

# Прикладная статистика в машинном обучении

## Лекция 12

### Генеративные модели

И. К. Козлов  
(Мехмат МГУ)

2022

Нельзя обять необъятное

Сегодня мы поговорим про [генеративные модели](#).

Это гигантская тема. Мы буквально одним глазком посмотрим на некоторые модели.



Рис.: Не надейтесь, даже столько не узнаем

# NF и Diffusion Models

Мы обсудим Auto-Encoders и скажем пару слов про GAN.

Есть много других популярных моделей, например

- **Normalizing Flows**

<https://lilianweng.github.io/posts/2018-10-13-flow-models/>

- **Diffusion Models**

<https://lilianweng.github.io/lil-log/2021/07/11/diffusion-models.html>

# AE

## 1 Autoencoder (AE)

- Модификации AE

## 2 VAE

- Обучение VAE
  - KL-дивергенция
  - ELBO
- Reparameterization Trick
- Пример VAE
- Недостатки VAE

## 3 VAE-GAN

## 4 Эпилог

## Векторизация

Самые лучшие данные для компьютера — это векторы (или массивы).

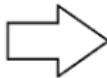
Нейронки — по сути эффективный способ [векторизации](#) сложных (однородных) данных, таких как изображения, текст, речь.

Картина котика

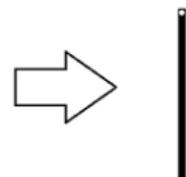
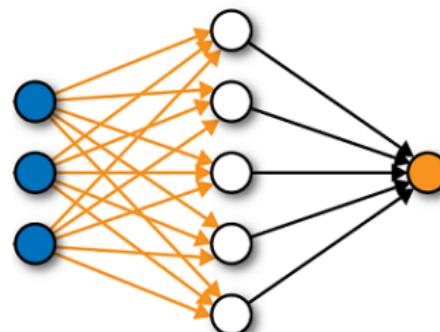
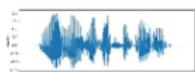


Текст про котика

*"A cat  
will be  
your friend  
but never  
your slave"*



Речь котика



Вектор-представление

Neural Network

## Сжатие без потерь

Отображение в вектор — по сути “сжатие информации”.

По идеи мы хотим сжать информацию как можно компактней,  
но при этом **не потерять ничего нужного**.

**Q:** А как это проверить — что мы “не потеряли ничего нужного”?

## Сжатие без потерь

Отображение в вектор — по сути “сжатие информации”.

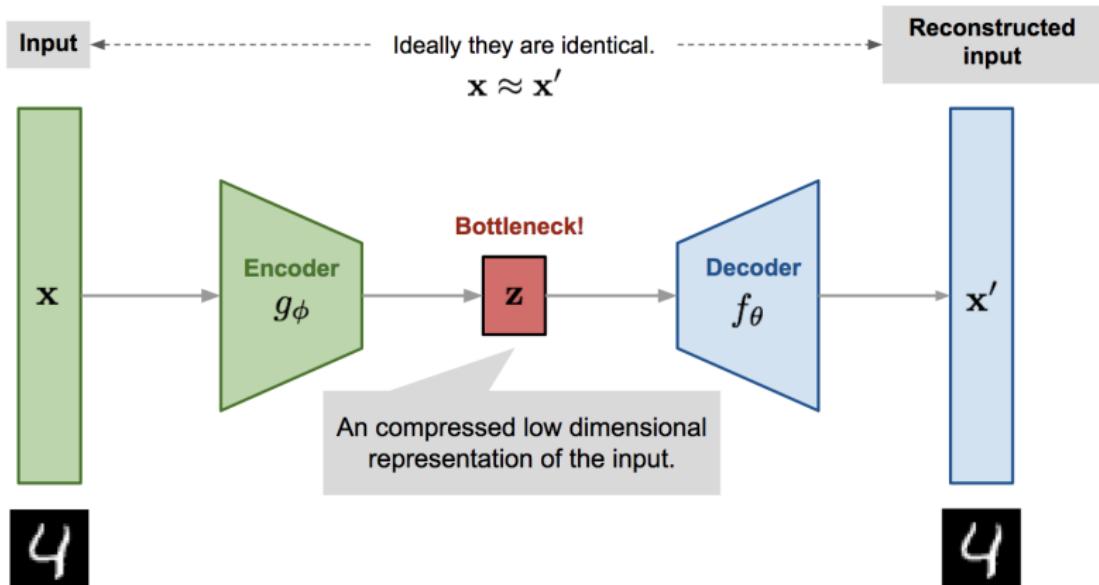
По идеи мы хотим сжать информацию как можно компактней,  
но при этом **не потерять ничего нужного**.

**Q:** А как это проверить — что мы “не потеряли ничего нужного”?

**A:** Мы не потеряли информацию, если мы **можем восстановить исходное изображение**.

# AutoEncoder

Так возникает идея автокодировщика (Autoencoder)



## AutoEncoder

Как нейронная сеть **автокодировщик** — это пара нейронных сетей:

- Энкодер  $f : x \rightarrow z$ ;
- Декодер  $g : z \rightarrow x'$ ,

которые обучаются, минимизируя выбранный лосс

$$L(x, g(f(x))).$$

## Пример AE

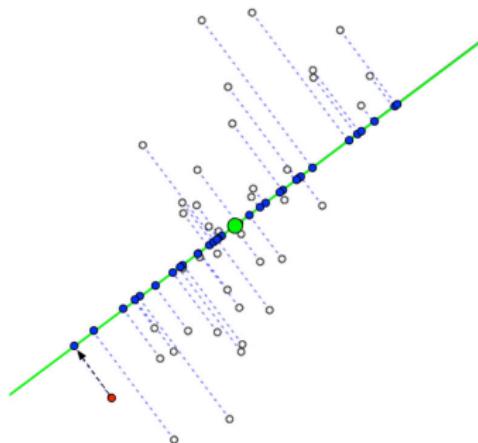
Q: Какое отображение выучит AE с

- MSE-лоссом и
- линейным декодером?

## Пример АЕ

А: Это PCA:

- образ — линейное пространство т.ч.
- сумма квадратов расстояний до образов точек минимальна.



## Литература

Про АЕ см. Главу 14

 Goodfellow C.M.  
*Pattern Recognition and Machine Learning.*

Путь к BERT начинается с циферек в MNIST

Настало время реализовать нашу первую нейронку:  
автоэнкодер для цифр из MNIST.

Откройте Jupyter-Notebook к семинару.



Рис.: Учимся считать. ☺

# Модификации AE

## 1 Autoencoder (AE)

- Модификации AE

## 2 VAE

- Обучение VAE
  - KL-дивергенция
  - ELBO
- Reparameterization Trick
- Пример VAE
- Недостатки VAE

## 3 VAE-GAN

## 4 Эпилог

## Когда памяти слишком много

Возможная проблема с Auto-Encoder:

Q: Пусть  $\dim z \geq \dim x$ . Что может выучить авто-энкодер?

## Когда памяти слишком много

Возможная проблема с Auto-Encoder:

**Q:** Пусть  $\dim z \geq \dim x$ . Что может выучить авто-энкодер?

**A:** Тождественное отображение

$$\text{id}(x) = x.$$

## Ключевые проблемы АЕ.

- ① **У латентного представления  $z$  нет никаких хороших свойств.**
- ② **Переобучение.** АЕ может заучить объекты  $x_i$ . Например, отображения

$$x_i \rightarrow i, \quad i \rightarrow x_i$$

дадут идеальный, но абсолютно бесполезный АЕ

$$\text{id}(x_i) = x_i.$$

Не знаем, как АЕ поведёт себя на других объектах  $x_{new} \neq x_i$ .

- ③ **Нельзя сэмплировать.**

## Модификации AE

### Стандартные модификации AE.

- ① Регуляризации для улучшения свойств  $z$  (**Sparse AE, Contractive AE**).
- ② Зашумление данных, чтобы избежать переобучения (**Denoising AE**)
- ③ Модификация для возможности сэмплирования (**Variational AE**).

## Модификации AE

### Стандартные модификации AE.

- ① Регуляризации для улучшения свойств  $z$  (**Sparse AE, Contractive AE**).
- ② Зашумление данных, чтобы избежать переобучения (**Denoising AE**)
- ③ Модификация для возможности сэмплирования (**Variational AE**).

2ая и 3ья идея — более практичны, 1ая — скорее факт истории.

## Sparse AE

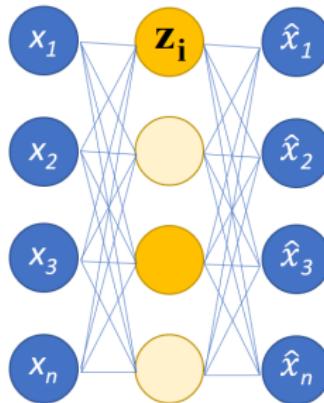
### Sparse AutoEncoder.

**Идея.** Чем разреженней представления  $z$ , чем дальше образы объектов друг от друга, тем лучше.

Можно выучить много фичей  $z_1, \dots, z_N$ .

Но для каждого объекта  $x_j$  требуем большинство  $z_i = 0$ .

AE активирует лишь “важнейшие нейроны”  $z_i$  для каждого объекта  $x_j$ .



## Sparse AE

### Sparse AutoEncoder.

На практике в лосс добавляется штраф на  $z$ :

$$L(x, x') + \Omega(z)$$

- Например,  $L_1$ -лосс  $\Omega(z) = \lambda \sum_i |z_i|$ ;
- Или  $KL$ -дивергенция, чтобы сделать вероятность  $z_i \neq 0$  близкой к малому  $p$ .

<https://lilianweng.github.io/posts/2018-08-12-vae/#sparse-autoencoder>

- Или можно явно занулить все  $z_i$  кроме ТОР-к.

## Contractive AE

### Contractive AutoEncoder.

**Идея.** Требуем, чтобы  $z_i$  не сильно менялись при малом шевелении  $x$ .

Добавляем в лосс регуляризацию:

$$L(x, x') + \lambda \sum_i \|\nabla_x z_i\|^2.$$

## Denoising AE

### Denoising AutoEncoder.

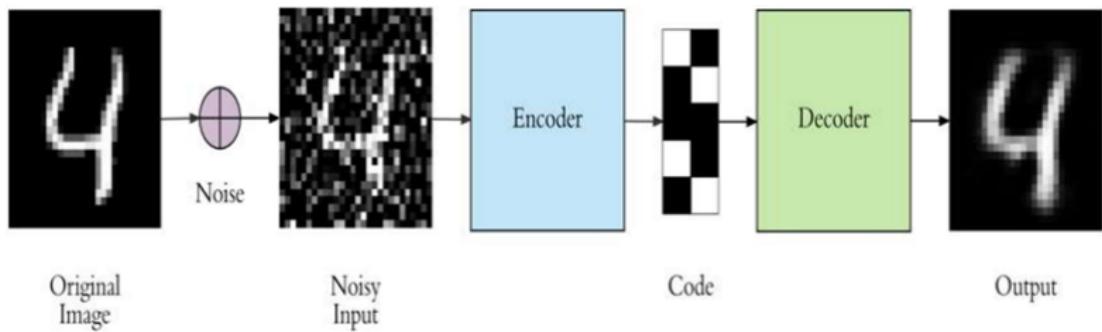
Идея. Зашумляем  $x$ , чтобы модель не зазубривала тупо объекты.

Добавляем к объектам шум  $x \rightarrow \hat{x}$ .

Требуем, чтобы АЕ правильно восстанавливал  $x$  по зашумлённому  $\hat{x}$ :

$$g(f(\hat{x})) \approx x.$$

Минимизируем лосс  $L(x, g(f(\hat{x})))$ .



# VAE

## 1 Autoencoder (AE)

- Модификации AE

## 2 VAE

- Обучение VAE
  - KL-дивергенция
  - ELBO
- Reparameterization Trick
- Пример VAE
- Недостатки VAE

## 3 VAE-GAN

## 4 Эпилог

# Variational AutoEncoder

Обсудим **вариационный автокодировщик** (VAE).

Про VAE и его модификации можно почитать в:

- Глава VAE в <https://ml-handbook.ru> (доступно ШАД).
- <https://lilianweng.github.io/posts/2018-08-12-vae/>
- Главу 20.10.3



Goodfellow C.M.

*Pattern Recognition and Machine Learning.*

Хотим генерить новые объекты

**Проблема.** Из AE неудобно сэмплировать.

**Q:** Откуда мы умеем сэмплировать?

Хотим генерить новые объекты

**Проблема.** Из АЕ неудобно сэмплировать.

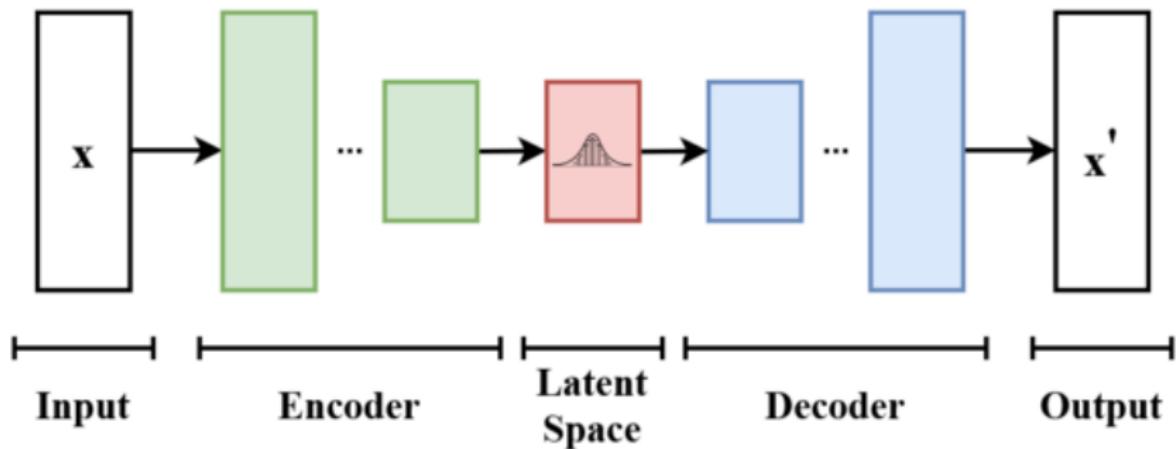
**Q:** Откуда мы умеем сэмплировать?

**A:** Из распределения  $p(x)$ .

# Variational AutoEncoder

## Вариационный автокодировщик (Variational Autoencoder)

Отличие от AE: на выходе энкодера и декодера — распределения.



VAE лишь внешне похож на AE

Несмотря на схожесть с AE, VAE — абсолютно “байесовский зверь” и скорее результат “параллельной эволюции”.

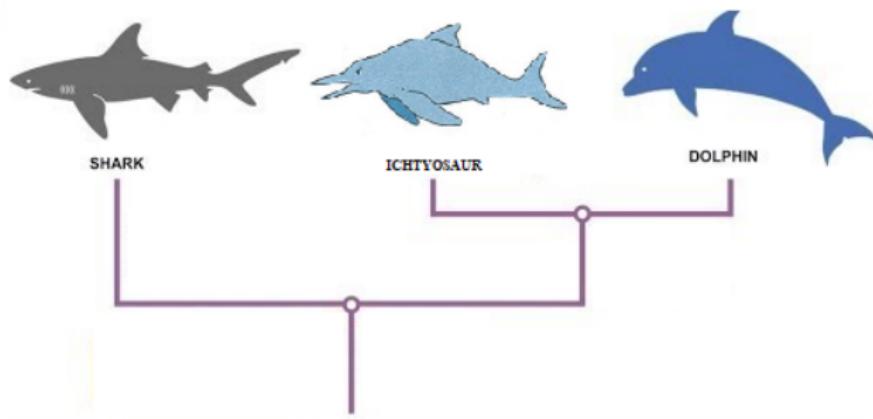


Рис.: Параллельная эволюция

## Как байесиане дошли до жизни такой?

Вспомним [модели с латентными переменными](#).

- $x$  — наблюдаемые переменные;
- $z$  — латентные переменные;
- $\theta$  — параметры модели.

Мы знаем  $x$ , не знаем  $z$  и ищем  $\theta$ .

Совместное распределение обозначим через  $p_\theta(x, z)$ .

## Процедура сэмплирования

Как сэмплировать объекты  $x$ ? По правилу произведения

$$p_{\theta}(x, z) = p_{\theta}(x | z)p_{\theta}(z).$$

## Процедура сэмплирования

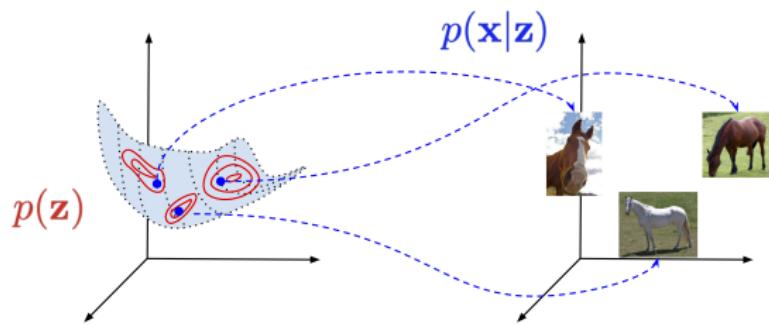
Как сэмплировать объекты  $x$ ? По правилу произведения

$$p_{\theta}(x, z) = p_{\theta}(x | z)p_{\theta}(z).$$

- Сэмплируем **латентный вектор**  $z$  из  $p_{\theta}(z)$ .

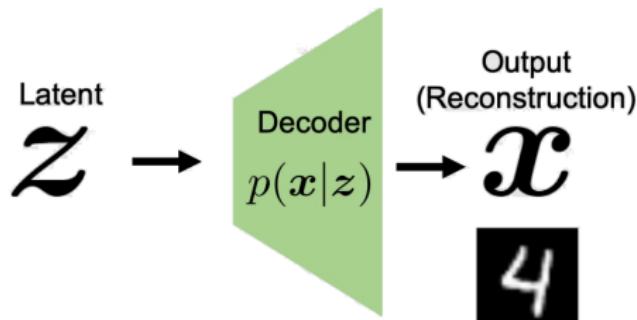
Неформально — мы фиксируем “факторы для генерации” (цвет, размер и т.д.)

- Сэмплируем **объекты**  $x$  из  $p_{\theta}(x | z)$ .



## Процедура сэмплирования

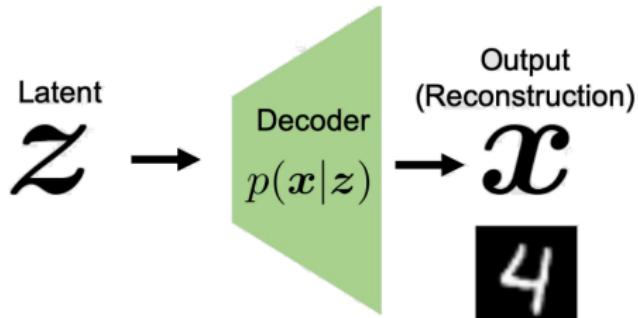
В VAE за сэмплирование отвечает декодер.



Q: Как найти параметр модели  $\theta$ ?

## Процедура сэмплирования

В VAE за сэмплирование отвечает декодер.



Q: Как найти параметр модели  $\theta$ ?

A: Естественная оценка — максимум правдоподобия на наблюдаемых данных:

$$\theta^* = \arg \max_{\theta} p_{\theta}(x)$$

## Маргинализация

Нам нужно вычислить  $p_\theta(x)$ . Это сложное распределение.

**Q:** Как перейти к более простому совместному распределению  $p_\theta(x, z)$ ?

**A:** Маргинализуем по  $z$ :

$$p_\theta(x) = \int p_\theta(x, z) dz = \int_{\mathbb{Z}^M} p_\theta(x|z)p_\theta(z) dz.$$

## Монте-Карло

Итак, нам нужно **посчитать матожидание**

$$p_{\theta}(x) = \int_{Z^M} p_{\theta}(x|z)p_{\theta}(z)dz = \mathbb{E}_{z \sim p_{\theta}(z)}[p_{\theta}(x|z)].$$

**Q:** Как можно оценить матожидание?

**A:** Методом Монте-Карло:

$$\mathbb{E}_{z \sim p_{\theta}(z)}[p_{\theta}(x|z)] \approx \frac{1}{K} \sum_k p_{\theta}(x|z_k),$$

где  $z_k$  сэмплируются из  $p_{\theta}(z)$ .

## Проклятие размерности

Q: В чём проблема с суммой

$$\mathbb{E}_{z \sim p_\theta(z)}[p_\theta(x|z)] \approx \frac{1}{K} \sum_k p_\theta(x|z_k)?$$

## Проклятие размерности

Q: В чём проблема с суммой

$$\mathbb{E}_{z \sim p_\theta(z)}[p_\theta(x|z)] \approx \frac{1}{K} \sum_k p_\theta(x|z_k)?$$

A: Проклятие размерности.

Нужно много сэмплов, чтобы покрыть пространство  $z$ .

При этом вклад почти всех  $z_k$  в  $p_\theta(x | z)$  — около 0.

## Encoder

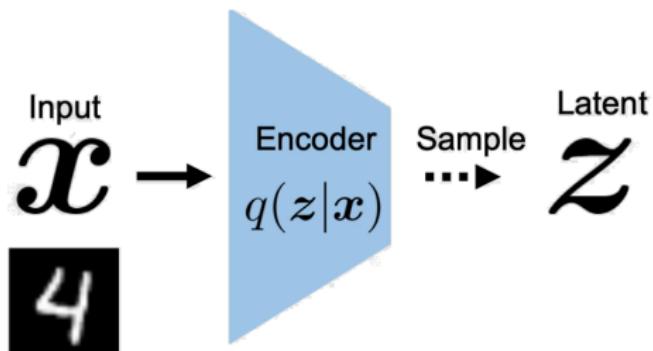
Идея. Для каждого  $x$  брать те  $z_k$ , где велико апостериорное распределение

$$p_\theta(z | x) \propto p_\theta(x|z)p_\theta(z).$$

Апостериорное распределение трудно вычислимо. Поэтому аппроксимируем его

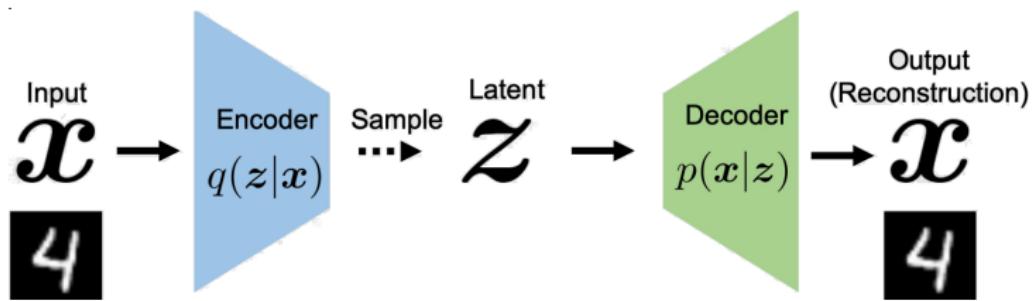
$$q_\phi(z | x) \approx p_\theta(z | x).$$

Это делает [энкодер](#).



## Схема VAE

Вот мы и получили схему VAE:



# Обучение VAE

## 1 Autoencoder (AE)

- Модификации AE

## 2 VAE

- Обучение VAE
  - KL-дивергенция
  - ELBO
- Reparameterization Trick
- Пример VAE
- Недостатки VAE

## 3 VAE-GAN

## 4 Эпилог

## Обучение нейронок

### Как обучать VAE?

Энкодер и декодер — это нейронные сети. Нужно найти их параметры  $\phi$  и  $\theta$ .

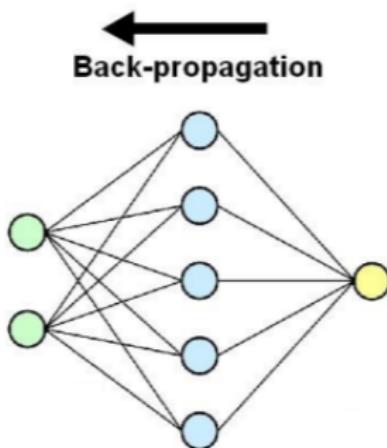
**Q:** Как находятся веса нейронных сетей?

## Как обучать VAE?

Энкодер и декодер — это нейронные сети. Нужно найти их параметры  $\phi$  и  $\theta$ .

**Q:** Как находятся веса нейронных сетей?

**A:** Градиентным спуском, оптимизируя функцию потерь  $\mathcal{L}$ .



## Функция потерь

Итак, нам нужно найти:

- ① адекватную задаче функцию потерь  $\mathcal{L}$ ,
- ② которую можно дифференцировать по  $\phi$  и  $\theta$ ,
- ③ и которую несложно посчитать.

# ELBO

В качестве  $\mathcal{L}$  возьмём [вариационную нижнюю оценку](#) (ELBO)

$$\mathcal{L}_{\theta, \phi}(x) = \log p_{\theta}(x) - \text{KL}(q_{\phi}(z|x) \parallel p_{\theta}(z|x))$$

с прошлой лекции по EM-алгоритму.

Напомним необходимые определения.

# KL-дивергенция

## 1 Autoencoder (AE)

- Модификации AE

## 2 VAE

- Обучение VAE
  - KL-дивергенция
  - ELBO
- Reparameterization Trick
- Пример VAE
- Недостатки VAE

## 3 VAE-GAN

## 4 Эпилог

## KL-дивергенция

Пусть  $P$  и  $Q$  — распределения с плотностями  $p(x)$  и  $q(x)$ .

Дивергенция Кульбака–Лейблера суть

$$\text{KL}(P \parallel Q) = \int p(x) \ln \frac{p(x)}{q(x)} dx.$$

KL-дивергенция несимметрична и неотрицательна

$$\text{KL}(P \parallel Q) \neq \text{KL}(Q \parallel P), \quad \text{KL}(P \parallel Q) \geq 0.$$

## Две KL-дивергенции

Пусть  $P$  — известное распределение, мы ищем близкое к нему  $Q$ .

Q: А что оптимизировать —  $\text{KL}(P \parallel Q)$  или  $\text{KL}(Q \parallel P)$ ?

Посмотрим на их свойства.

## Forward KL

Стремимся минимизировать

$$KL(P \parallel Q) = \int p(x) \ln \frac{p(x)}{q(x)} dx$$

Q: Когда будет большое выражение под интегралом?

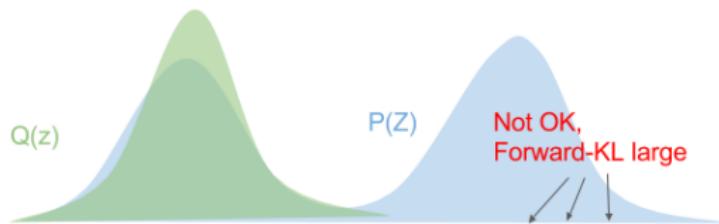
## Forward KL

Стремимся минимизировать

$$KL(P \parallel Q) = \int p(x) \ln \frac{p(x)}{q(x)} dx$$

Q: Когда будет большое выражение под интегралом?

A: Если  $p \neq 0, q = 0$ . Значит,  $Q$  будет “размазываться” по всему носителю  $P$ .



## Reversed KL

Стремимся минимизировать

$$KL(Q \parallel P) = \int q(x) \ln \frac{q(x)}{p(x)} dx$$

Q: Когда будет большое выражение под интегралом?

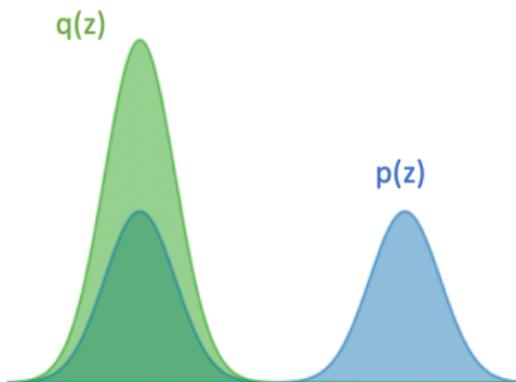
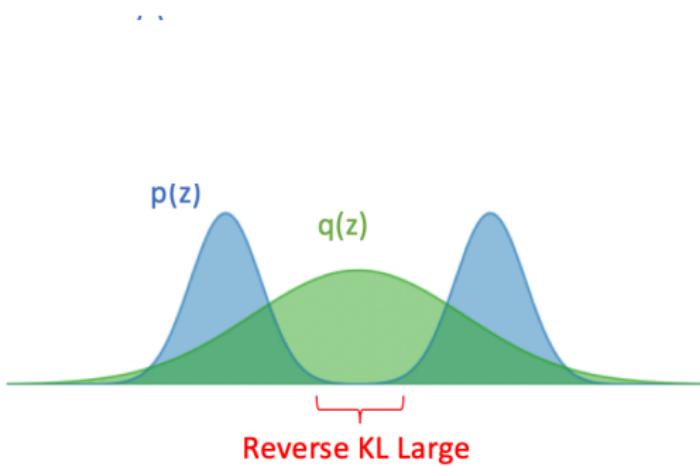
## Reversed KL

Стремимся минимизировать

$$KL(Q \parallel P) = \int q(x) \ln \frac{q(x)}{p(x)} dx$$

Q: Когда будет большое выражение под интегралом?

A: Если  $p = 0, q \neq 0$ . Значит,  $Q$  будет “локализовываться” близ моды  $P$ .



# ELBO

## 1 Autoencoder (AE)

- Модификации AE

## 2 VAE

- Обучение VAE
  - KL-дивергенция
  - ELBO
- Reparameterization Trick
- Пример VAE
- Недостатки VAE

## 3 VAE-GAN

## 4 Эпилог

## ELBO

Вспомним факт, который мы доказали на прошлой лекции.

$$\ln p_\theta(X) = \mathcal{L}_{\theta, \phi}(x) + \text{KL}(q_\phi(z|x) \parallel p_\theta(z|x)),$$

где 1ое слагаемое — это ELBO

$$\mathcal{L}_{\theta, \phi}(x) = \mathbb{E}_{q_\phi(z|x)} \ln \frac{p_\theta(z|x)}{q_\phi(z|x)}.$$

## Вывод ELBO

**Напомним доказательство.** Для краткости  $q_\phi(z|x) = q(z)$ .

$$\log p_\theta(x) = \mathbb{E}_{q(z)} [\log p_\theta(x)] = \mathbb{E}_{q(z)} \left[ \log \left( \frac{p_\theta(x, z)}{p_\theta(z|x)} \right) \right]$$

## Вывод ELBO

**Напомним доказательство.** Для краткости  $q_\phi(z|x) = q(z)$ .

$$\log p_\theta(x) = \mathbb{E}_{q(z)} [\log p_\theta(x)] = \mathbb{E}_{q(z)} \left[ \log \left( \frac{p_\theta(x, z)}{p_\theta(z|x)} \right) \right]$$

Единственный трюк — домножить числитель и знаменатель на  $q(z)$ :

$$\mathbb{E}_{q(z)} \left[ \log \left( \frac{p_\theta(x, z)}{q(z)} \frac{q(z)}{p_\theta(z|x)} \right) \right] = \underbrace{\mathbb{E}_{q(z)} \left[ \log \left( \frac{p_\theta(x, z)}{q(z)} \right) \right]}_{ELBO = \mathcal{L}_{\theta, \phi}(x)} + \underbrace{\mathbb{E}_{q(z)} \left[ \log \left( \frac{q(z)}{p_\theta(z|x)} \right) \right]}_{KL(q(z) \| p_\theta(z|x))}$$

## Разложение ELBO

Посмотрим на ELBO повнимательней.

- Воспользуемся правилом произведения

$$ELBO = \mathbb{E}_{q(z)} \left[ \log \left( \frac{p_{\theta}(x, z)}{q(z)} \right) \right] = \mathbb{E}_{q(z)} \left[ \log \left( \frac{p_{\theta}(x | z)p_{\theta}(z)}{q(z)} \right) \right]$$

## Разложение ELBO

Посмотрим на ELBO повнимательней.

- Воспользуемся правилом произведения

$$ELBO = \mathbb{E}_{q(z)} \left[ \log \left( \frac{p_\theta(x, z)}{q(z)} \right) \right] = \mathbb{E}_{q(z)} \left[ \log \left( \frac{p_\theta(x | z)p_\theta(z)}{q(z)} \right) \right]$$

- выделим ещё KL-дивергенцию с априорным распределением:

$$ELBO = \underbrace{\mathbb{E}_{q(z)} [\log p_\theta(x|z)]}_{\text{Reconstruction Loss}} - \underbrace{\text{KL}(q(z) \| p_\theta(z))}_{\text{Regularization Term}}$$

## Функция потерь для VAE

Всё, мы доказали самую важную теорему про VAE.

### Теорема

$$\ln p_\theta(X) - \text{KL}(q_\phi(z|x) \parallel p_\theta(z|x)) = \mathcal{L}_{\theta,\phi}(x),$$

где справа стоит ELBO

$$\mathcal{L}_{\theta,\phi}(x) = \underbrace{\mathbb{E}_{q_\phi(z|x)} [\log p_\theta(x|z)]}_{\text{Reconstruction Loss}} - \underbrace{\text{KL}(q_\phi(z|x) \parallel p_\theta(z))}_{\text{Regularization Term}}.$$

Эту функцию мы и возьмём за функцию потерь для VAE.

Максимизируем правдоподобие и аппроксимируем апостериорное

Q: Какие слагаемые стоят слева?

$$\ln p_\theta(X) - \text{KL}(q_\phi(z|x) \parallel p_\theta(z|x))$$

A: Мы максимизируем ELBO. Поэтому:

- Мы максимизируем правдоподобие данных  $\ln p_\theta(X)$ ,

Максимизируем правдоподобие и аппроксимируем апостериорное

Q: Какие слагаемые стоят слева?

$$\ln p_\theta(X) - \text{KL}(q_\phi(z|x) \| p_\theta(z|x))$$

A: Мы максимизируем ELBO. Поэтому:

- Мы максимизируем правдоподобие данных  $\ln p_\theta(X)$ ,
- Мы минимизируем KL-дивергенцию  $\text{KL}(q_\phi(z|x) \| p_\theta(z|x))$ , т.е. приближаем  $q_\phi(z|x)$  к апостериорному распределению  $p_\theta(z|x)$ .

## Reconstruction and Regularization

Слагаемые справа тоже можно интерпретировать.

$$\mathcal{L}_{\theta, \phi}(x) = \underbrace{\mathbb{E}_{q_{\phi}(z|x)} [\log p_{\theta}(x|z)]}_{\text{Reconstruction Loss}} - \underbrace{\text{KL}(q_{\phi}(z|x) \parallel p_{\theta}(z))}_{\text{Regularization Term}}.$$

- **Reconstruction Loss** — ошибка при реконструкции объекта.
- **Regularization Term** — штраф за отклонение от априорного распределения.

# Reparameterization Trick

## 1 Autoencoder (AE)

- Модификации AE

## 2 VAE

- Обучение VAE
  - KL-дивергенция
  - ELBO
- Reparameterization Trick
- Пример VAE
- Недостатки VAE

## 3 VAE-GAN

## 4 Эпилог

Градиент не течёт

Есть проблема! У нас не течёт градиент!



## Операция сэмплирования недифференцируема

В чём проблема? ELBO имеет вид

$$\mathcal{L} = \mathbb{E}_{q_\phi(z)} f_\theta(x, z)$$

Интегралы не считаются, поэтому они заменяются Монте-Карло оценкой:

$$\mathcal{L} \approx \frac{1}{K} \sum_{i=1}^k f_\theta(x, z_k), \quad z_k \sim q_\phi(z).$$

Пропала производная по  $\phi$ .

Операция сэмплирования недифференцируема.

## Reparameterization trick

Идея. Отделим параметры и стохастичность.

Если  $X \sim \mathcal{N}(\mu, \sigma)$ , то  $X = \mu + \sigma \cdot \varepsilon$ , где  $\varepsilon \sim \mathcal{N}(0, 1)$ .

По  $\varepsilon$  дифференцировать нельзя — это случайная величина.

А по параметрам  $\mu, \sigma$  — можно.

## Reparameterization trick

В общем случае мы ищем замену

$$z = g(\varepsilon, \phi, x)$$

В матожиданиях в ELBO параметр “уйдёт из плотности в функцию”:

$$\mathbb{E}_{q_\phi(z)}[f_\theta(x, z)] = \mathbb{E}_{p(\epsilon)}[f_\theta(x, g(\varepsilon, \phi, x))].$$

Интегралы можно заменить Монте-Карло оценкой

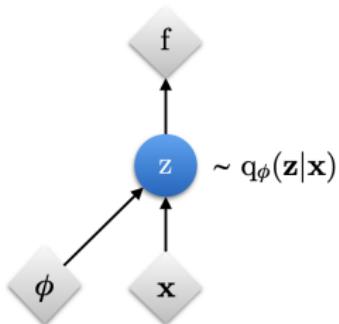
$$\frac{1}{K} \sum_{i=1}^K f_\theta(x, g(\varepsilon_k, \phi, x)),$$

которую можно дифференцировать по  $\phi$  и  $\theta$ .

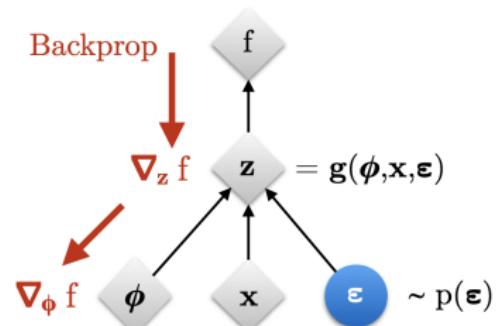
## Reparameterization trick

Этот трюк обычно иллюстрируется такой картинкой:

Original form

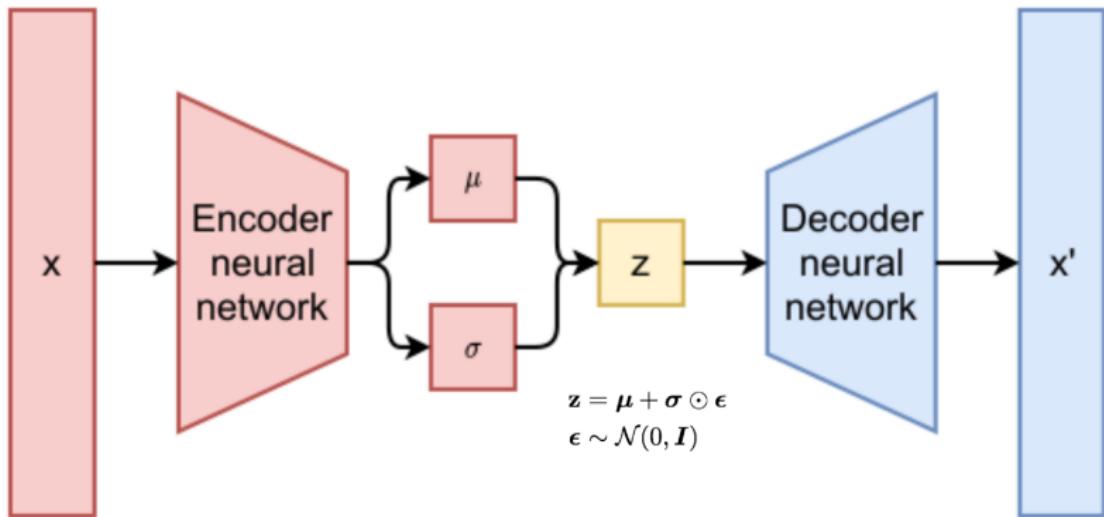


Reparameterized form



## Variational AutoEncoder

Итак, VAE принимает следующий вид:



# Пример VAE

## 1 Autoencoder (AE)

- Модификации AE

## 2 VAE

- Обучение VAE
  - KL-дивергенция
  - ELBO
- Reparameterization Trick
- Пример VAE
- Недостатки VAE

## 3 VAE-GAN

## 4 Эпилог

## Нормальные распределения

Рассмотрим простейший VAE, когда **все распределения — нормальные**.

- Априорное распределение — берём стандартное нормальное:

$$p_\theta(z) = \mathcal{N}(0, I)$$

- Правдоподобие. Ковариация — постоянная диагональная матрица.

$$p_\theta(x|z) = \mathcal{N}(f_\theta(z), \sigma^2)$$

- Апостериорное распределение. Матрица ковариации — диагональная:

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

## Функция потерь

Посмотрим на ELBO:

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

2ое слагаемое вычисляется явно, 1ое — оценивается [методом Монте-Карло](#):

$$\mathbb{E}_{\mathcal{N}(\mu_{\phi}(x), \sigma_{\phi}^2(x))} [\log p_{\theta}(x|z)] \approx \frac{1}{K} \sum_{k=1}^K \log p_{\theta}(x|z_k),$$

где  $z_k \sim \mathcal{N}(\mu_{\phi}(x), \sigma_{\phi}^2(x))$ .

## Ошибка при реконструкции

Для гауссовой VAE 1ое слагаемое принимает вид

$$\begin{aligned}\log p_{\theta}(x|z) &= \sum_{j=1}^D \log p_{\theta}(x_j|z) = \sum_{j=1}^D \log \left( \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp \left( -\frac{(x_j - f_{\theta,j}(z))^2}{2\sigma^2} \right) \right) = \\ &= -\frac{D}{2} \log 2\pi - D \log \sigma - \frac{1}{2\sigma^2} \sum_{j=1}^D (x_j - f_{\theta,j}(z))^2\end{aligned}$$

Выделено единственное неконстантное слагаемое.

## KL-дивергенция

2ое слагаемое — это KL-дивергенция нормальных распределений.

Формулу для него можно найти в <https://mr-easy.github.io/2020-04-16-kl-divergence-between-2-gaussian-distributions/>

В данном случае

$$\begin{aligned} \text{KL}(q_\phi(z\|x) \parallel p_\theta(z)) &= \text{KL}(\mathcal{N}(\mu_\phi(x), \sigma_\phi^2(x)) \parallel \mathcal{N}(0, I)) = \\ &= \frac{1}{2} \sum_{j=1}^M (\sigma_j^2 + \mu_j^2 - 1 - \ln \sigma_j^2) \end{aligned}$$

## KL-дивергенция

### Итоговый лосс для VAE

$$L_{VAE} = \frac{1}{K} \sum_{k=1}^K \left[ \frac{1}{2\sigma^2} \sum_{j=1}^D (x_j - f_{\theta,j}(z_k))^2 \right] + \frac{1}{2} \sum_{j=1}^M (\sigma_j^2 + \mu_j^2 - 1 - \ln \sigma_j^2),$$

где

$$z_k \sim \mathcal{N}(\mu_\phi(x), \sigma_\phi^2(x)).$$

Согласно <https://arxiv.org/pdf/1312.6114.pdf> (Раздел 2.3),  
если батч достаточно большой ( $N \geq 100$ ), то можно положить  $K = 1$ .

# Недостатки VAE

## 1 Autoencoder (AE)

- Модификации AE

## 2 VAE

- Обучение VAE
  - KL-дивергенция
  - ELBO
- Reparameterization Trick
- Пример VAE
- Недостатки VAE

## 3 VAE-GAN

## 4 Эпилог

# Размытость

Типичная проблема VAE — размытость изображений.

Input



VAE reconstruction



## KL-дивергенция с распределением данных

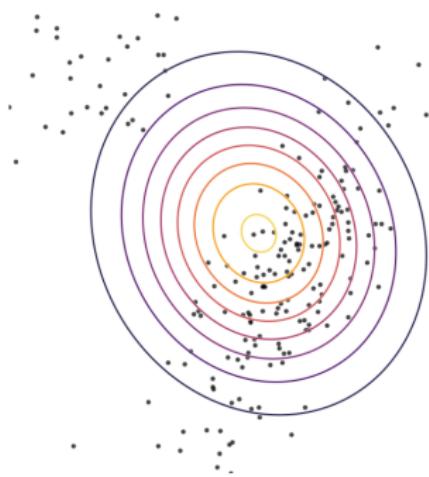
Это ожидаемо. Максимизация правдоподобия влечёт **минимизацию KL-дивергенции между реальными данными и генерируемыми**:

$$\begin{aligned}\theta &= \arg \max_{\theta} p(x | \theta) = \arg \max_{\theta} \sum_{i=1}^n \log p(x_i | \theta) \rightarrow \arg \max_{\theta} \int p_{real}(x) \log p(x | \theta) dx = \\ &= \arg \max_{\theta} \int p_{real}(x) [\log p(x | \theta) - \log p_{real}(x)] dx = \text{KL}(p_{real} \| p(x | \theta)).\end{aligned}$$

## KL-дивергенция с распределением данных

А при минимизации Forward KL  
распределение “размазывается” по всей области.

Аппроксимируется всё, но “кое-как”.



# VAE-GAN

## 1 Autoencoder (AE)

- Модификации AE

## 2 VAE

- Обучение VAE
  - KL-дивергенция
  - ELBO
- Reparameterization Trick
- Пример VAE
- Недостатки VAE

## 3 VAE-GAN

## 4 Эпилог

## Им несть числа

Мир генеративных моделей не ограничивается VAE.

Упомянем одну из возможных модификаций — VAE-GAN.

Заодно познакомимся с одной из важнейших генеративных моделей:  
[GAN \(Generative Adversarial Networks\)](#).



**GAN in a nutshell**

## Лекция-12

GAN — большая тема, мы не успеем на ней остановиться. Для ознакомления:

<https://lilianweng.github.io/posts/2017-08-20-gan/>

Про “зоопарк различных GANов”:

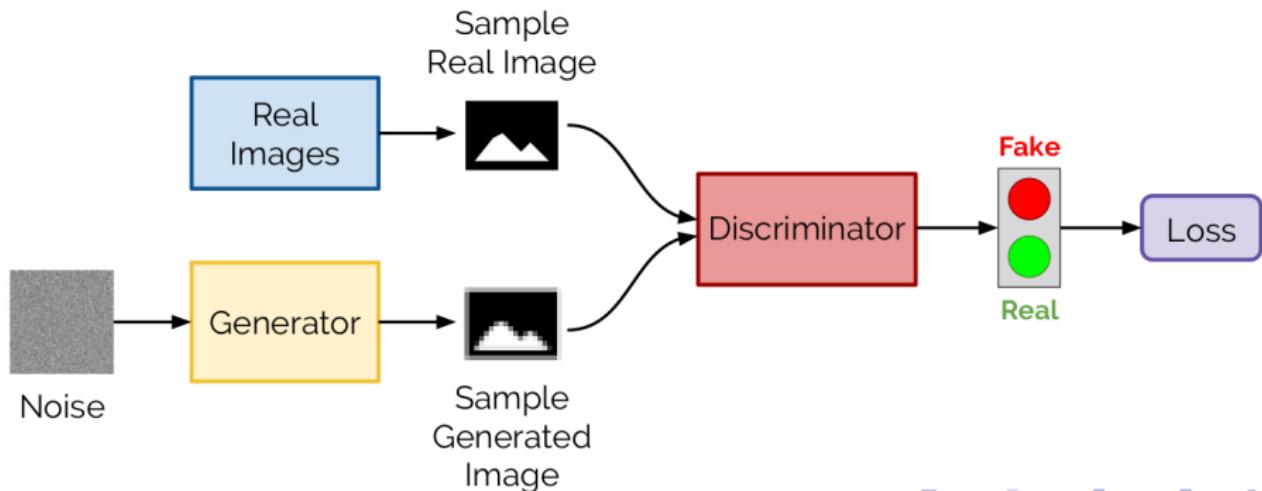
<https://neptune.ai/blog/6-gan-architectures>

## Идея GAN

Как обучить хороший генератор?

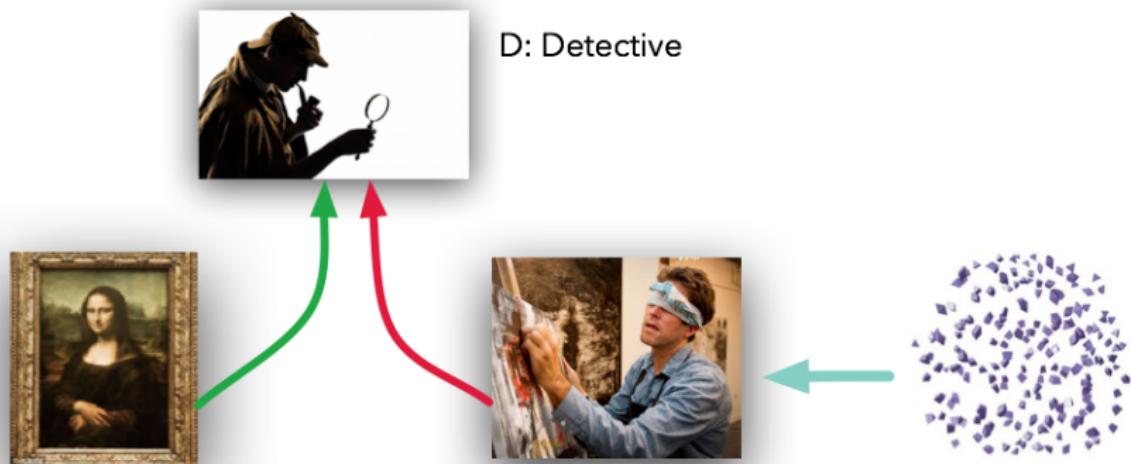
**Идея.** Одновременно обучать генератор и дискриминатор, отличающий “фейк от правды”.

Если мы обманем дискриминатор, то мы не можем отличить сгенерированные данные от истинных.



## Казаки-разбойники

По сути — это противостояние фальшивомонетчиков и полицейских.



R: Real Data

G: Generator (Forger)

I: Input for Generator

## GAN loss

В отличие от большинства нейронных сетей, обучение GAN — это **минимаксная игра**.

Формально, в качестве лосса берётся

$$\begin{aligned}\min_G \max_D L(D, G) &= \mathbb{E}_{x \sim p_r(x)} [\log D(x)] + \mathbb{E}_{z \sim p_z(z)} [\log(1 - D(G(z)))] \\ &= \mathbb{E}_{x \sim p_r(x)} [\log D(x)] + \mathbb{E}_{x \sim p_g(x)} [\log(1 - D(x))]\end{aligned}$$

- 1ое слагаемое требует, чтобы на реальных данных дискриминатор  $D = 1$ .
- 2ое слагаемое — что на данных генератора  $G(x)$  дискриминатор  $D = 0$ .

## JS Divergence

Пусть  $p_r(x)$  — распределение реальных данных, а  $p_g(x)$  — сгенерированных.

Можно показать (<https://lilianweng.github.io/posts/2017-08-20-gan/>), что

- идеальный дискриминатор имеет вид

$$D^*(x) = \frac{p_r(x)}{p_r(x) + p_g(x)};$$

- оптимизация лосса при идеальном дискриминаторе суть **минимизация дивергенции Йенсена — Шеннона**

$$L(G, D^*) = 2 \text{JS}(p_r \| p_g) - 2 \log 2,$$

где

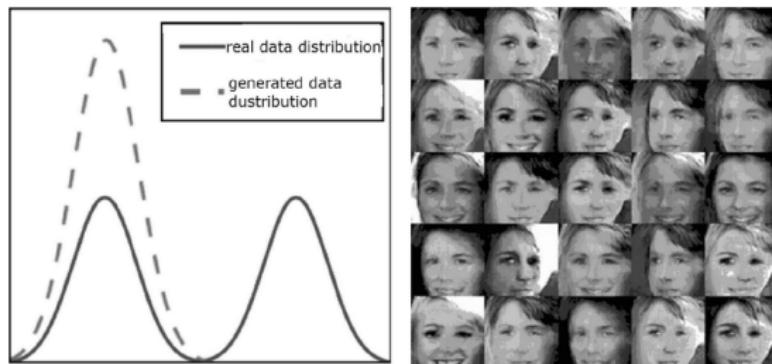
$$\text{JS}(p \| q) = \frac{1}{2} \text{KL}\left(p \parallel \frac{p+q}{2}\right) + \frac{1}{2} \text{KL}\left(q \parallel \frac{p+q}{2}\right)$$

## Mode Collapsing

Обучение GAN — трудоёмкое и нетривиальное занятие.

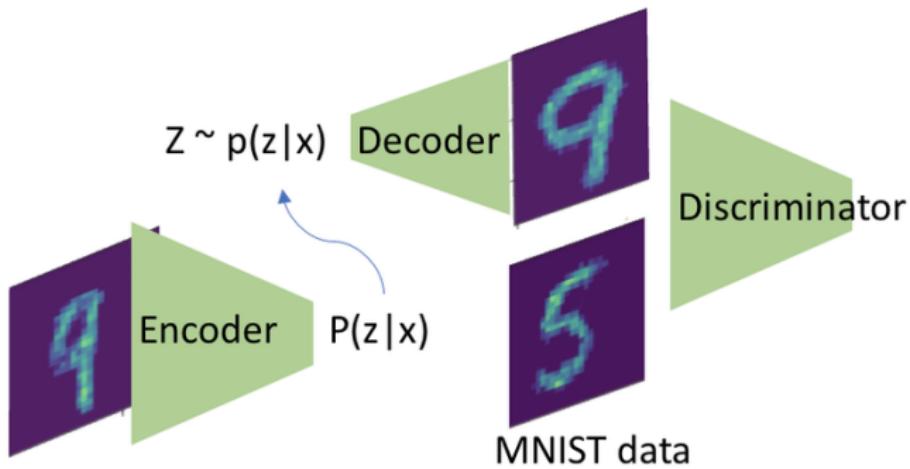
У него есть склонность к mode collapsing.

В противоположность VAE, GANы гораздо выгоднее идеально подделывать небольшое подмножество элементов, чем пытаться сгенерировать всё.



## VAE-GAN

А вот и обещанная схема VAE-GAN:



## Котик Goodfellow

Финальный вопрос курса — конечно будет про котика. 😊

Q: Откуда вязь вокруг кота?



Финальный вопрос курса — конечно будет про котика. 😊

Q: Откуда вязь вокруг кота?



A: В обучающей выборке были мемасы с котиками.

# Эпилог

## 1 Autoencoder (AE)

- Модификации AE

## 2 VAE

- Обучение VAE
  - KL-дивергенция
  - ELBO
- Reparameterization Trick
- Пример VAE
- Недостатки VAE

## 3 VAE-GAN

## 4 Эпилог

Читайте книги — источник знаний

Наука не ограничивается университетскими курсами.

То, чему учат в ВУЗах — малая доля того, что знают учёные и написано в статьях и монографиях.



77. Могилевский А.  
Если книги читать не будешь — скоро грамоту забудешь. 1925

О дивный новый мир

IT динамично.

Существуют много разных способов освоения новой информации.

Теория не заменяет опыта и практику.



ШКОЛА АНАЛИЗА ДАННЫХ

The End

Поздравляю с окончанием курса!



Спасибо за внимание!