Auto-Encoding Variational Bayes

# 0. What is ML and MAP

가장 친숙한 예시부터 시작하겠다. 대한민국에 고등학교가 100개가 있고 어떤 수능점수 가 주어졌을 경우 이 점수를 받은 학생이 특목고 학생인지 일반고 학생인지 알아보는 것이다. ML방법으로 이 확률을 구할 경우 를 구하여 더 높은 값을 가지는 경우를 우리는 선택을 하면 된다. 여기서 만약 고등학교 grade가 위처럼 두 가지가 아닌 100가지이면 100개를 비교하여 선택하면 되고 discrete하지 않고 continuous인 경우 에 대하여 계산을 진행하면 된다.

반대로 MAP의 경우는 를 비교하는 것이다. 두 가지의 차이점은 이대로 보면 크게 보이지 않는다. 그러나 이제 고등학교 100개 중에 특목고가 1개 일반고가 99개라는 사실을 알고 있으면 두 가지의 확률은 매우 달라진다. 앞의 ML은 특목고와 일반고가 동일한 개수가 있다는 가정하에 계산을 하게 되는 것이다.

하지만 문제는 우리가 Probabilistic model을 구해야 하는 대부분의 경우에는 아무도 미리 고등학교가 비율이 어떻게 되는지 같은 사전 지식(prior knowledge, )를 알려주지 않는다. 그리고 우리가 이제 접근할 논문도 이와 같은 기저에서 출발을 한다. Prior knowledge가 없는 상태에서 input 만으로 우리는 를 well-representation하는 z를 구해야 하는 것이다.

# 1.Introduction

이 논문에 대한 논의는 다음에서 시작된다. 어떻게 효율적으로 적절한 추론을 하고 continuous latent variables 과/또는 추적 불가능한(intractable) posterior distribution을 가진 probabilistic model을 직접적으로 training이 가능한지에 대한 의문에서 시작되었다. 이 때 Variational Bayesian(VB)는 intractable posterior를 추정하는 것을 포함한다. 이는 일반적인 mean-field approximation이 불가능하기 때문이다.

[여기서 mean-filed approximation이란 Bayesian posterior density 를 해석하기 쉬운 라는 parameter 에 대한 density로 근사하는 것을 말합니다. 그리고 이 는 factorize되는 형태를 취하는데 이를 우리는 다음과 같이 표현합니다.

그리고 이러한 를 에 대해 푸는 문제는 Variational Bayes로 해결하는 문제가 됩니다. 여기서 우리는 본래 posterior인 를 통계적으로 estimation하는 문제에서 optimization problem으로 변환한 것을 알 수 있습니다. 이는 estimation보다 강력한 방식입니다. 하지만

이제 VAE가 나오게 된 배경을 간략하게 설명하면 다음과 같다. 우리는 어떠한 data 를 잘 표현할 수 있는 latent variable 가 존재한다고 가정하고 를 파라미터로 가지는 model의 를 구하고 싶다. 그러나 여기서 우리는 의 distribution을 신경 쓰지 않고 x를 generate할 수가 없다. 즉, 는 실질적으로 중요하지가 않다. 그래서 를 계산하는 것이 우리에게는 훨씬 적합한 task이다. 하지만 아래에서 기술할 어려움이 존재하여 저자는 VAE를 제안한 것이다.

# 2. Method

## 2.1 Problem Scenario

이제 문제점에 대해서 자세하게 말해보게 되면 다음과 같다. 이다. 문제는 저 이다. 는 intractable한 함수 이므로(이미 network의 구조가 복잡하기 때문에 분석이 불가능하다. 또한 mean-filed VB 알고리즘을 사용해도 intractable한 함수로 표현되므로 의미가 없다.) 를 위해 Variational inference를 한다. 이는 에 가까운 구하기 쉬운 함수 를 구하는 것이다. 이제 수학적 모델과 empirical model을 매칭을 시켜보면 는 probabilistic decoder이며 는 probabilistic encoder에 해당한다.

## 2.2 The variational bound

설명을 위해 증명과정과 함께 풀어나가겠다.

여기서 KL divergence의 성질에 의해서 임을 알 수 있다. 이 식을 다시 나타내면 다음과 같다.

를 우리는 ELBO(Evidence Lower BOund)라고 부른다. ELBO에서 는 Analytic하게 값을 계산할 수 있다. 이제 우리에게 중요한 것은 를 처리해야 한다.

## 2.3 The SGVB estimator and AEVB algorithm

이제 우리는 를 계산하기에 앞서 에 대한 논의를 해야 한다. 먼저 에 관해 논의를 먼저 하자면 를 저자는 reparameterization을 통해 with 로 표s 현이 가능하다고 말한다.

이제 적절한 와 를 선택하면 expectation of Monte Carlo estimation을 우리는 다음과 같이 표현이 가능하다.

## 2.4 The reparameterization trick

# 3 Example: Variational Auto-Encoder