< 탄생배경 > **Reviewer : 김정학**

Variational inference (VI)의 기본 목표는 우리가 쉽게 다룰수 있는 분포로 복잡한 사후확률을 유추해내는 것이다. 그런데 복잡한 분포를 유추하는 것이 안 되는 문제가 존재한다.

앞서 리뷰했던 논문에서 아래의 식 (ELBO)을 살펴보았다.

$$\log p_\theta(x) \geq -D_{KL}(q_\phi(z|x) \| p(z)) + E_q(\log p_\theta(x|z)) = -F(x)$$

여기에서 문제점이 있는데 ① 도함수값을 구하는 것, ② 적당한 $q(\cdot)$를 찾는 것이다.

이 논문이 집중해서 해결하려는 부분이 ②이다. ①은 Monte Carlo gradient estimation 이랑 inference network를 통해 해결할 수 있다.

- Monte Carlo gradient estimation은 Stochastic Backpropagation으로 VAE 논문에서 reparameterization trick을 사용해서 역전파를 하는 것이다.
- Inference Network는 VAE에서 Encoder를 통해서 μ, σ를 얻어내는 것이다. (x로부터 latent vector를 뽑아내는 과정)

< Content >

이 논문에서는 deep latent Gaussian model (DLGM)을 다룬다. 특징으로는 각 layer가 독립적이라서 아래의 식처럼 나타낼 수 있다.

$$p(x, z_1, \cdots, z_L) = p(x|f_0(z_1)) \prod_{l=1}^{L} p(z_l|f_l(z_{l+1}))$$

Normalizing flow는 invertible mapping을 여러번 통해서 pdf를 바꾼다. $q(z)$라는 분포를 가지고 있는 확률변수 z에 대해서 invertible and smooth mapping 인 f를 사용해서 z'를 만들 수 있다면, 즉 $z' = f(z)$ 아래와 같이 나타낼 수 있다.

$$q(z') = q(z)\left|\det \frac{\partial f^{-1}}{\partial z'}\right| = q(z)\left|\det \frac{\partial f}{\partial z}\right|^{-1}$$

이는 NICE 논문에서 확인한 것과 동일하다. DLGM처럼 여러번의 mapping을 통과하면 $z_K = f_K \circ \cdots \circ f_2 \circ f_1(z_0)$ 고 위식에 적용하면

$$\ln q(z_K) = \ln q_0(z_0) - \sum_{k=1}^{K} \ln\left|\det \frac{\partial f_k}{\partial z_{k-1}}\right|$$ 로 나타낼 수 있다.

q_K 분포의 path를 normalizing flow라고 한다.

지금은 finite layer를 사용하지만 이게 무한으로 간 경우도 생각할 수 있다.

그 경우에는 time에 대한 변수도 생각해서 구한다 (구하는 방식은 Langevin flow랑 Hamiltion flow가 있다) 이 부분을 Neural ODE가 대체할 수 있다. (개발사건)

이 방식대로 하면 시간복잡도가 $O(LD^3)$가 걸린다. 그래서 이를 해결하는 몇가지 특징을 가지는 transformation을 살펴보자.

① planar flow

$f(z) = z + uh(w^T z + b)$ 이다. $\psi(z) = h'(w^T z + b)w$ 라고 하면

log-det-Jacobian을 $O(D)$만에 구할 수 있다.

$\left|\det \frac{df}{dz}\right| = |1 + u^T \psi(z)|$ 이고

$\ln q_K(z_K) = \ln q_0(z) - \sum_{k=1}^{K} \ln|1 + u_k^T \psi_k(z_{k-1})|$ 로 할 수 있다.

② radial flow

$f(z) = z + \beta h(\alpha, r)(z - z_0)$ 이다.

$\left|\det \frac{df}{dz}\right| = (1 + \beta h(\alpha, r))^{d-1}(1 + \beta h(\alpha, r) + \beta h'(\alpha, r) r)$로 나타낼 수 있다.

위 flow 모두 invertible 하다.

이를 이용해서 위의 ELBO를 바꾸면

$$F(x) = E_{q_0(z_0)}[\ln q_0(z_0)] - E_{q_0(z_0)}[\log p(x, z_K)]$$
$$- E_{q_0(z_0)}\left[\sum_{k=1}^{K} \ln|1 + u_k^T \psi_k(z_{k-1})|\right]$$ 이 된다 (planer flow의 경우)

다 적고 나서 보니까 논문을 읽을 때는 어려워서 한참 걸리더니 막상 정리하니까 되게 짧네..