目次

1 変分自己符号化器

目次

1. 変分自己符号化器
   - 生成モデル
   - 変分自己符号化器 (VAE) の概要
   - 変分自己符号化器 (VAE) の理論

生成モデル

- 生成モデルの目的
  - データ $\boldsymbol{x}$ に関する分布 $p(\boldsymbol{x})$ を推定する

- データ生成過程
  - データ $\boldsymbol{x}$ は一般に高次元である
  - 但し、実際にデータが分布しているのは、ごく限られた一部の低次元の領域であると考えられる (多様体仮説)
  - データ $\boldsymbol{x}$ 自体は高次元だが、本質的には低次元の情報しか持たないと考えられる

  - データ $\boldsymbol{x}$ を、より低次元なベクトル $\boldsymbol{z}$ を使って、表現することを考える
  - データに関する分布 $p(\boldsymbol{x})$ を、潜在変数 $\boldsymbol{z}$ に関する分布と、うまく組み合わせて記述する
  - 潜在変数からデータが生成されるまでの過程を組み込んで、$p(\boldsymbol{x})$ を記述する

目次

1. 変分自己符号化器
   - 生成モデル
   - 変分自己符号化器 (VAE) の概要
   - 変分自己符号化器 (VAE) の理論

変分自己符号化器 (VAE) の概要

- 深層学習における生成モデル
  - 主に以下の 2 つの手法が存在する

  - 敵対的生成ネットワーク (Generative Adversarial Networks, GAN)
  - 変分自己符号化器 (Variational Auto Encoders, VAE)

  - ここでは変分自己符号化器 (VAE) について扱う

  - VAE を、異常検知 (不良品の検出など) に使った例がある

変分自己符号化器 (VAE) の概要

- VAE におけるグラフィカルモデル
  - 図 1 のような、潜在変数を含んだグラフィカルモデルを考える

  - データ $\boldsymbol{x}$ について、ある一つの潜在変数 $\boldsymbol{z}$ が対応しているとする
  - 各データ $\boldsymbol{x}$ は、分布 $p(\boldsymbol{x})$ から独立にサンプルされるとする
  - 従って、データ $\{\boldsymbol{x}_1, \ldots, \boldsymbol{x}_N\}$ は独立同分布標本とする

  - θ は、潜在変数 $\boldsymbol{z}$ からデータ $\boldsymbol{x}$ を取得する際に使用されるパラメータ
  - ϕ は、データ $\boldsymbol{x}$ から潜在変数 $\boldsymbol{z}$ を生成する際に使用されるパラメータ
  - N は、データ数である

変分自己符号化器 (VAE) の概要

- データ $\boldsymbol{x}$ の生成過程
  - データ $\boldsymbol{x}$ の生成過程は、次のように考える

  - 分布 $p(\boldsymbol{z}|\theta)$ から、潜在変数 $\boldsymbol{z}_i$ がサンプルされる
  - 分布 $p(\boldsymbol{x}|\boldsymbol{z}_i, \theta)$ から、データ $\boldsymbol{x}_i$ がサンプルされる

  - これより、データ $\boldsymbol{x}$ の分布を次のように表現できる

$$p(\boldsymbol{x}|\theta) = \int p(\boldsymbol{x}|\boldsymbol{z}, \theta)p(\boldsymbol{z}|\theta)d\boldsymbol{z} \tag{1}$$

- 潜在変数 $\boldsymbol{z}$ をデータ $\boldsymbol{x}$ から取得する過程
  - 潜在変数 $\boldsymbol{z}_i$ をデータ $\boldsymbol{x}_i$ から得る過程は、次のように考える

  - 分布 $q(\boldsymbol{z}|\boldsymbol{x}_i, \phi)$ から、潜在変数 $\boldsymbol{z}_i$ がサンプルされる

変分自己符号化器 (VAE) の概要

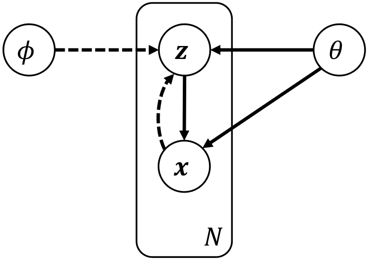

図 1: 変分自己符号化器 (VAE) におけるグラフィカルモデル

変分自己符号化器 (VAE) の概要

- 確率分布のニューラルネットワークによる表現
  - 潜在変数を含む確率モデルについて、パラメータの最尤解を求めるために、EM アルゴリズムを導出した
  - EM アルゴリズムでは、潜在変数に関する事後分布 $p(\boldsymbol{z}|\boldsymbol{x},\theta)$ を計算する必要があった
  - この事後分布 $p(\boldsymbol{z}|\boldsymbol{x},\theta)$ の計算が困難であるとき、$p(\boldsymbol{z}|\boldsymbol{x},\theta)$ を別の分布 $q(\boldsymbol{z}|\boldsymbol{x},\phi)$ で近似し、変分推論によって $q(\boldsymbol{z}|\phi)$ の最適解を求めた

  - VAE は変分推論の変種であり、近似事後分布 $q(\boldsymbol{z}|\boldsymbol{x},\phi)$ と、$p(\boldsymbol{x}|\boldsymbol{z},\theta)$ の 2 つをニューラルネットワークで表現する

  - データ $\boldsymbol{x}$ を潜在変数 $\boldsymbol{z}$ に対応付けるニューラルネットワークを、Encoder という
  - 潜在変数 $\boldsymbol{z}$ からデータ $\boldsymbol{x}$ を復元するニューラルネットワークを、Decoder という
  - 分布 $q(\boldsymbol{z}|\boldsymbol{x},\phi)$ は Encoder、分布 $p(\boldsymbol{x}|\boldsymbol{z},\theta)$ は Encoder に相当する

目次

1. 変分自己符号化器
   - 生成モデル
   - 変分自己符号化器 (VAE) の概要
   - 変分自己符号化器 (VAE) の理論

変分自己符号化器 (VAE) の理論

- 変分自己符号化器 (VAE) の理論
  - 変分下界 $\mathcal{L}(q)$ は次のようであった

$$
\begin{aligned}
\mathcal{L}(q) &= \int q(\boldsymbol{z}|\boldsymbol{x}) \ln \frac{p(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{z})}{q(\boldsymbol{z}|\boldsymbol{x})} d\boldsymbol{z} && (2) \\
&= \int q(\boldsymbol{z}) \ln \frac{p(\boldsymbol{x}|\boldsymbol{z}) p(\boldsymbol{z})}{q(\boldsymbol{z}|\boldsymbol{x})} d\boldsymbol{z} && (3) \\
&= \int q(\boldsymbol{z} \ln p(\boldsymbol{x}|\boldsymbol{z}) d\boldsymbol{z} + \int q(\boldsymbol{z}|\boldsymbol{x}) \ln \frac{p(\boldsymbol{z})}{q(\boldsymbol{z}|\boldsymbol{x})} d\boldsymbol{z} && (4) \\
&= \int q(\boldsymbol{z}) \ln p(\boldsymbol{x}|\boldsymbol{z}) d\boldsymbol{z} - \mathrm{KL}(q(\boldsymbol{z}|\boldsymbol{x}) || p(\boldsymbol{z})) && (5) \\
&= \mathbb{E}_{\boldsymbol{z} \sim q(\boldsymbol{z})} [\ln p(\boldsymbol{x}|\boldsymbol{z})] - \mathrm{KL}(q(\boldsymbol{z}|\boldsymbol{x}) || p(\boldsymbol{z})) && (6)
\end{aligned}
$$

  - ここでは、単一のデータ $\boldsymbol{x}$ と、それに対応する潜在変数 $\boldsymbol{z}$ を考えている

変分自己符号化器 (VAE) の理論

- KL ダイバージェンスの項は、後ほど求めることにする (解析的に求められる)
- 第 1 項は、分布 $q(\boldsymbol{z})$ に関する期待値であり、VAE ではサンプリングで近似する

$$\mathbb{E}_{\boldsymbol{z}\sim q(\boldsymbol{z})}\left[\ln p(\boldsymbol{x}|\boldsymbol{z})\right] \simeq \frac{1}{L}\sum_{i=1}^{L} \ln p(\boldsymbol{x}_i|\boldsymbol{z}_{i,l}) \tag{7}$$

- これより、変分下界 $\mathcal{L}(q)$ は以下のように書ける

$$\mathcal{L}(q) \simeq -\mathrm{KL}(q(\boldsymbol{z}|\boldsymbol{x})||p(\boldsymbol{z})) + \frac{1}{L}\sum_{i=1}^{L} \ln p(\boldsymbol{x}_i|\boldsymbol{z}_{i,l}) \tag{8}$$