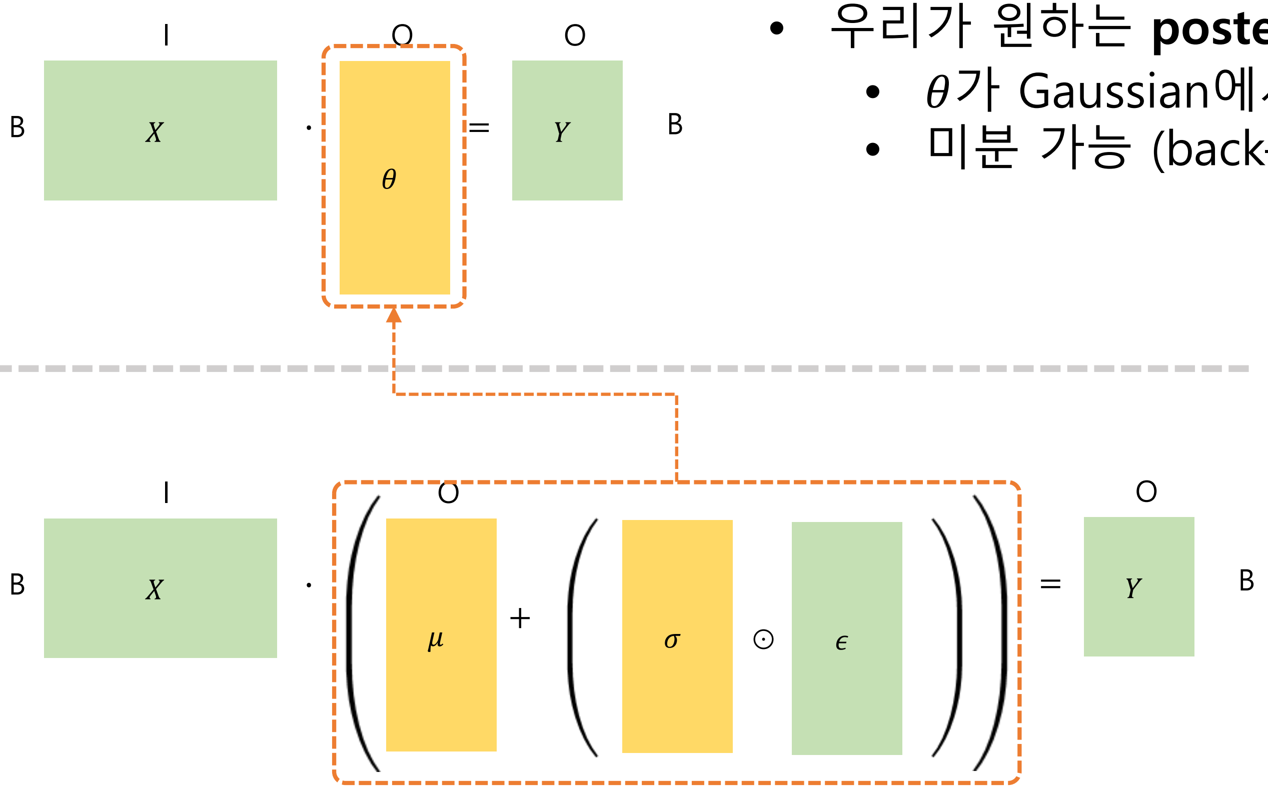
- 그래서 **어떻게 구현**?



- 우리가 원하는 **posterior $\boldsymbol{q_\phi(\theta)}$** :
  - θ가 Gaussian에서 샘플링: $\theta \sim \mathrm{N}(\mu, \sigma^2)$
  - 미분 가능 (back-propagation 위해)

Recap: Variational Inference

- 그래서 **어떻게 구현**?



- 우리가 원하는 **posterior $\boldsymbol{q_{\phi}(\theta)}$** :
  - θ가 Gaussian에서 샘플링: $\theta \sim \mathrm{N}(\mu, \sigma^2)$
  - 미분 가능 (back-propagation 위해)

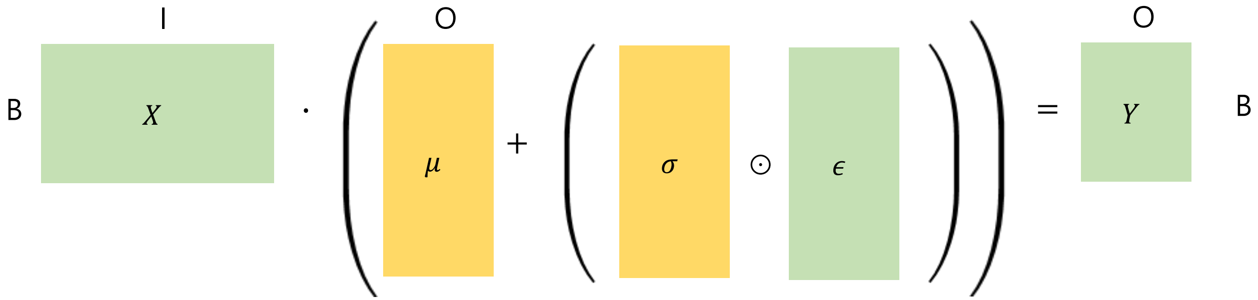
- **Reparametrization Trick**(RT)
  - $\theta \sim \mathrm{q}_{\phi}(\theta) = \mathrm{N}(\mu, \sigma^2)$

  $\rightarrow \theta = f(\phi, \epsilon),\ \epsilon \sim p(\epsilon)$

  $\rightarrow \theta = \mu + \sigma \odot \epsilon\ ,\ \ \epsilon \sim (0, I)$

Recap: Variational Inference

- 그래서 **어떻게 구현**?



- 이렇게 모델링한 뒤,
- ELBO에 대하여 기존에 하던 것과 동일하게 **minibatch-based** training하면 끝!
  - $\phi = \{\mu, \sigma\}$ 일 때,
  - $\underset{\phi}{\operatorname{argmax}} \int q_\phi(\theta) \log p(D|\theta) d\theta - KL[q_\phi(\theta) || p(\theta)]$
  - $\approx \underset{\phi}{\operatorname{argmax}} \boxed{\frac{N}{M} \sum_{i=1}^{M} \log p\left(y^i \middle| x^i, f(\phi, \epsilon^i)\right)} - \boxed{KL[q_\phi(\theta) || p(\theta)]}$

$N(0, I)$

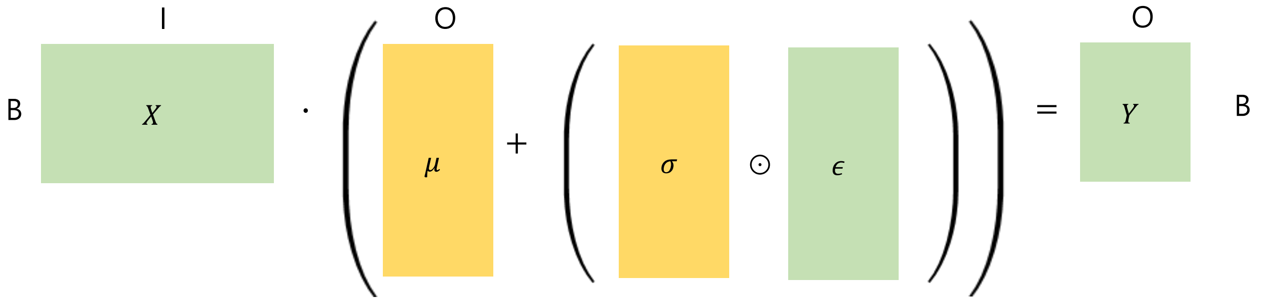
Minibatch-based
MC approximation

보통 Analytic하게 계산

- 지금까지 한 것:
  - 미분가능한 파이프라인을 만듦(RT)으로써 minibatch 기반 학습을 가능케 함.
  - 이러한 방법을 **Stochastic Gradient Variational Bayes(SGVB)**라고 함.

Recap: Variational Inference

- 그래서 **어떻게 구현**?



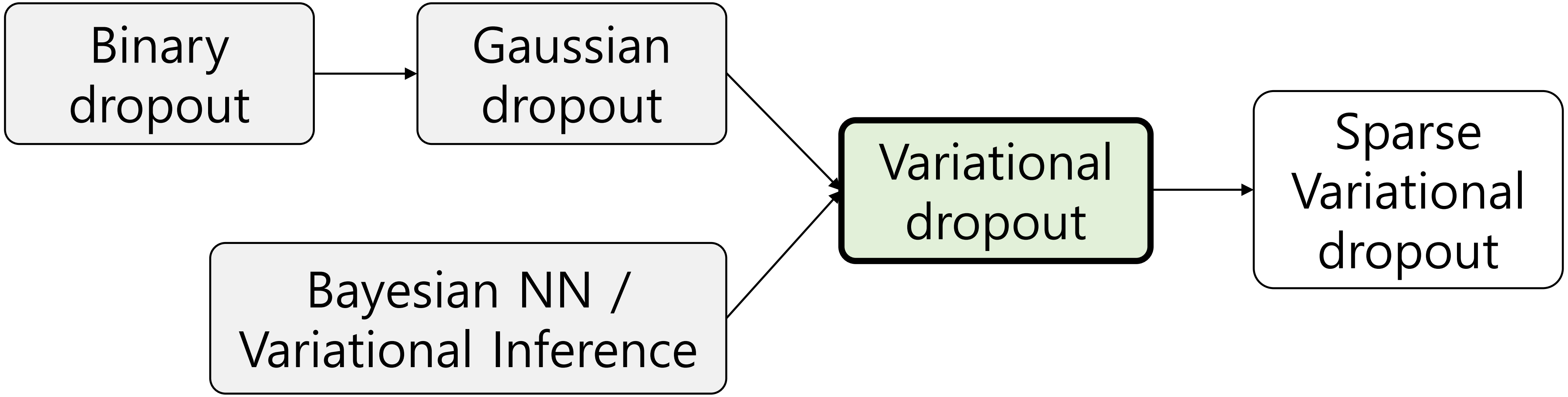
- $\underset{\phi}{\operatorname{argmax}} \frac{N}{M} \sum_{i=1}^{M} \log p\left(y^i \middle| x^i, f(\phi, \epsilon^i)\right) - KL[q_\phi(\theta) || p(\theta)]$

- 해석해보면?
  - **첫번째 항**: 기존 Non-Bayesian과 똑같은 분류 성능 최적화
    - 단, weight에 randomness가 추가된 상황
  - **두번째 항**: prior $N(0, I)$와의 KL divergence.
    - 우리의 초기 믿음에서 너무 벗어나지 않도록 regularize.

Recap: Variational Inference

- 마지막으로 생각해볼 것들
  - $\underset{\phi}{\operatorname{argmax}} \int q_\phi(\theta) \log p(D|\theta) d\theta - KL[q_\phi(\theta)||p(\theta)]$
  - SGVB에서의 **Gradient variance**?
    - randomness가 개입되므로 gradient의 variance가 크다!
      - Source: **data** distribution $\mathrm{p}(D)$ / **noise** distribution $\mathrm{p}(\epsilon)$
    - Variance를 줄이는 것은 학습 안정화에 매우 중요한 요소
  - 두번째 항(KL term)은 가능한 경우, closed-form으로 직접 계산.
    - 계산 가능한데 근사할 필요는 없음
      - 불필요한 gradient variance가 더 증가

Big Picture


Binary dropout
Gaussian dropout
Bayesian NN / Variational Inference
Variational dropout
Sparse Variational dropout

VD: Variational Dropout

- **전체 개요**

  - **SGVB**를 효율적으로 개선하려는 테크닉을 제안 ← Part 1
    - **Local Reparametrization Trick**(LRT)
      - Gradient variance를 낮추고 더 쉽고 빠르게 계산

  - Dropout과 variational method의 연결점을 탐색 ← Part 2
    - GD + Varaitional method + LRT = **Variational Dropout**
      - 이를 통해 얻을 수 있는 것?
        - *발전* : GD의 성능 향상 (with LRT)
        - *확장* : 학습 가능한 dropout rate.
        - *재해석* : GD를 Bayesian network로 보았을 때 prior는 무엇일까?

VD-Part 1: Local Reparameterization Trick

- **Local Reparameterization Trick(LRT)**에 대해 알아보자.
  - **목적**? SGVB를 효율적으로 개선
    - SGVB의 **gradient variance**를 줄이자!
  - **먼저 해야할 일**? Gradient variance의 요인을 분석
    - 수학적 decomposition을 통해 분석

VD-Part 1: Local Reparameterization Trick

- **SGVB**를 다시 살펴보자.

$$\int q_\phi(\theta) \log p(D|\theta) d\theta$$

  - ELBO: $\sum_{(x,y \in D)} E_{q_\phi(\theta)}[\log p(y|x,\theta)] - KL[q_\phi(\theta)||p(\theta)]$
  - 두번째 KL term은 closed-form으로 계산이 가능하다고 가정.
  - Minibatch approximation:
    - $\sum_{(x,y \in D)} E_{q_\phi(\theta)}[\log p(y|x,\theta)] \approx \frac{N}{M} \sum_{i=1}^{M} \boldsymbol{\log p\left(y^i \middle| x^i, f(\phi, \epsilon^i)\right)}$

M : Minibatch size N: Data size

  - 즉, SGVB는 $\frac{N}{M} \sum_{i=1}^{M} \boldsymbol{L_i}$의 꼴로 나타낼 수 있음.
    - $\boldsymbol{L_i}$는 $\boldsymbol{i}$ **번째 데이터에 대한 likelihood**를 나타냄을 기억하자.

VD-Part 1: Local Reparameterization Trick

- 그렇다면 $\frac{N}{M}\sum_{i=1}^{M} L_i$의 **variance**는?
  - $Var\left[\frac{N}{M}\sum_{i=1}^{M} L_i\right]$ $=\frac{N^2}{M^2}\left(\sum_{i=1}^{M}\mathrm{Var}\left[L_i\right]+2\sum_{i=1}^{M}\sum_{j=i+1}^{M}\mathrm{Cov}\left[L_i,L_j\right]\right)$

    $=N^2\left(\frac{1}{M}\mathrm{Var}\left[L_i\right]+\frac{M-1}{M}\mathrm{Cov}\left[L_i,L_j\right]\right),$

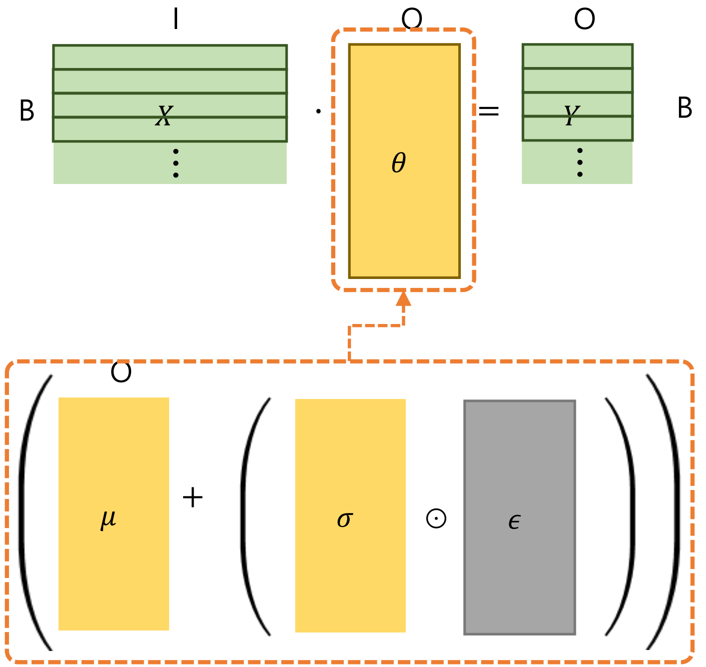
    $\boxed{\mathrm{Var}\left(\sum_{i=1}^{N} X_i\right)=\sum_{i,j=1}^{N}\mathrm{Cov}(X_i,X_j)=\sum_{i=1}^{N}\mathrm{Var}(X_i)+\sum_{i\neq j}\mathrm{Cov}(X_i,X_j)}$

- 알 수 있는 사실?
  - Variance의 영향은 minibatch size M을 키워서 줄일 수 있음.
  - 반면, **Covariance**의 경우는 불가능!

- 우리가 원하는 것?
  - $\mathrm{Cov}\left[L_i,L_j\right]=0$
  - In Korean: Minibatch 안의 데이터들의 log-likelihood를 **종속성을 제거**

VD-Part 1: Local Reparameterization Trick

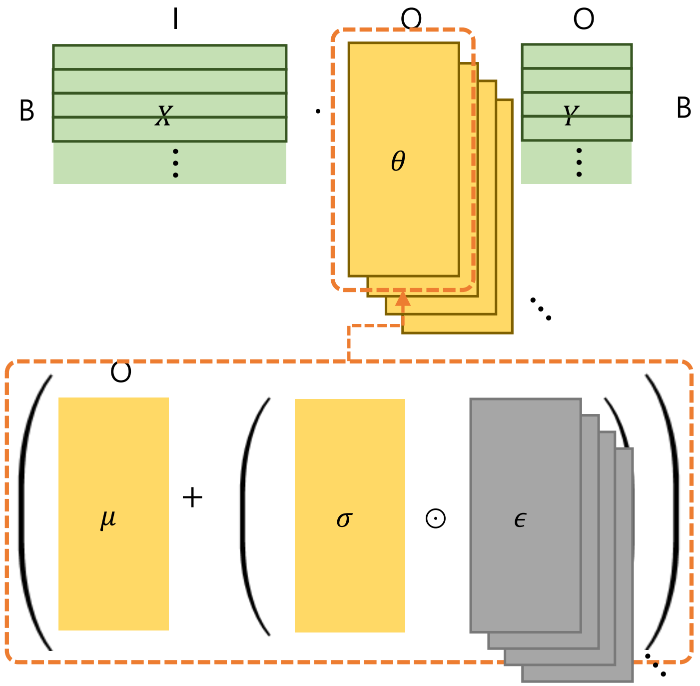
- **데이터 포인트 사이의 종속성 제거**



- **기존 상황**:
  - 배치 안의 모든 데이터 $x_i \in X$가 하나의 weight matrix θ를 공유
  - 당연히 θ는 **하나의** $\epsilon \sim N(0, I)$에 dependent
  - 모든 데이터가 같은 노이즈를 공유하므로 서로 dependent한 상황
    - $\mathrm{Cov}\left[L_i, L_j\right] \neq 0$

VD-Part 1: Local Reparameterization Trick

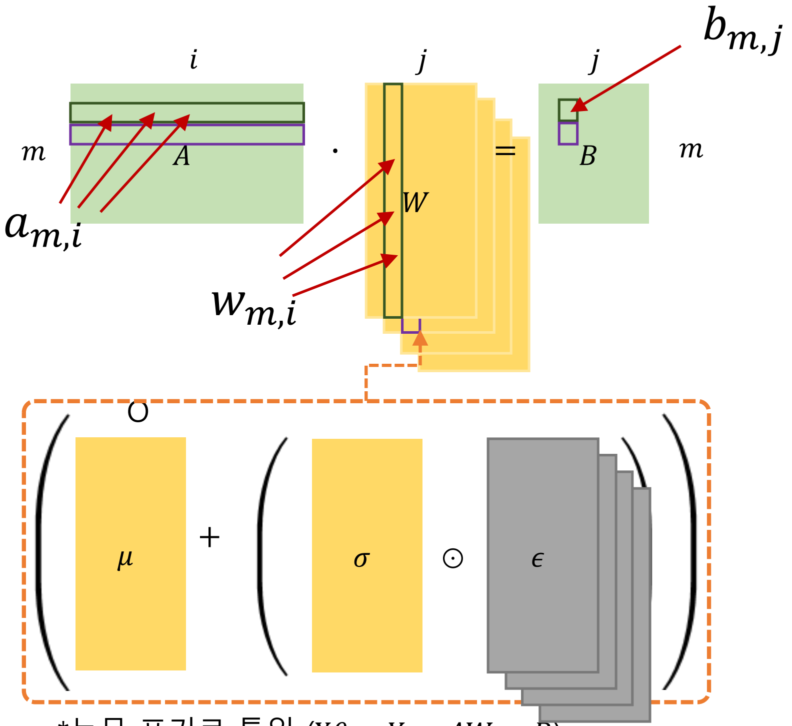
- **데이터 포인트 사이의 종속성 제거**



- **해결 방법**?
  - 배치 안의 모든 데이터 $x_i \in X$가 각기 다른 weight matrix θ_i를 공유
  - θ_i는 **각기 다른** $\epsilon_i \sim N(0, I)$에 dependent
  - 데이터 사이의 dependency가 제거됨
    - $Cov[L_i, L_j] = 0$
- **문제점**?
  - 계산 비용 증가 (샘플링은 비싼 편)
  - 병렬화가 불가능

VD-Part 1: Local Reparameterization Trick

- **데이터 포인트 사이의 종속성 제거**



*논문 표기로 통일 ($X\theta = Y \rightarrow AW = B$)

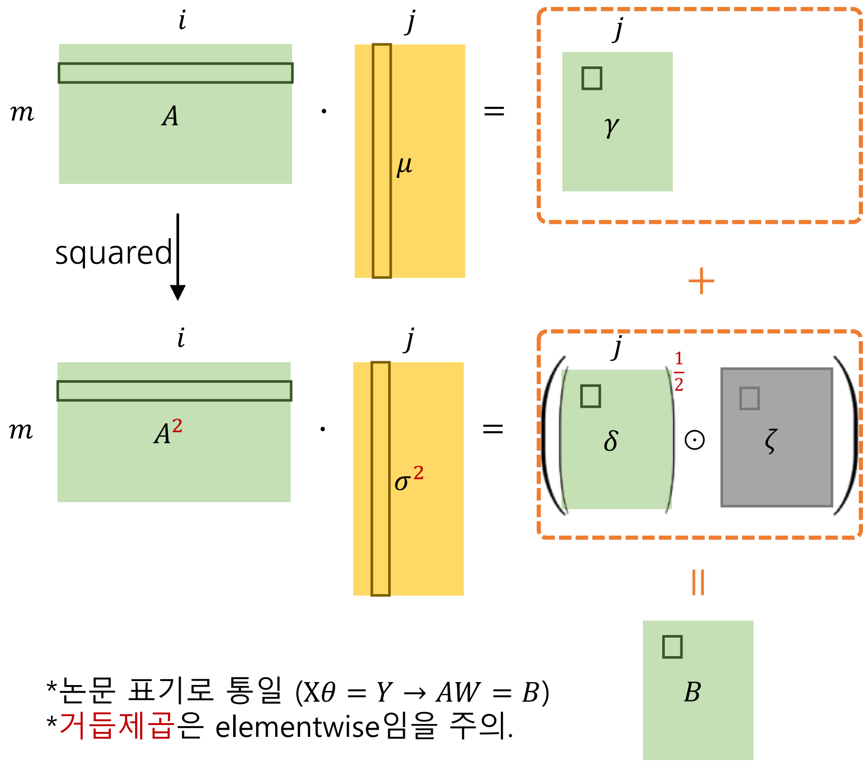
- **더 나은 방법**?

$$X \sim N(\mu_X, \sigma_X^2)$$
$$Y \sim N(\mu_Y, \sigma_Y^2)$$
$$Z = X + Y,$$
$$Z \sim N(\mu_X + \mu_Y, \sigma_X^2 + \sigma_Y^2)$$

  - $w_{i,j}$가 Gaussian이면, $b_{m,j}$도 Gaussian.
    - If X,Y independent and normally distributed, X+Y is also normally distributed.

VD-Part 1: Local Reparameterization Trick

- **데이터 포인트 사이의 종속성 제거**



*논문 표기로 통일 ($X\theta = Y \rightarrow AW = B$)
*거듭제곱은 elementwise임을 주의.

$$X \sim N(\mu_X, \sigma_X^2)$$
$$Y \sim N(\mu_Y, \sigma_Y^2)$$
$$Z = X + Y,$$
$$Z \sim N(\mu_X + \mu_Y, \sigma_X^2 + \sigma_Y^2)$$

- 더 나은 방법?
  - $w_{i,j}$가 Gaussian이면, $b_{m,j}$도 Gaussian.
    - If X,Y independent and normally distributed, X+Y is also normally distributed.
  - **그렇다면 B에서 바로 샘플링해보자. → LRT!**

$$q_\phi(w_{i,j}) = N(\mu_{i,j}, \sigma_{i,j}^2)\ \forall w_{i,j} \in \mathbf{W} \implies q_\phi(b_{m,j}|\mathbf{A}) = N(\gamma_{m,j}, \delta_{m,j}),$$

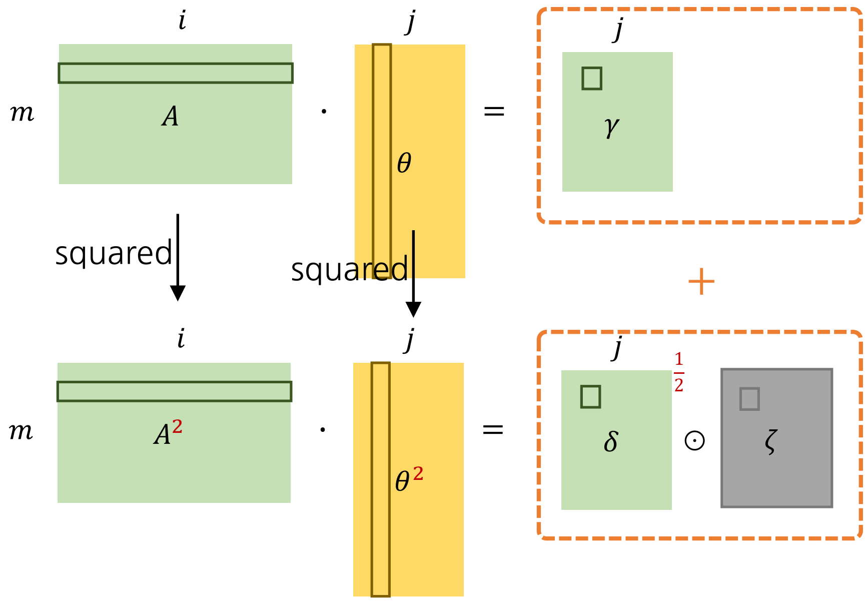
$$\gamma_{m,j} = \sum_{i=1}^{1000} a_{m,i}\mu_{i,j}, \quad \text{and} \quad \delta_{m,j} = \sum_{i=1}^{1000} a_{m,i}^2 \sigma_{i,j}^2.$$

$$b_{m,j} = \gamma_{m,j} + \sqrt{\delta_{m,j}}\zeta_{m,j}, \text{ with } \zeta_{m,j} \sim N(0,1).$$

- 글로벌 noise → 로컬 noise
- weight noise → activation noise

VD-Part 1: Local Reparameterization Trick

- **데이터 포인트 사이의 종속성 제거**



$$X \sim N(\mu_X, \sigma_X^2)$$
$$Y \sim N(\mu_Y, \sigma_Y^2)$$
$$Z = X + Y,$$
$$Z \sim N(\mu_X + \mu_Y, \sigma_X^2 + \sigma_Y^2)$$

- 더 나은 방법?
  - $w_{i,j}$가 Gaussian이면, $b_{m,j}$도 Gaussian.
    - If X,Y independent and normally distributed, X+Y is also normally distributed.
  - **그렇다면 B에서 바로 샘플링해보자. → LRT!**

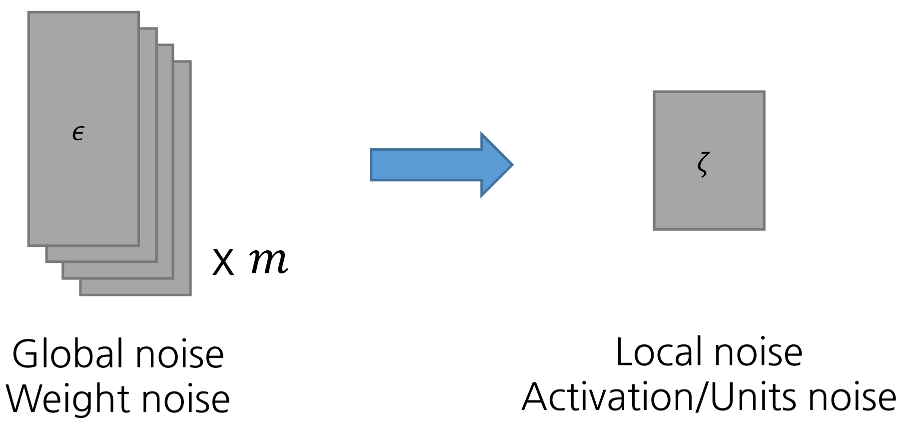
$$q_\phi(w_{i,j}) = N(\mu_{i,j}, \sigma_{i,j}^2)\ \forall w_{i,j} \in \mathbf{W} \implies q_\phi(b_{m,j}|\mathbf{A}) = N(\gamma_{m,j}, \delta_{m,j}),$$
$$\gamma_{m,j} = \sum_{i=1}^{1000} a_{m,i}\mu_{i,j}, \quad \text{and} \quad \delta_{m,j} = \sum_{i=1}^{1000} a_{m,i}^2 \sigma_{i,j}^2.$$
$$b_{m,j} = \gamma_{m,j} + \sqrt{\delta_{m,j}}\zeta_{m,j}, \text{ with } \zeta_{m,j} \sim N(0,1).$$

- 글로벌 noise → 로컬 noise
- weight noise → activation noise

*논문 표기로 통일 ($X\theta = Y \rightarrow AW = B$)
*거듭제곱은 elementwise임을 주의.

VD-Part 1: Local Reparameterization Trick

- LRT의 **장점**?
  - $\{L_i\}$ 서로 독립적 → $\mathrm{Cov}[L_i, L_j] = 0$ → 낮은 gradient variance!
    - 빠른 학습 (in terms of *optimization step*)
  - 더 작은 샘플링 횟수 & 병렬화 가능한 연산
    - 빠른 학습 (in terms of *wall-clock time*)



VD-Part 2

- 지금까지..
  - SGVB에서 사용 가능한 효율적인 테크닉: **LRT**

- 이제부터..
  - Dropout을 variational method로 재해석!
    - **Varational dropout** (with LRT)

VD-Part 2: Reinterpretation of GD as VD

- **Dropout과 variational method의 관계**

Gaussian dropout

- Multiplicative noise in units
- $B = (A \odot \xi)\theta,\ \xi \sim N(1, \alpha)$

- LRT:
  - $\mathrm{b}_{m,j} = \sum_i a_{m,i}\xi_{m,i}\theta_{i,j}$
  - $E[b_{m,j}] = \sum_i a_{m,i}\theta_{i,j}E[\xi_{m,i}] = \sum_i a_{m,i}\theta_{i,j}$
  - $Var[b_{m,j}] = \sum_i a_{m,i}^2\theta_{i,j}^2 Var[\xi_{m,i}] = \alpha \sum_i a_{m,i}^2\theta_{i,j}^2$

If $\mathrm{Cov}(X_i, X_j) = 0\ ,\ \forall\,(i \neq j)$

then $\mathrm{Var}\left(\sum_{i=1}^{N} X_i\right) = \sum_{i=1}^{N} \mathrm{Var}(X_i)$

재해석 $\Rightarrow$

Variational Bayesian Inference

- Noise in weights
- $B = AW,\ \mathrm{W} \sim N(\theta, \alpha\theta^2)$

mean　　Multiplicative noise

- LRT:
  - $b_{m,j} = \sum_i a_{m,i} w_{i,j}$
  - $E[b_{m,j}] = \sum_i a_{m,i}E[w_{i,j}] = \sum_i a_{m,i}\theta_{i,j}$
  - $Var[b_{m,j}] = \sum_i a_{m,i}^2 Var[w_{i,j}] = \alpha \sum_i a_{m,i}^2\theta_{i,j}^2$

*직접적 증명은 논문 appendix B 참조.

VD-Part 2: Reinterpretation of GD as VD

- Gaussian dropout과 Variational method의 **유사성**의 의미?

  - **Variational Dropout**을 제안! (드디어)
    - 이를 통해 얻을 수 있는 이점
      - LRT를 이용해 Gaussian drop보다 안정적 학습 가능.
      - 이제 $\boldsymbol{\alpha}$를 variational parameter로 놓고 **학습**할 수 있음.
        - $\min_{\phi} KL[q_{\phi}(W)||p(W|D)]$에서 $\phi = \{\underbrace{\theta}_{\text{mean}}, \underbrace{\alpha}_{\text{Multiplicative noise}}\}$
      - 또다른 해석 가능: **Prior**는 뭘까?

  - Binary dropout ≈ Gaussian Dropout ≈ Variational Dropout
    - Binary dropout도 central limit theorem에 의해 근사 가능
      - 참조: Fast dropout training. Wang et al. ICML 2013.

VD-Part 2: Reinterpretation of GD as VD

- **그렇다면 prior는?** $p(\theta|\mathcal{D}) = \frac{p(\mathcal{D}|\theta)\boxed{p(\theta)}}{p(\mathcal{D})}$
  - Gaussian dropout과의 consistency를 고려(~~꼭 필요한가?~~)
    - droprate α는 상수 / weight θ에 대해서만 학습 $\phi = \{\theta, \cancel{\alpha}\}$
    - $ELBO$에서 expected log-likelihood term에 대해서만 학습
      - $\mathrm{W} \sim N(\theta, \alpha\theta^2)$
      - $\max_{\theta} \sum_{(x,y \in D)} E_{q(W|\theta,\alpha)}[\log p(y|x,W)] \boxed{- KL[q(W|\theta,\alpha)||p(W)]}$

Has to be Independent to θ (no effect), when α is fixed.

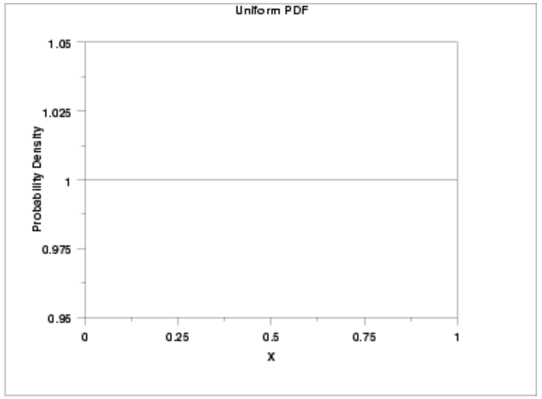
- 이러한 조건을 만족하는 prior?
  - **Log-uniform prior**

$$p(\log|w_{ij}|) = \text{const}$$

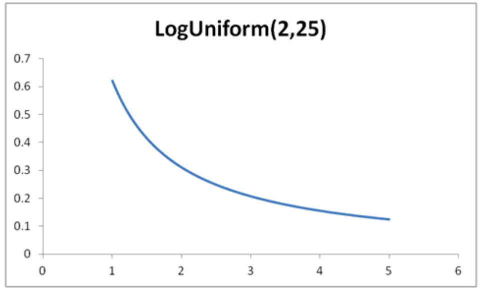
VD-Part 2: Reinterpretation of GD as VD

- **Log-uniform** distribution의 성질

$$p(\log|w_{ij}|) = \text{const} \quad \Leftrightarrow \quad p(|w_{ij}|) \propto \frac{1}{|w_{ij}|}$$



$\log(X)$



X

- Zero 근처에서 높은 density → weight에 적용할 경우 sparsity 유도

*MDL(Maximum Description Length) 관점으로 해석:
weight를 floating point format으로 변환 시 log-uniform distribution을 따를 경우,
중요한 digit의 숫자를 최적으로 하여 압축 가능. weight의 크기를 제한하는 효과. (논문참조)

VD-Part 2: Reinterpretation of GD as VD

- **Negative KL term**을 **closed-form**으로 구할 수 있을까?
  - $\max_{\phi} \sum_{(x,y \in D)} E_{q_{\phi(W)}}[\log p(y|x, W)] \boxed{- KL[q_\phi(W)||p(W)]}$
  - Appendix C를 믿는다면,

$$D_{KL}(q(W \mid \theta, \alpha) \| p(W)) = \sum_{ij} D_{KL}(q(w_{ij} \mid \theta_{ij}, \alpha_{ij}) \| p(w_{ij}))$$

Analytically intractable

$$-D_{KL}(q(w_{ij} \mid \theta_{ij}, \alpha_{ij}) \| p(w_{ij})) = \frac{1}{2} \log \alpha_{ij} - \boxed{\mathbb{E}_{\epsilon \sim \mathcal{N}(1, \alpha_{ij})} \log |\epsilon|} + \mathrm{C} \quad \leftarrow \theta\text{에 independent}$$

- 결과적으로 $\mathbb{E}_{\epsilon \sim \mathcal{N}(1, \alpha_{ij})} \log |\epsilon|$ 항 때문에 **계산 불가**!
  - 그러나, 모든 α에 대해 쉽게 **샘플링 가능**

VD-Part 2: Reinterpretation of GD as VD

- 계산할 수 없다면 많이 샘플링해서 **근사**하자!
  - (1) 3차 다항식으로 근사:

Intractable

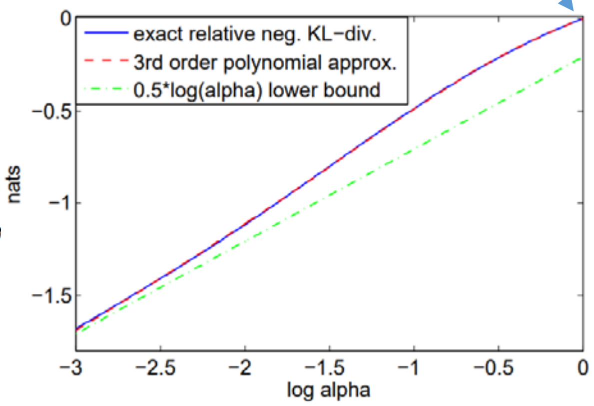
$$-D_{KL}(q(w_{ij} \mid \theta_{ij}, \alpha_{ij}) \,\|\, p(w_{ij})) = \frac{1}{2}\log\alpha_{ij} - \boxed{\mathbb{E}_{\epsilon\sim\mathcal{N}(1,\alpha_{ij})}\log|\epsilon|} + \mathrm{C}$$

Approximated

$$\approx \text{constant} + 0.5\log(\alpha) + \boxed{c_1\alpha + c_2\alpha^2 + c_3\alpha^3},$$

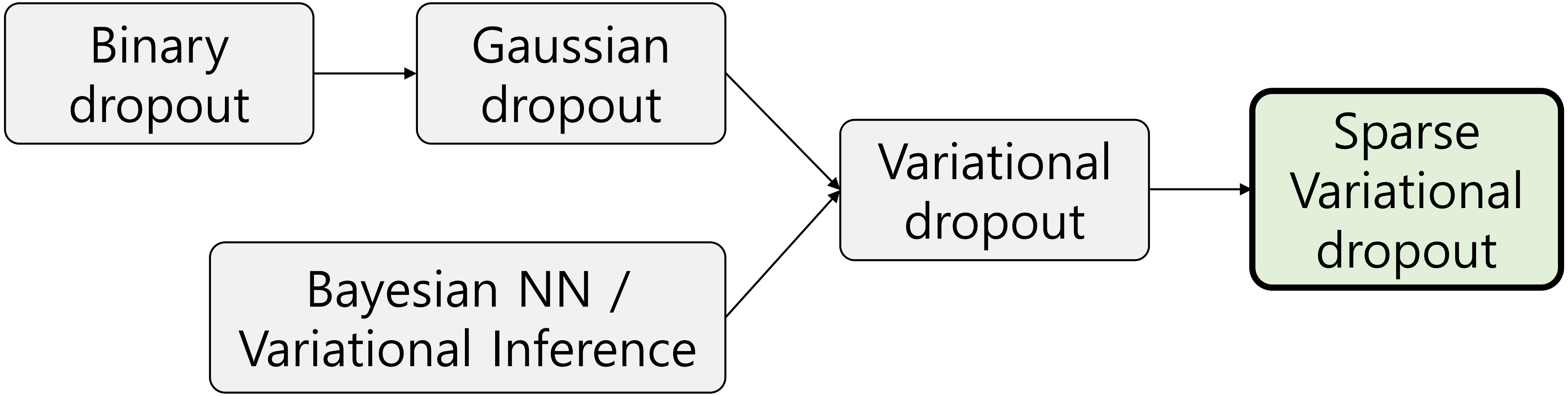
$$c_1 = 1.16145124, \quad c_2 = -1.50204118, \quad c_3 = 0.58629921.$$

$\log\alpha = 0$ 일 때,
KL $= 0$ 이 되도록 C 설정



  - (2) 더 간단한 lower bound:
    - $\mathbb{E}_{\epsilon\sim\mathcal{N}(1,\alpha_{ij})}\log|\epsilon| \geq 0$ 이므로, $-D_{KL}[q_\phi(w_i)|p(w_i)] \geq \text{constant} + 0.5\log(\alpha)$
  - **제한**: $\alpha \leq 1$, $p \leq 0.5$ $\left(\alpha = \frac{1-p}{p}\right)$ → 완전히 drop $(p = 1)$불가능!
    - 이유? α가 클때, **large gradient variance** → local minima

Big Picture


Binary dropout
Gaussian dropout
Bayesian NN / Variational Inference
Variational dropout
Sparse Variational dropout

Sparse VD:

- VD에서 **무엇이 추가** 되었나?
  - 기본전제: α에서 $\alpha_{i,j}$로 확장 (weight별 독립적인 droprate 학습)
  - **Additive Noise Reparameterization (1)**
    - Gradient variance를 줄이기 위한 새로운 테크닉
  - **Approximation of the KL Divergence (2)**
    - α의 범위에 제한(e.g. $\alpha \leq 1$) 없이 학습
    - $\alpha \to \infty$ / $p \to 1$: 항상 drop / 제거 가능
  - 기타 등등
- 결과적으로?
  - 매우 **sparse**한 network 학습
    - Bayesian pruning으로의 연결

Sparse VD: Additive Noise Reparametrization

- VD에서의 문제점: $q(w_{ij}\,|\,\theta_{ij},\alpha) = \mathcal{N}(w_{ij}\,|\,\theta_{ij},\alpha\theta_{ij}^2)$
  - Droprate $\boldsymbol{\alpha}$**가 큰 영역**에서 $\boldsymbol{\theta}$에 대한 **gradient variance**가 **매우 큼**

$$\frac{\partial \mathcal{L}^{SGVB}}{\partial \theta_{ij}} \uparrow = \frac{\partial \mathcal{L}^{SGVB}}{\partial w_{ij}} \cdot \frac{\partial w_{ij}}{\partial \theta_{ij}} \uparrow$$

$$w_{ij} = \theta_{ij}(1 + \sqrt{\alpha_{ij}} \cdot \epsilon_{ij}),$$

$$\frac{\partial w_{ij}}{\partial \theta_{ij}} \uparrow = 1 + \sqrt{\alpha_{ij}} \uparrow \cdot \epsilon_{ij},$$

$$\epsilon_{ij} \sim \mathcal{N}(0,1)$$

- 해결방법:
  - 새로운 변수 도입

$$\theta_{ij} + \theta_{ij} \cdot \sqrt{\alpha_{ij}} \cdot \epsilon_{ij}$$

New variable

$$w_{ij} = \theta_{ij}(1 + \sqrt{\alpha_{ij}} \cdot \epsilon_{ij}) = \theta_{ij} + \sigma_{ij} \cdot \epsilon_{ij}$$

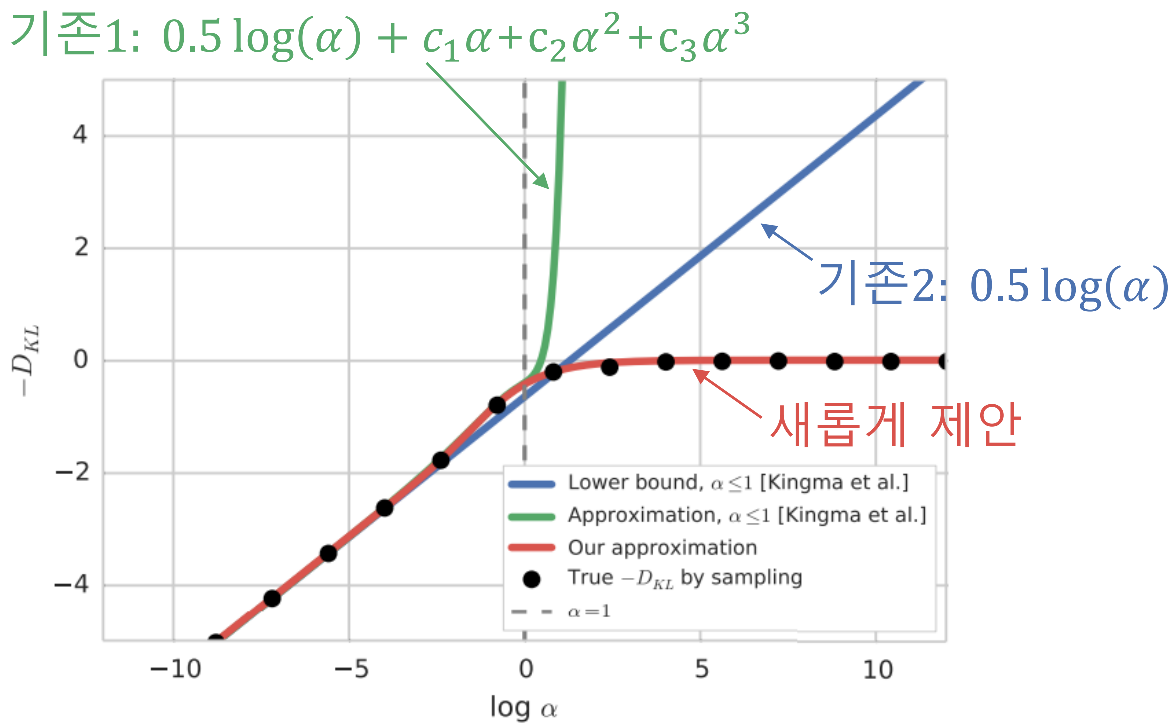
$$\frac{\partial w_{ij}}{\partial \theta_{ij}} = 1, \qquad \epsilon_{ij} \sim \mathcal{N}(0,1)$$

α가 궁금하면 θ와의 관계에서 역으로 계산.
σ값 자체는 θ와 무관!

  - 실제로는 α대신에 $\boldsymbol{\log \sigma^2}$를 학습 → 학습 안정
    - 네트워크 output 자체를 $\boldsymbol{\log \sigma^2}$값으로 해석
    - $w = \theta + \exp(\boldsymbol{\log \sigma^2}) \cdot \epsilon$

Sparse VD: Approximation of the KL term

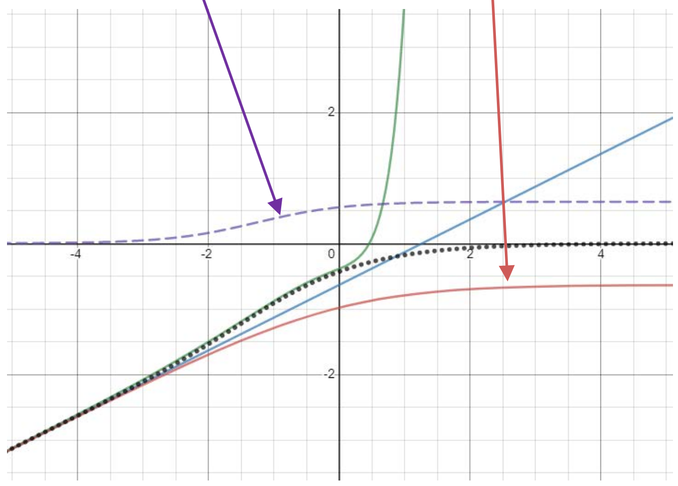
- KL term approximation: **모든 α 영역에서 더 정확한 근사**



$$-D_{KL}(q(w_{ij}\,|\,\theta_{ij},\alpha_{ij})\,\|\,p(w_{ij})) \approx$$

$$\approx k_1\sigma(k_2 + k_3\log\alpha_{ij}) - 0.5\log(1+\alpha_{ij}^{-1}) + \mathrm{C}$$

$$k_1 = 0.63576 \quad k_2 = 1.87320 \quad k_3 = 1.48695$$



- 사실상 Heuristic한 방법을 사용
  - $-0.5\log(1+\alpha^{-1})$를 먼저 설정
  - 남은 차이가 sigmoid와 비슷하다는 점에 착안하여 근사 함수 디자인

Sparse VD: Sparsity

- α 를 droprate p 관점에서 본다면?
  - $\boldsymbol{\alpha} \rightarrow \infty$: $p \rightarrow 1$ 이므로 항상 drop / 제거 가능

- α 를 w_{ij} 에 더해지는 multiplicative noise관점에서 본다면?
  - $\boldsymbol{\alpha} \rightarrow \infty$: 무한대의 noise / 완전한 random / 상쇄시켜야 함 $\boldsymbol{\theta_{ij}} \rightarrow \mathbf{0}$

$$q(w_{ij} \mid \theta_{ij}, \alpha) = \mathcal{N}(w_{ij} \mid \theta_{ij}, \alpha\theta_{ij}^2).$$

Sparse VD: For convolution layers

- Sparse VD for FC layers:

$$b_{mj} \sim \mathcal{N}(\gamma_{mj}, \delta_{mj})$$

$$\gamma_{mj} = \sum_{i=1}^{I} a_{mi}\theta_{ij}, \quad \delta_{mj} = \alpha_{ij} \sum_{i=1}^{I} a_{mi}^2\,\theta_{ij}^2 = \sum_{i=1}^{I} a_{mi}^2\,\sigma_{ij}^2$$

By additive reparam. trick

$$\alpha_{ij}\theta_{ij}^2 = \sigma_{ij}^2$$

- Sparse VD for Conv layers:

$$\mathrm{vec}(b_{mk}) \sim \mathcal{N}(\gamma_{mk}, \delta_{mk})$$

$$\gamma_{mk} = \mathrm{vec}(A_m * \theta_k), \quad \delta_{mk} = \mathrm{diag}(\mathrm{vec}(A_m^2 * \sigma_k^2))$$

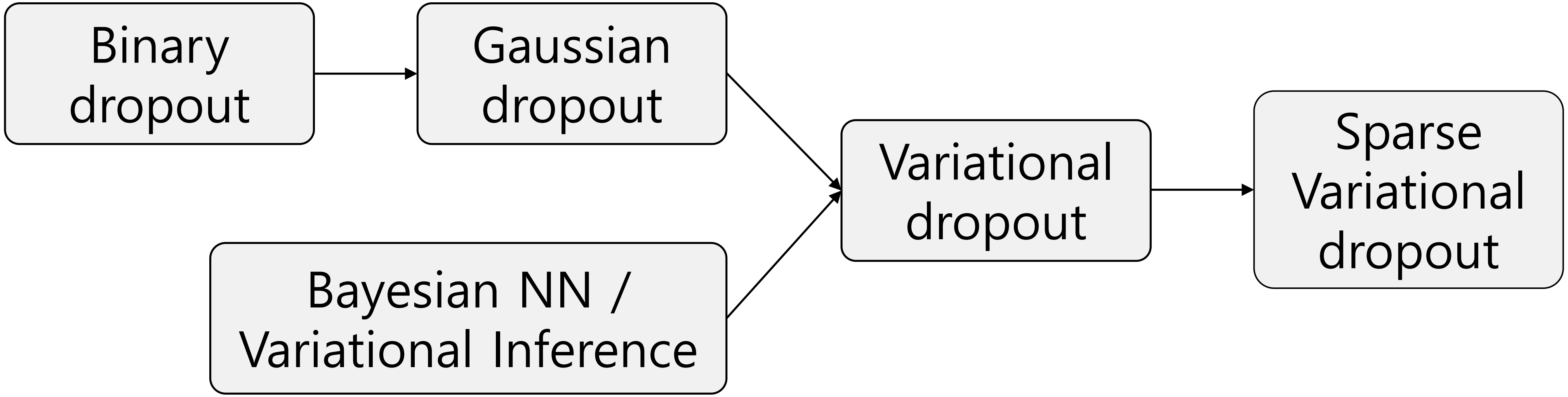
Sparse VD: Empirical Observations

- Test time에는?
  - 실제 완전히 드랍되는 경우는 없으므로 $\boldsymbol{\alpha}$에 대한 thresholding이 필요

- Expected log likelihood term보다 KL term이 지배적인 경우가 더 일반적
  - 초반에 급격하게 높은 sparsity로 수렴하여 학습에 실패
  - 해결책? Pretraining or Scaling term 사용

- Prior 없이도 학습이 가능
  - 사전 지식없이 데이터만 보고 variance를 fitting시킬 수 있음

Big Picture


Binary dropout
Gaussian dropout
Bayesian NN / Variational Inference
Variational dropout
Sparse Variational dropout

Implementation

논문저자 공개 (Theano, Lasagne)
- https://github.com/senya-ashukha/variational-dropout-sparsifies-dnn

다른 논문에서 활용 (TF / 저자 참여 / by Google AI research / 바로 사용하기 어려움)
- https://github.com/google-research/google-research/tree/master/state_of_sparsity

개인 repository (TF / 미검증)
- https://github.com/cjratcliff/variational-dropout (in progress)
- https://github.com/BayesWatch/tf-variational-dropout (incomplete)

Any questions?