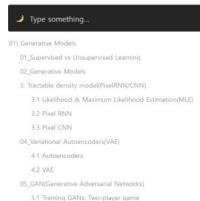


0



01) Generative Models

01_Supervised vs Unsupervised Learning

Supervised vs Unsupervised Learning

Supervised Learning

Data: (x, y) x is data, y is label

Goal: Learn a function to map x -> y

Examples: Classification, regression, object detection, semantic segmentation, image captioning, etc.

- Supervised(지도) 학습은 학습 데이터와 label를 주고 데이터와 label를 mapping하는 함수를 찾는 것이다.
- 지금까지 배운 대부분의 것이 Supervised이다.

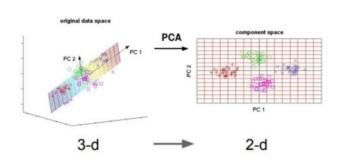
Supervised vs Unsupervised Learning

Unsupervised Learning

Data: x

Just data, no labels!

Goal: Learn some underlying hidden *structure* of the data



Examples: Clustering, dimensionality reduction, feature learning, density estimation, etc.

Principal Component Analysis (Dimensionality reduction)

- Unsupervised(비지도) 학습은 label은 없고 그냥 데이터만 주어진다.
- 목표는 데이터의 숨겨진 구조를 찾는 것이다.
- 대표적인 예시로는 Clustering, dimensionality reduction, feature learning, density estimation 등이 있다.

Supervised vs Unsupervised Learning

Supervised Learning

Data: (x, y) x is data, y is label

Goal: Learn a function to map x -> y

Examples: Classification, regression, object detection, semantic segmentation, image captioning, etc.

- 비지도학습의 경우 레이블이 없기 때문에 데이터가 매우 싸서 아주 많이 모을 수 있다.
- 하지만 아직까지 open problem이 많이 존재한다.

Unsupervised Learning

Training data is cheap

Data: x Just data, no labels! unsupervised learning

Holy grail: Solve => understand structure of visual world

Goal: Learn some underlying hidden structure of the data

Examples: Clustering, dimensionality reduction, feature learning, density estimation, etc.

02_Generative Models

Generative Models

Given training data, generate new samples from same distribution



Training data $\sim p_{data}(x)$

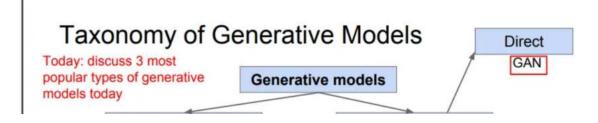


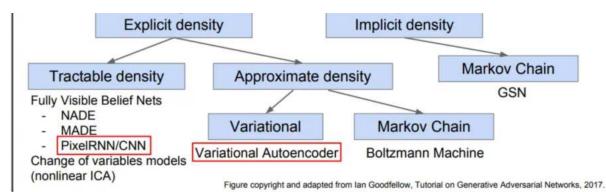
Generated samples ~ p_{model}(x)

Want to learn $p_{model}(x)$ similar to $p_{data}(x)$

Addresses density estimation, a core problem in unsupervised learning Several flavors:

- Explicit density estimation: explicitly define and solve for p_{model}(x)
- Implicit density estimation: learn model that can sample from p_{model}(x) w/o explicitly defining it
- train data가 주어졌을 때 그것과 비슷한 분포를 지니는 new data를 생성하는게 생성모델의 역할이다.





taxonomy: 분류학

- Explicit density는 가우시안 같이 확률 모델인 density function을 정의하는 것이다.
- Explicit density는 모델링 하는 density function이 명확하다.
- Tractable density는 gradient를 구해서 직접적으로 학습한다.
- Variational Autoencoder(VAE)는 objectives의 gradient를 구해서 최적화하는 것이 아니라, 근사치를 사용하기 때문에 Approximate density라고 부른다.
- GAN은 sampling을 사용하지 않기 때문에 Implicit density라고 불린다.

3. Tractable density model(PixelRNN/CNN)

Fully visible belief network

Explicit density model

Use chain rule to decompose likelihood of an image x into product of 1-d distributions:

$$p(x) = \prod_{i=1}^n p(x_i|x_1,...,x_{i-1})$$
 Will need to define ordering of "previous pixels" Probability of i'th pixel value given all previous pixels

Then maximize likelihood of training data

Complex distribution over pixel values => Express using a neural network!

- p(x) 이 어떤 분포를 띄는지를 정의하고 찾는데 초점을 둔다.
- Explicit density 모델은 training data의 likelihood를 높이는 방향으로 학습을 한다.
- 모델을 학습시키려면 likelihood를 최대화시키면 되는데, 픽셀 값의 분포가 매우 복잡하다.
- 따라서 이미지 내의 각 픽셀들의 분포를 알고 복잡한 함수를 표현하기 위해서 신경망을 이용할 것이다.

3.1 Likelihood & Maximum Likelihood Estimation(MLE)

 $X \sim P_{\theta}(X) \cdots$ 화율변수X가 모수 θ 에 대해 가지는 분포

 $\mathcal{L}(\theta|x) = Pr(X = x|\theta)$ $\mathcal{L}(\theta|x) = 가능도 함수$

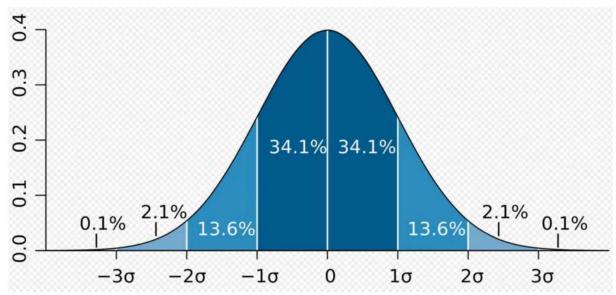
$$\begin{split} Pr(X = x|\theta) &= Pr(x_1, x_2, x_3 \cdots |\theta) = Pr(x_1|\theta) \times Pr(x_2|\theta) \times \cdots Pr(x_n|\theta) \\ \mathcal{L}(\theta|x) &= Pr(x_1|\theta) \times Pr(x_2|\theta) \times \cdots Pr(x_n|\theta) \end{split}$$

- chain rule에 의해 조건부확률들의 곱으로 분해할 수 있는데 각각 p(x_i | conditions)를 정의할 수 있다.
- 결국 알고리즘은 cross entropy를 최소화 하는 방향으로 동시에 likelihood를 최대화 하는 방향으로 학습을 진행한다.
- 확률: pdf의 면적
- 가능도(likelihood, 가능도): PDF의 y값 = 확률밀도

 $Likelihood = L(\theta|D)$

- θ : parameter, D: data
- Likelihood란 관측값 data가 주어졌을 때(given) 관측값이 θ에 대한 확률분포 P(θ)에서 나왔을 확률이다.



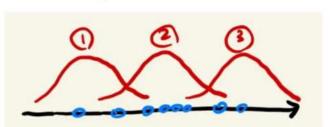


- 확률은 주어진 확률분포에서 해당 관측값이 어느정도 나올지를 표현하고, 이 값은 distribution의 area를 통해 구한다.
- 반면 가능도(Likelihood)는 관측 데이터가 있을 때 어떤 분포를 주고 그 분포에서 데이터가 나왔을 확률을 구하는 것이다.

$$L(heta|x) = P_{ heta}(X=x) = \prod_{k=1}^n P(x_k| heta)$$

- 즉, 가능도는 각 데이터 샘플에서 후보 분포 P(θ)에 대한 y value(밀도)를 (데어터의 추출이 독립적이고 연달아 일어나는 사건이므로) 곱하여 계산한다.
- 직관적으로 생각했을 때 후보가 되는 분포가 데이터를 잘 설명한다면 likelihood는 당연히 높게 나올 것이다.
- 보통은 likelihood function을 대체하여 log-likelihood function을 사용한다.

$$L(heta|x) = log(P_{ heta}(X=x)) = log\prod_{k=1}^n P(x_k| heta)$$



- 그림처럼 파란색 데이터의 분포를 설명하는 후보 분포가 1, 2, 3으로 주어졌다고 가정해보자.
- 각 분포에 대한 likelihood를 구하면 2번이 가장 큰 값을 가지게 될 것이다.
- 이렇게 가장 데이터를 잘 설명하는 분포를 likelihood를 통해 구할 수 있고 이런 방법을 Maximum Likelihood Estimation(MLE)라고 부른다.
- 최대값은 구하기 위해서는 θ에 대하여 편미분을 해서 0인 지점을 찾는 것이다.

$$\frac{\partial}{\partial \theta}L(\theta|x) = \frac{\partial}{\partial \theta}logP(x|\theta) = \sum_{i=1}^{n} \frac{\partial}{\partial \theta}logP(x_{i}|\theta) = 0$$

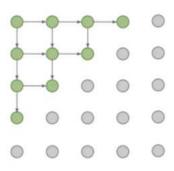
3.2 Pixel RNN

PixeIRNN [van der Oord et al. 2016]

Generate image pixels starting from corner

Dependency on previous pixels modeled using an RNN (LSTM)

Drawback: sequential generation is slow!



- PixelRNN은 왼쪽 위 코너를 시작점으로 상하좌우로 뻗어나가면서 이미지를 pixel by pixel로 생성하는 방법이다.
- 새로 만들어지는 pixel은 인접한 pixel의 영향을 받아서 새로 상성된다.
- 이전 결과에 영향을 받는 구조이기 때문에 LSTM 같은 RNN 구조를 사용한다.
- 단점으로는 순차적으로 생성하기 때문에 시간이 매우 오래 걸린다는 것이다.

3.3 Pixel CNN

PixelCNN [van der Oord et al. 2016]

Still generate image pixels starting from corner

Dependency on previous pixels now modeled using a CNN over context region

Training is faster than PixelRNN (can parallelize convolutions since context region values known from training images)

Generation must still proceed sequentially => still slow

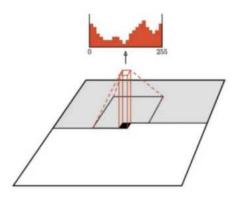


Figure copyright van der Oord et al., 2016. Reproduced with permission

- RNN을 CNN으로 대체한 방법이다.
- 인접한 좌표들에 한꺼번에 CNN을 적용시켜 PixelRNN보다 빠르다
- PixelCNN & PixelRNN 모두 explicit 하게 분포를 정의한다.
- 하지만 여전히 느리다.

04_Variational Autoencoders(VAE)

So far...

PixelCNNs define tractable density function, optimize likelihood of training data:

$$p_{\theta}(x) = \prod_{i=1}^{n} p_{\theta}(x_i|x_1, ..., x_{i-1})$$

VAEs define intractable density function with latent z:

$$p_{ heta}(x) = \int p_{ heta}(z) p_{ heta}(x|z) dz$$

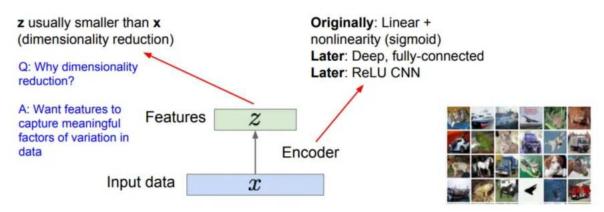
Cannot optimize directly, derive and optimize lower bound on likelihood instead

- VAE는 앞 모델들과 다르게 직접 계산이 불가능한(intractable) 확률 모델을 정의한다.
- 추가적인 잠재 변수(latent variable) z를 모델링할 것이다.
- p(x)가 적분의 형태를 띄고 있어서 직접 최적화시킬 수는 없다.
- 대신에 likelihood(p(x))의 lower bound를 구해서 최적화 시켜야만 한다.

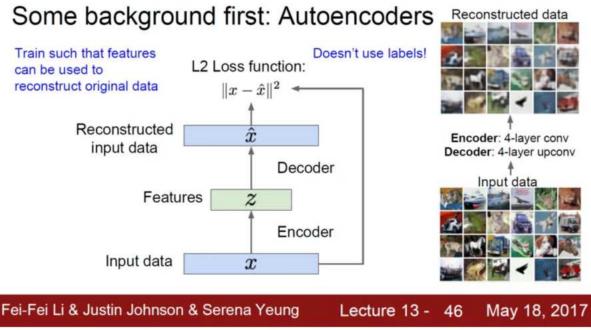
4.1 Autoencoders

Some background first: Autoencoders

Unsupervised approach for learning a lower-dimensional feature representation from unlabeled training data

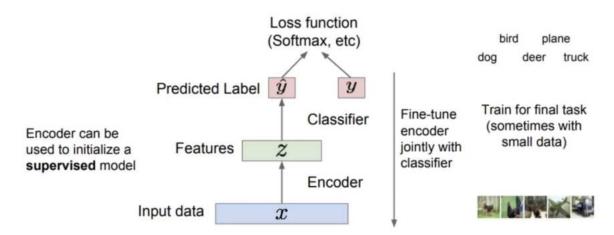


- 먼저 Input image x를 latent vector z로 encoding을 해야 한다.
- z의 차원이 x 보다 작은 이유는 x의 feature를 저장하는 벡터이기 때문에 dimensionality reduction이 발생한다.



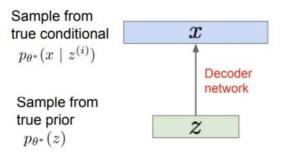
- Encoder를 통해 x → z로 변환시킨다.
- 그 후 decoder를 통해서 Reconstructed input data를 만들어 낸다.
- label를 사용하지 않고 Input data를 통해 L2 loss를 구해준다.

Some background first: Autoencoders



- train이 끝나면 decoder는 버린다.
- 위에 classifier로 붙이면 클래스 label를 출력하는 분류 문제로 바낀다.
- Autoencoder는 label되지 않는 데이터로부터 양질의 general feature representation을 학습할 수 있는 장점이 있다.

4.2 VAE

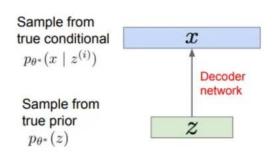


• Auto-Encoder가 잘 추출한 feature를 사용해 이미지 클래스를 분류했다면, VAE는 이 feature로 새로운 이미지를 생성할 수 없을까? 라는 질문에서 시작한다.

 $z: latent\ vector$

 $P_{\theta}(z)$: parameter가 θ 일때, latent vector z를 sampling 할 수 있는 확률밀도함수 $P_{\theta}(x|z^{(t)})$: parameter가 θ 이면서, z가 주어졌을때 x를 생성하는 확률밀도함수

Variational Autoencoders



We want to estimate the true parameters θ^* of this generative model.

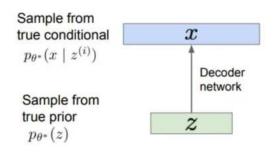
How should we represent this model?

Choose prior p(z) to be simple, e.g. Gaussian.

Conditional p(x|z) is complex (generates image) => represent with neural network

- p(z)를 보통 Gaussian으로 만든다.
- 얻은 z 분포를 가지고 p(x|z)를 샘플링한다.

Variational Autoencoders



We want to estimate the true parameters θ^* of this generative model.

How to train the model?

Remember strategy for training generative models from FVBNs. Learn model parameters to maximize likelihood of training data

$$p_{\theta}(x) = \int p_{\theta}(z) p_{\theta}(x|z) dz$$

Q: What is the problem with this?

Intractable!

Kingma and Welling, "Auto-Encoding Variational Bayes", ICLR 2014

우리가 VAE를 통해 얻고자 하는 것은 true parameter θ이다.

$$P_{ heta}(x) = \int p_{ heta}(z) p_{ heta}(x|z) dz$$

- 기대값 = 적분(확률변수 * 확률)
- 우리는 FVBN(Fully Visible Brief Network)를 사용할 것이다.
- x의 likelihood를 최대화하는 확률분포를 찾는 것이다.
- 문제는 이 적분식이 Intractable하기 때문에 최적화를 직접할 수 없다.
- 따라서 lower bound를 유도하여 likelihood를 구하게 된다.
- 우리는 decoder network를 학습시키고 싶은 것이 목적이다.
- 하지만 이 조건부 확률은 intractable하므로 다른 식을 이용해야 한다.

Variational Autoencoders: Intractability

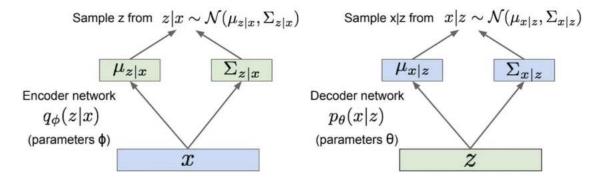
Data likelihood: $p_{ heta}(x) = \int p_{ heta}(z) p_{ heta}(x|z) dz$

Posterior density also intractable: $p_{ heta}(z|x) = p_{ heta}(x|z)p_{ heta}(z)/p_{ heta}(x)$

Intractable data likelihood

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

- P(x|z)가 구하기 어려워 bayes' rule에 의해 posterior density P(z|x)를 이용하여 수식을 다시 표현할 수 있다.
- p(x)가 intractable하므로 p(z|x)로 intractable하다.
- 따라서 우리는 p(z|x)를 근사하는 encoder network인 q(z|x)를 새로 정의하여 data likelihood에 대한 lower bound를 얻을 수 있다.



• 위에서는 decode network만 있었는데 여기서 encoder q(z|x)를 추가하여 autoencoder와 동일한 구조로 만들어준다.

Encoder

- x를 input으로 받아서 mean, covariance 추출 후 z space 상에서 분포를 생성
- z는 gaussian 분포를 따른다고 가정. (다른 분포도 가능)

Decoder:

- gaussian 분포로부터 z를 sampling
- sampling한 z를 가지고 decoder p(x|z)는 x space 상의 확률 분포를 생성하고, x를 이 분포로부터 sampling

Variational Autoencoders

Now equipped with our encoder and decoder networks, let's work out the (log) data likelihood:

$$\log p_{\theta}(x^{(i)}) = \mathbf{E}_{z \sim q_{\phi}(z|x^{(i)})} \left[\log p_{\theta}(x^{(i)}) \right] \qquad (p_{\theta}(x^{(i)}) \text{ Does not depend on } z)$$

$$= \mathbf{E}_{z} \left[\log \frac{p_{\theta}(x^{(i)}|z)p_{\theta}(z)}{p_{\theta}(z|x^{(i)})} \right] \qquad \text{Make approximate}$$

$$\operatorname{Reconstruct}$$

$$\operatorname{the input data} = \mathbf{E}_{z} \left[\log \frac{p_{\theta}(x^{(i)}|z)p_{\theta}(z)}{p_{\theta}(z|x^{(i)})} \frac{q_{\phi}(z|x^{(i)})}{q_{\phi}(z|x^{(i)})} \right] \qquad (\text{Multiply by constant}) \qquad \text{close to prior}$$

$$= \mathbf{E}_{z} \left[\log p_{\theta}(x^{(i)}|z) \right] - \mathbf{E}_{z} \left[\log \frac{q_{\phi}(z|x^{(i)})}{p_{\theta}(z)} \right] + \mathbf{E}_{z} \left[\log \frac{q_{\phi}(z|x^{(i)})}{p_{\theta}(z|x^{(i)})} \right] \qquad (\text{Logarithms})$$

$$= \mathbf{E}_{z} \left[\log p_{\theta}(x^{(i)}|z) \right] - D_{KL}(q_{\phi}(z|x^{(i)}) ||p_{\theta}(z)) + D_{KL}(q_{\phi}(z|x^{(i)}) ||p_{\theta}(z|x^{(i)})) \right]$$

$$= \mathbf{E}_{z} \left[\log p_{\theta}(x^{(i)}|z) \right] - D_{KL}(q_{\phi}(z|x^{(i)}) ||p_{\theta}(z)) + D_{KL}(q_{\phi}(z|x^{(i)}) ||p_{\theta}(z|x^{(i)})) \right]$$

$$= \mathbf{E}_{z} \left[\log p_{\theta}(x^{(i)}|z) \right] - D_{KL}(q_{\phi}(z|x^{(i)}) ||p_{\theta}(z)) + D_{KL}(q_{\phi}(z|x^{(i)}) ||p_{\theta}(z|x^{(i)})) \right]$$

$$= \mathbf{E}_{z} \left[\log p_{\theta}(x^{(i)}|z) \right] - D_{KL}(q_{\phi}(z|x^{(i)}) ||p_{\theta}(z)) + D_{KL}(q_{\phi}(z|x^{(i)}) ||p_{\theta}(z|x^{(i)})) \right]$$

$$= \mathbf{E}_{z} \left[\log p_{\theta}(x^{(i)}|z) \right] - D_{KL}(q_{\phi}(z|x^{(i)}) ||p_{\theta}(z)) + D_{KL}(q_{\phi}(z|x^{(i)}) ||p_{\theta}(z|x^{(i)})) \right]$$

$$= \mathbf{E}_{z} \left[\log p_{\theta}(x^{(i)}|z) \right] - \mathbf{E}_{z} \left[\log \frac{q_{\phi}(z|x^{(i)})}{p_{\theta}(z|x^{(i)})} \right] + \mathbf{E}_{z} \left[\log \frac{q_{\phi}(z|x^{(i)})}{p_{\theta}(z|x^{(i)})} \right]$$

$$= \mathbf{E}_{z} \left[\log p_{\theta}(x^{(i)}|z) \right] - D_{KL}(q_{\phi}(z|x^{(i)}) ||p_{\theta}(z)| + D_{KL}(q_{\phi}(z|x^{(i)})) \right]$$

$$= \mathbf{E}_{z} \left[\log p_{\theta}(x^{(i)}|z) \right] - \mathbf{E}_{z} \left[\log \frac{q_{\phi}(z|x^{(i)})}{p_{\theta}(z|x^{(i)})} \right]$$

$$= \mathbf{E}_{z} \left[\log p_{\theta}(x^{(i)}|z) \right] - \mathbf{E}_{z} \left[\log \frac{q_{\phi}(z|x^{(i)})}{p_{\theta}(z|x^{(i)})} \right]$$

$$= \mathbf{E}_{z} \left[\log p_{\theta}(x^{(i)}|z) \right] - \mathbf{E}_{z} \left[\log \frac{q_{\phi}(z|x^{(i)})}{p_{\theta}(z|x^{(i)})} \right]$$

$$= \mathbf{E}_{z} \left[\log p_{\theta}(x^{(i)}|z) \right]$$

$$= \mathbf{E}_{z} \left[\log$$

$$\begin{split} logp_{\theta}(x^{(i)}) &= E_{z \sim q_{\phi}(z|x_{i})}[logp_{\theta}(x^{(i)})] \left(p_{\theta}(x^{(i)}) \ Does \ not \ depend \ on \ z, \ ?$$
 대 값 = 적 분 값)
$$&= E_{z}[log\frac{p_{\theta}(x^{(i)}|z)p_{\theta}(z)}{p_{\theta}(x)}] \left(Bayes'Rule\right) \\ &= E_{z}[log\frac{p_{\theta}(x^{(i)}|z)p_{\theta}(z)}{p_{\theta}(x)} \frac{q_{\phi}(z|x^{i})}{q_{\phi}(z|x^{i})}] \left(Multiply \ by \ constant\right) \\ &= E_{z}[logp_{\theta}(x^{(i)}|z) - E_{z}[\frac{q_{\phi}(z|x^{(i)})}{p_{\theta}(z)}] + E_{z}[log\frac{q_{\phi}(z|x^{i})}{p_{\theta}(z|x^{i})}] \left(Logarithms\right) \\ &= E_{z}[logp_{\theta}(x^{(i)}|z) - D_{KL}(q_{\phi}(z|x^{(i)}||p_{\theta}(z)) + D_{KL}(q_{\phi}(z|x^{(i)}||p_{\theta}(z|x^{(i)}))\right) \\ \\ &D_{KL}(p||q) : KL \ Divergence, \ \stackrel{\leftarrow}{\vdash} \ pdf \ p \ p \ q^{\circ 2} \ \text{u} \ \stackrel{\rightarrow}{\vdash} \ \stackrel{\rightarrow}{\circlearrowleft} \ \stackrel{\rightarrow}{\circlearrowleft} \ \stackrel{\rightarrow}{\circlearrowleft} \ 1) \\ &= (1)^{\text{u}} \stackrel{\rightarrow}{\backsim} \stackrel{\rightarrow}{\circlearrowleft} \ \stackrel{\rightarrow}{\circlearrowleft} \ \stackrel{\rightarrow}{\circlearrowleft} \ \stackrel{\rightarrow}{\circlearrowleft} \ \stackrel{\rightarrow}{\circlearrowleft} \ \stackrel{\rightarrow}{\circlearrowleft} \ \frac{\rightarrow}{\circlearrowleft} \ \stackrel{\rightarrow}{\circlearrowleft} \ 1) \\ \\ &D_{KL}(P||Q) = \sum_{x \in X} P(x)log_{b}(\frac{P(x)}{Q(x)}) \\ &= -\sum_{x \in X} P(x)log_{b}(Q(x)) + \sum_{x \in X} P(x)log_{b}(P(x)) \\ &= -E_{P}[log_{b}(Q(x))] + E_{P}[log_{b}P(x))] \end{split}$$

Variational Autoencoders

Now equipped with our encoder and decoder networks, let's work out the (log) data likelihood:

$$\begin{split} \log p_{\theta}(x^{(i)}) &= \mathbf{E}_{z \sim q_{\phi}(z|x^{(i)})} \left[\log p_{\theta}(x^{(i)}) \right] \quad (p_{\theta}(x^{(i)}) \text{ Does not depend on } z) \\ &= \mathbf{E}_{z} \left[\log \frac{p_{\theta}(x^{(i)} \mid z)p_{\theta}(z)}{p_{\theta}(z \mid x^{(i)})} \right] \quad \text{(Bayes' Rule)} \\ &= \mathbf{E}_{z} \left[\log \frac{p_{\theta}(x^{(i)} \mid z)p_{\theta}(z)}{p_{\theta}(z \mid x^{(i)})} \frac{q_{\phi}(z \mid x^{(i)})}{q_{\phi}(z \mid x^{(i)})} \right] \quad \text{(Multiply by constant)} \\ &= \mathbf{E}_{z} \left[\log p_{\theta}(x^{(i)} \mid z) \right] - \mathbf{E}_{z} \left[\log \frac{q_{\phi}(z \mid x^{(i)})}{p_{\theta}(z)} \right] + \mathbf{E}_{z} \left[\log \frac{q_{\phi}(z \mid x^{(i)})}{p_{\theta}(z \mid x^{(i)})} \right] \quad \text{(Logarithms)} \\ &= \mathbf{E}_{z} \left[\log p_{\theta}(x^{(i)} \mid z) \right] - D_{KL}(q_{\phi}(z \mid x^{(i)}) || p_{\theta}(z)) + D_{KL}(q_{\phi}(z \mid x^{(i)}) || p_{\theta}(z \mid x^{(i)})) \right] \\ & \uparrow \\ \text{Decoder network gives p}_{\theta}(\mathbf{x} \mid \mathbf{z}), \text{ can} \\ \text{compute estimate of this term through} \\ \text{sampling. (Sampling differentiable} \\ \text{through reparam. trick, see paper.)} \\ \text{This KL term (between} \\ \text{Gaussians for encoder and z} \\ \text{prior) has nice closed-form} \\ \text{solution!} \\ \text{Decoder network gives p}_{\theta}(\mathbf{z} \mid \mathbf{z}) \\ \text{This KL term (between} \\ \text{Gaussians for encoder and z} \\ \text{prior) has nice closed-form} \\ \text{solution!} \\ \text{Decoder network gives p}_{\theta}(\mathbf{z} \mid \mathbf{z}) \\ \text{This KL term (between} \\ \text{Gaussians for encoder and z} \\ \text{prior) has nice closed-form} \\ \text{solution!} \\ \text{Decoder network gives p}_{\theta}(\mathbf{z} \mid \mathbf{z}) \\ \text{This KL term (between} \\ \text{Gaussians for encoder and z} \\ \text{Substitute of this term (between condense of this term$$

- p_θ(x|z): Decoder network → 계산 가능
- KL 앞 부분: Encoder network + z prior → 계산 가능
- KL 뒷 부분: p_θ(z|x) intractable → 계산 불가능, but KL divergence가 항상 0보다 크므로 lower bound를 계산할 수 있다.

Variational Autoencoders

Now equipped with our encoder and decoder networks, let's work out the (log) data likelihood:

$$\begin{split} \log p_{\theta}(x^{(i)}) &= \mathbf{E}_{z \sim q_{\phi}(z|x^{(i)})} \left[\log p_{\theta}(x^{(i)}) \right] \quad (p_{\theta}(x^{(i)}) \text{ Does not depend on } z) \\ &= \mathbf{E}_{z} \left[\log \frac{p_{\theta}(x^{(i)} \mid z) p_{\theta}(z)}{p_{\theta}(z \mid x^{(i)})} \right] \quad \text{(Bayes' Rule)} \\ &= \mathbf{E}_{z} \left[\log \frac{p_{\theta}(x^{(i)} \mid z) p_{\theta}(z)}{p_{\theta}(z \mid x^{(i)})} \frac{q_{\phi}(z \mid x^{(i)})}{q_{\phi}(z \mid x^{(i)})} \right] \quad \text{(Multiply by constant)} \\ &= \mathbf{E}_{z} \left[\log p_{\theta}(x^{(i)} \mid z) \right] - \mathbf{E}_{z} \left[\log \frac{q_{\phi}(z \mid x^{(i)})}{p_{\theta}(z)} \right] + \mathbf{E}_{z} \left[\log \frac{q_{\phi}(z \mid x^{(i)})}{p_{\theta}(z \mid x^{(i)})} \right] \quad \text{(Logarithms)} \\ &= \underbrace{\mathbf{E}_{z} \left[\log p_{\theta}(x^{(i)} \mid z) \right] - D_{KL}(q_{\phi}(z \mid x^{(i)}) || p_{\theta}(z))}_{\mathcal{L}(x^{(i)}, \theta, \phi)} + \underbrace{D_{KL}(q_{\phi}(z \mid x^{(i)}) || p_{\theta}(z \mid x^{(i)}))}_{\geq 0} \right]}_{\geq 0} \end{split}$$

Tractable lower bound which we can take gradient of and optimize! ($p_{\theta}(x|z)$ differentiable, KL term differentiable)

• 따라서 앞부분을 Tractable lower bound로 하여 gradient를 구하고 optimizer를 실행한다.

Variational Autoencoders

Now equipped with our encoder and decoder networks, let's work out the (log) data likelihood:

$$\log p_{\theta}(x^{(i)}) = \mathbf{E}_{z \sim q_{\phi}(z|x^{(i)})} \left[\log p_{\theta}(x^{(i)})\right] \qquad (p_{\theta}(x^{(i)}) \text{ Does not depend on } z)$$

$$= \mathbf{E}_{z} \left[\log \frac{p_{\theta}(x^{(i)} \mid z)p_{\theta}(z)}{p_{\theta}(z \mid x^{(i)})}\right] \qquad \text{(Bayes' Rule)}$$

$$\mathbf{Reconstruct}$$

$$\mathbf{the input data} = \mathbf{E}_{z} \left[\log \frac{p_{\theta}(x^{(i)} \mid z)p_{\theta}(z)}{p_{\theta}(z \mid x^{(i)})} \frac{q_{\phi}(z \mid x^{(i)})}{q_{\phi}(z \mid x^{(i)})}\right] \qquad \text{(Multiply by constant)} \qquad \text{close to prior}$$

$$= \mathbf{E}_{z} \left[\log p_{\theta}(x^{(i)} \mid z)\right] - \mathbf{E}_{z} \left[\log \frac{q_{\phi}(z \mid x^{(i)})}{p_{\theta}(z)}\right] + \mathbf{E}_{z} \left[\log \frac{q_{\phi}(z \mid x^{(i)})}{p_{\theta}(z \mid x^{(i)})}\right] \qquad \text{(Logarithms)}$$

$$= \mathbf{E}_{z} \left[\log p_{\theta}(x^{(i)} \mid z)\right] - D_{KL}(q_{\phi}(z \mid x^{(i)}) || p_{\theta}(z)) + D_{KL}(q_{\phi}(z \mid x^{(i)}) || p_{\theta}(z \mid x^{(i)}))$$

$$\geq 0$$

$$D_{z} \mathcal{L}(x^{(i)}, \theta, \phi)$$

 $egin{aligned} Variational \ lower \ bound \ (``ELBO") \ logp_{ heta}(x^{(i)}) & \geq \zeta(x^{(i)}, heta, \phi) \ Training: \ Maximize \ lower \ bound \ heta^*, \phi^* & = argmax_{(heta, \phi)} \sum_{i=1}^N \zeta(x^{(i)}, heta, \phi) \end{aligned}$

Variational Autoencoders \hat{x} Maximize Putting it all together: maximizing the Sample x|z from $x|z \sim \mathcal{N}(\mu_{x|z}, \Sigma_{x|z})$ likelihood of likelihood lower bound original input being $\mu_{x|z}$ reconstructed Decoder network $p_{\theta}(x|z)$ zSample z from $z|x \sim \mathcal{N}(\mu_{z|x}, \Sigma_{z|x})$ Make approximate posterior distribution close to prior $\mu_{z|x}$ Encoder network For every minibatch of input

 $q_{\phi}(z|x)$

Input Data

 \boldsymbol{x}

pass, and then backprop!

• Input Encoder과정에서 뒷 부분인 approximate posterior distribution을 계산한다.

data: compute this forward

decoder부분에서 앞부분에 대한 값을 얻는다.

Variational Autoencoders

Probabilistic spin to traditional autoencoders => allows generating data
Defines an intractable density => derive and optimize a (variational) lower bound

Pros:

- Principled approach to generative models
- Allows inference of q(z|x), can be useful feature representation for other tasks

Cons:

- Maximizes lower bound of likelihood: okay, but not as good evaluation as PixelRNN/PixelCNN
- Samples blurrier and lower quality compared to state-of-the-art (GANs)

Active areas of research:

- More flexible approximations, e.g. richer approximate posterior instead of diagonal Gaussian
- Incorporating structure in latent variables
- VAE는 intractable density 확률 q(z|x)에 대하여 lower bound를 이용해 optimize를 하였다.
- 하지만 lower bound를 이용하기 때문에 PixelRNN/CNN보다 좋은 성능을 내지 못하고 이미지가 흐리다는 단점이 있다.

05_GAN(Generative Adversarial Networks)

So far...

PixelCNNs define tractable density function, optimize likelihood of training data:

$$p_{\theta}(x) = \prod_{i=1}^{n} p_{\theta}(x_i|x_1, ..., x_{i-1})$$

VAEs define intractable density function with latent z:

$$p_{\theta}(x) = \int p_{\theta}(z)p_{\theta}(x|z)dz$$

Cannot optimize directly, derive and optimize lower bound on likelihood instead

What if we give up on explicitly modeling density, and just want ability to sample?

GANs: don't work with any explicit density function!
Instead, take game-theoretic approach: learn to generate from training distribution through 2-player game

- 지금까지는 explicit하게 density function을 구해서 직접 계산을 하였다.
- 그런데 우리가 explicit를 포기하고 그냥 sampling만 할 수 있다면 어떨까?
- 게임 이론 접근을 통해 training distribution으로부터 생성하는 방법을 학습할 것이다.

Generative Adversarial Networks

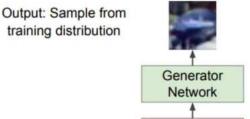
lan Goodfellow et al., "Generative Adversarial Nets", NIPS 2014

Problem: Want to sample from complex, high-dimensional training distribution. No direct way to do this!

Solution: Sample from a simple distribution, e.g. random noise. Learn transformation to training distribution.

Q: What can we use to represent this complex transformation?

A: A neural network!



Z

Input: Random noise

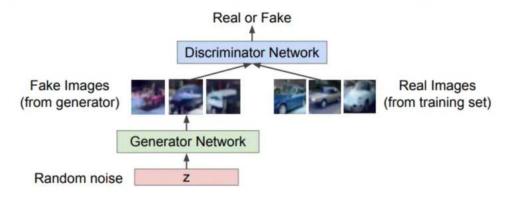
GAN도 Neural network를 통해서 문제를 해결한다.

5.1 Training GANs: Two-player game

Training GANs: Two-player game

lan Goodfellow et al., "Generative Adversarial Nets", NIPS 2014

Generator network: try to fool the discriminator by generating real-looking images **Discriminator network**: try to distinguish between real and fake images



- 2개의 네트워크가 게임을 하는 구조이다.
- Generator network는 실제 같은 fake image를 만들어서 discriminator를 속이는 것이다.
- 반대로 Discriminator network는 실제 사진과 가짜 사진을 구별하는 것이다.

Training GANs: Two-player game

lan Goodfellow et al., "Generative Adversarial Nets", NIPS 2014



Generator network: try to fool the discriminator by generating real-looking images **Discriminator network**: try to distinguish between real and fake images

Train jointly in minimax game

Discriminator outputs likelihood in (0,1) of real image

Minimax objective function:

$$\min_{\theta_g} \max_{\theta_d} \left[\mathbb{E}_{x \sim p_{data}} \log D_{\theta_d}(x) + \mathbb{E}_{z \sim p(z)} \log (1 - D_{\theta_d}(G_{\theta_g}(z))) \right]$$
 Discriminator output for real data x Discriminator output for generated fake data G(z)

- Discriminator (θ_d) wants to maximize objective such that D(x) is close to 1 (real) and D(G(z)) is close to 0 (fake)
- Generator (θ_g) wants to minimize objective such that D(G(z)) is close to 1 (discriminator is fooled into thinking generated G(z) is real)
- Discriminator는 진짜 데이터는 1로 판단하여 첫 번째 항을 0으로, 두 번째 가짜 데이터를 0으로 판단하여 두 번째 항도 0으로 만드는 것이 목표이다.
- 즉. Discriminator가 얻을 수 있는 이상적인 최대값은 0이다.
- 반대로 Generator는 두 번째 항의 D(G(z)) = 1로 판단하게 하여 두 번째 항 전체를 -∞ 만드는 것이 목표이다.
- 즉, Generator가 얻을 수 있는 이상적인 최솟값은 -∞이다.

 $\begin{aligned} & Minimax \ objective \ function: \\ & min_{\theta_s} max_{\theta_d} [E_{x \sim p_{data}} log D_{\theta_d}(x) + E_{z \sim p_z} log (1 - D_{\theta_d}(G_{\theta_s}(x)))] \end{aligned}$

Training GANs: Two-player game

lan Goodfellow et al., "Generative Adversarial Nets", NIPS 2014

Minimax objective function:

$$\min_{\theta_g} \max_{\theta_d} \left[\mathbb{E}_{x \sim p_{data}} \log D_{\theta_d}(x) + \mathbb{E}_{z \sim p(z)} \log (1 - D_{\theta_d}(G_{\theta_g}(z))) \right]$$

Alternate between:

1. Gradient ascent on discriminator

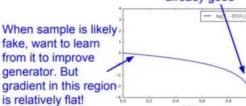
$$\max_{\theta_d} \left[\mathbb{E}_{x \sim p_{data}} \log D_{\theta_d}(x) + \mathbb{E}_{z \sim p(z)} \log(1 - D_{\theta_d}(G_{\theta_g}(z))) \right]$$

Gradient signal dominated by region where sample is already good

Gradient descent on generator

$$\min_{\theta_g} \mathbb{E}_{z \sim p(z)} \log(1 - D_{\theta_d}(G_{\theta_g}(z)))$$

In practice, optimizing this generator objective does not work well!



Gradient ascent on discriminator : $\max_{\theta_d} [E_{z \sim p_{data}} log D_{\theta_d}(x) + E_{z \sim p_z} log (1 - D_{\theta_d}(G_{\theta_z}(x)))]]$

Gradient descent on discriminator : $min_{\theta_x}[E_{z,p_x}log(1 - D_{\theta_\theta}(G_{\theta_\theta}(x)))]$

- 최소화와 최대화 문제가 같이 얽혀있기 때문에 Gradient ascent와 gradient descent를 번결아 진행한다.
- 하지만 이렇게 하면 좋은 결과를 얻기 힘들다고 한다.
- 그래프를 한번 보자. x축은 D(G(z))를 뜻한다.
- generator의 성능은 D(G(z))값이 높을 수록 좋다.
- D(G(z))값이 작다는 것인 generator를 더 개선해줘야 하는데 gradient가 flat하기 때문에 학습에 어려움이 생긴다.
- 반대로 D(G(z))값이 너무 커지게 되면 이미 잘 완성되었지만 gradient값이 커져 문제가 발생한다.

Training GANs: Two-player game

Minimax objective function:

$$\min_{\theta_g} \max_{\theta_d} \left[\mathbb{E}_{x \sim p_{data}} \log D_{\theta_d}(x) + \mathbb{E}_{z \sim p(z)} \log (1 - D_{\theta_d}(G_{\theta_g}(z))) \right]$$

Alternate between:

Gradient ascent on discriminator

$$\max_{\theta_d} \left[\mathbb{E}_{x \sim p_{data}} \log D_{\theta_d}(x) + \mathbb{E}_{z \sim p(z)} \log (1 - D_{\theta_d}(G_{\theta_g}(z))) \right]$$

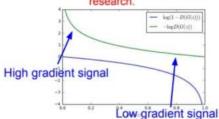
Aside: Jointly training two networks is challenging, can be unstable. Choosing objectives with better loss landscapes helps training, is an active area of research.

Instead: Gradient ascent on generator, different

objective

$$\max_{\theta_a} \mathbb{E}_{z \sim p(z)} \log(D_{\theta_d}(G_{\theta_g}(z)))$$

Instead of minimizing likelihood of discriminator being correct, now maximize likelihood of discriminator being wrong. Same objective of fooling discriminator, but now higher gradient signal for bad samples => works much better! Standard in practice.



• 따라서 Generator도 Gradient ascent를 사용하여 문제를 해결한다.

Gradient ascent on discriminator :

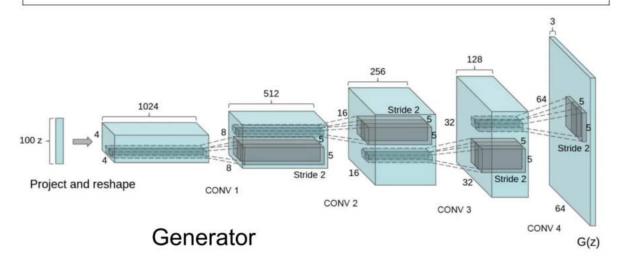
$$max_{\theta_a}[E_{z..p_z}log(D_{\theta_d}(G_{\theta_a}(x)))]$$

- 결과적으로 generator를 통해서 이미지를 생성할 수 있다.
- 기본적으로 GAN만 구현하면 성능이 떨어질 수 있다.

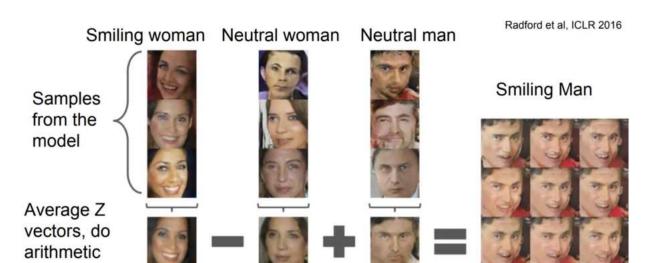
Generator is an upsampling network with fractionally-strided convolutions Discriminator is a convolutional network

Architecture guidelines for stable Deep Convolutional GANs

- Replace any pooling layers with strided convolutions (discriminator) and fractional-strided convolutions (generator).
- · Use batchnorm in both the generator and the discriminator.
- Remove fully connected hidden layers for deeper architectures.
- · Use ReLU activation in generator for all layers except for the output, which uses Tanh.
- · Use LeakyReLU activation in the discriminator for all layers.



• CNN을 이용하여 이미지를 처리하고 Generator에 집어넣으면 성능이 더 개선된다.



• 이미지들의 평균을 덧셈 뺄셈을 통해서 어떤 특징을 빼고 더할 수 있는데 이것이 z의 역할이다.

Pros:

Beautiful, state-of-the-art samples!

Cons:

- Trickier / more unstable to train
- Can't solve inference queries such as p(x), p(z|x)
- 아름다운 방법이지만 train할 때 불안정하다는 단점이 있다.