識別器による最適輸送

Akinori Tanaka (RIKEN iTHEMS/AIP, 慶應数理)
AkinoriTanaka-phys

※1 Images are derived from CIFAR-10,
and some pretrained machines aveilable from github.

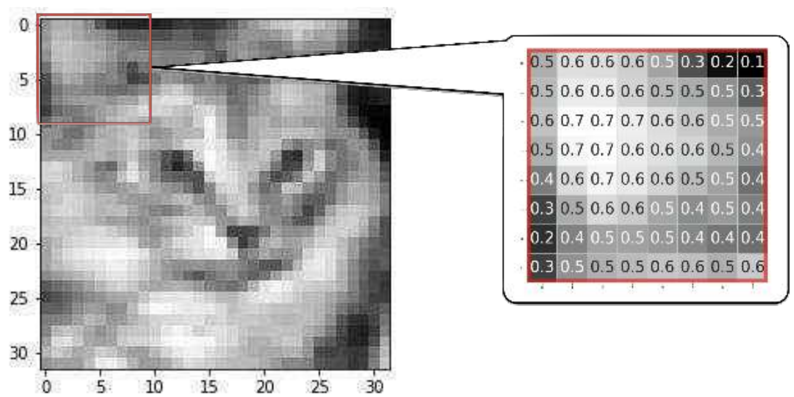
※2 In this slide, we use "sloppy" math notaions.
Sometimes, $\min$ should be replaced by $\inf$, etc.

TOC

1. Generative Models

1.1. What is the Generative Model ?

■画像＝ベクトル



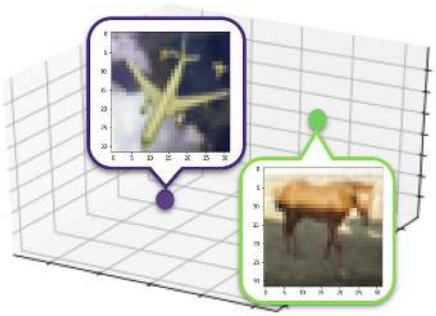
$$\mathbf{x} = [0.5, 0.6, 0.6, 0.6, 0.5, \ldots]$$

注意：

- カラー画像は、例えば、赤、緑、青、の次元も加わる
- テンソル(多次元配列)として扱う場合が多い

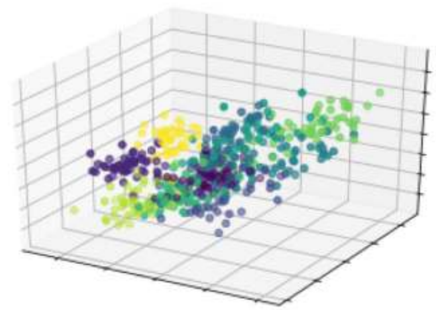
1.1. What is the Generative Model ?

■$\mathbf{x}$ を「図示」してみる

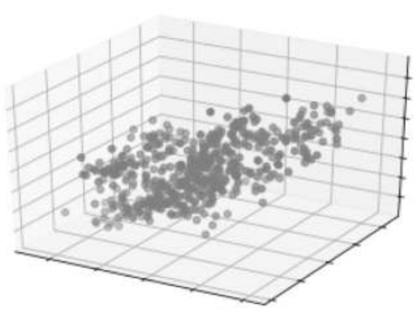


たくさん集める

⟶



■仮定：「画像生成確率」があると考える

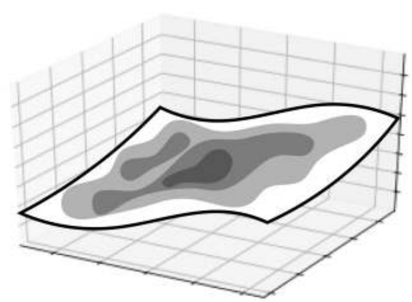


無限に集める

⟶

⟵

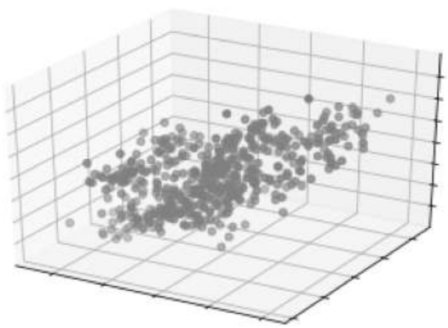
サンプリング



1.1. What is the Generative Model ?

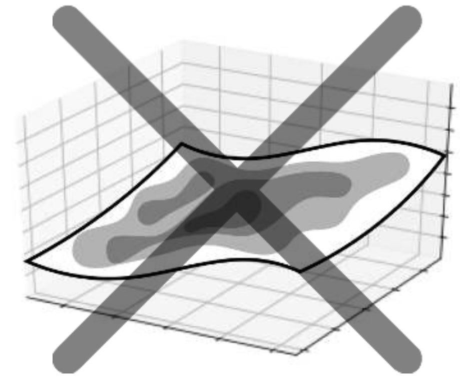
■生成モデル (Generative Model)

$p_{\mathcal{X}}(\mathbf{x})$



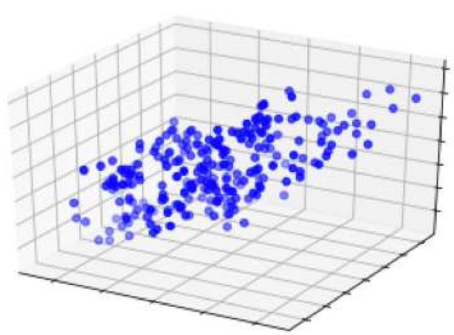
無限に集める
$\longrightarrow$

$\longleftarrow$
サンプリング

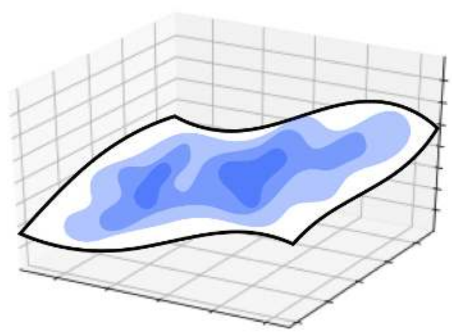


$\upharpoonleft\!\downharpoonright$合わせる

生成モデル：$p_{\theta}(\mathbf{x})$



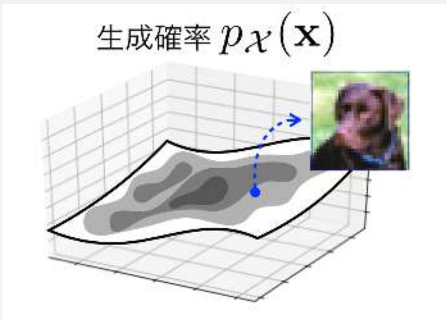
$\longleftarrow$
サンプリング



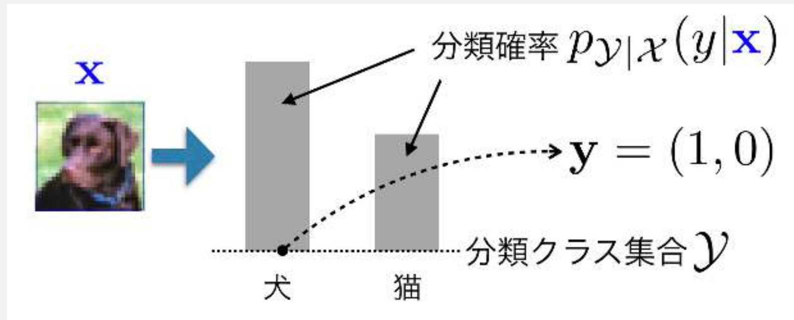
1.2. Motivations

■教師あり機械学習

・入力ドメイン



・出力ドメイン



- 問題ごとに背後に $p_{\mathcal{X}}, p_{\mathcal{Y}|\mathcal{X}}$ が存在すると考える
- 学習のゴールはサンプルだけから $p_{\mathcal{Y}|\mathcal{X}}$ を近似すること

+生成モデル=$p_{\mathcal{X}}$ の近似

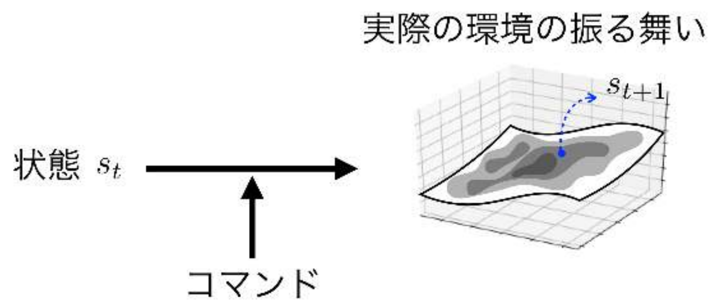
→ **敵対的摂動** [Szegedy+ (2013)] に強固に？

(c.f. Tomczakのブログ)

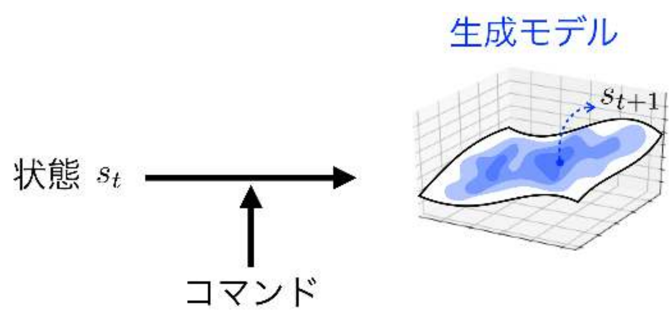
1.2. Motivations

■強化学習 (モデルベース強化学習)

環境の振る舞い:



生成モデル:

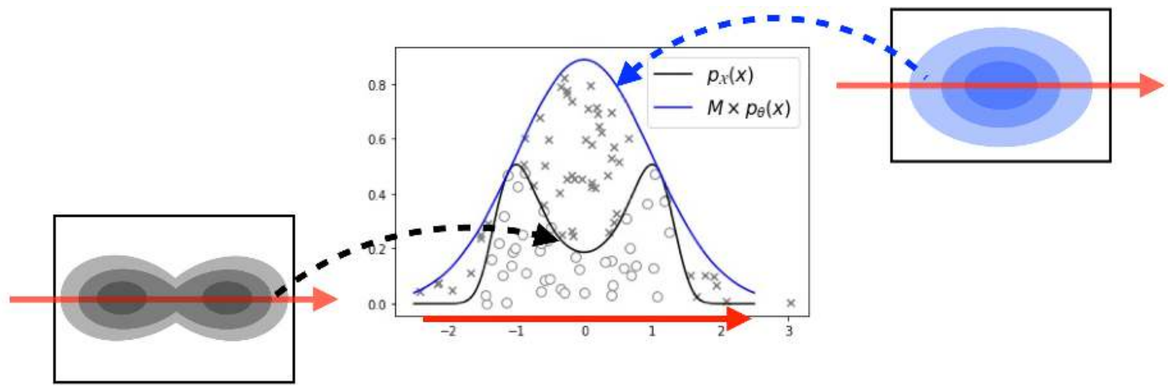


1.環境が高価な場合に(うまくいけば)有用
2.手法として興味深い(c.f. [Ha&Schmidhuber (2018)])

1.2. Motivations

■ $p_{\mathcal{X}}$ からのサンプリング

- 棄却サンプリング



提案分布(生成モデル) p_θ が $p_{\mathcal{X}}$ に近いと受け入れ確率↑

(注意：確率密度比 $\frac{p_\theta(\mathbf{x})}{p_{\mathcal{X}}(\mathbf{x})}$ の値が必要)

応用: SLMC [Liu+ (2016)] 詳細は DLAP第1回、23回

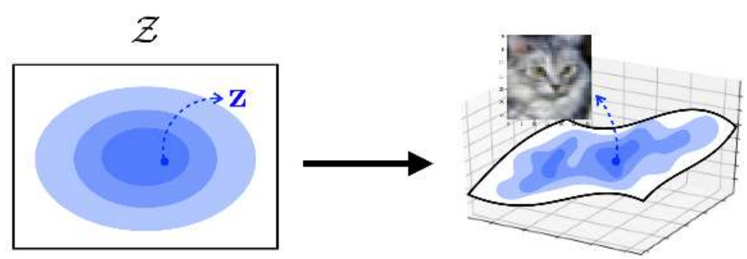
1.3. Deep Generative Models

色々な手法がある けれど、今回は以下に注目

■潜在変数モデル

別の空間 $\mathcal{Z}$ から $\mathcal{X}$ 上の確率が由来すると考える

$$p_\theta(\mathbf{x}) = \int_{\mathcal{Z}} p_\theta(\mathbf{x} \mid \mathbf{z}) p_{\mathcal{Z}}(\mathbf{z}) d\mathbf{z}$$

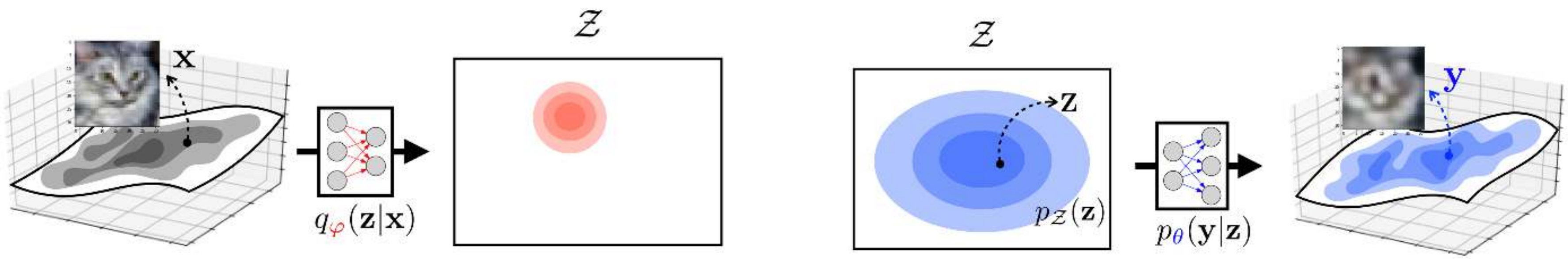


深層学習で代表的な２つ

- 変分自己符号化器 [Kingma&Welling (2013)]
- 敵対的生成ネットワーク [Goodfellow+ (2014)]

1.3. Deep Generative Models

■変分自己符号化器(Variational Auto-Encoder, VAE)



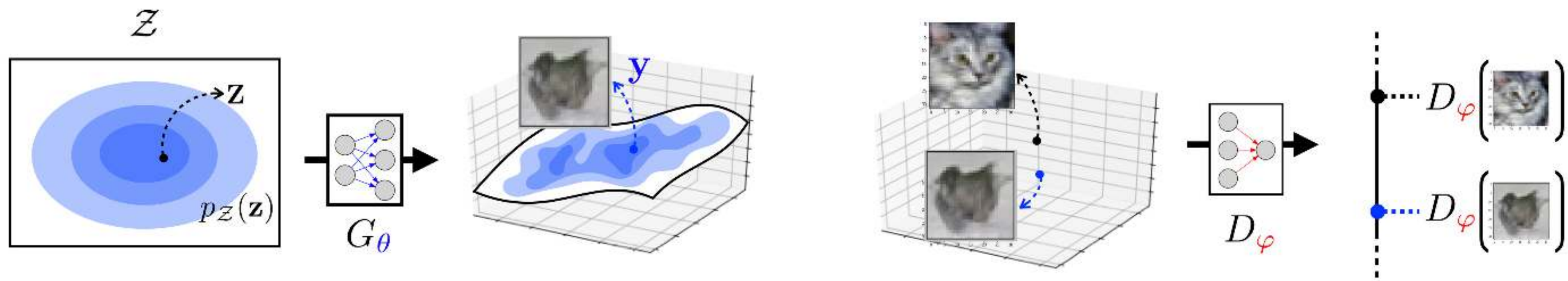
符号化器　　　　　　　　復号化器

- 目的関数と訓練

$$\left[\underbrace{D_{KL}\left(q_{\varphi}(\mathbf{z}|\mathbf{x})\middle\|p_{\mathcal{Z}}(\mathbf{z})\right)}_{\text{符号化誤差}}\underbrace{-\mathbb{E}_{q_{\varphi}(\mathbf{z}|\mathbf{x})}\left[\log p_{\theta}(\mathbf{y}|\mathbf{z})\right]}_{\text{再構成誤差}}\right]\downarrow \text{w.r.t.}\,\varphi,\theta$$

1.3. Deep Generative Models

■敵対的生成ネットワーク(Generative Adversarial Net, GAN)



生成器　　　　　　　　　　　　識別器

- 目的関数と訓練 ($\sigma(D) = \frac{1}{1+e^{-D}}$)

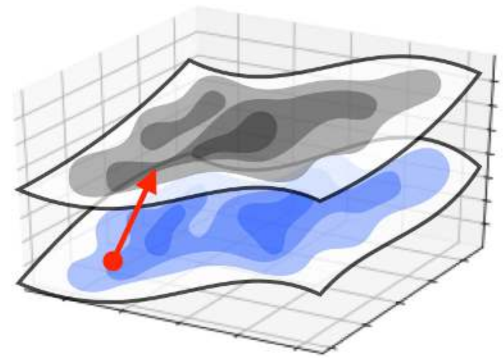
$$\Big[\underbrace{\log \sigma(D_{\varphi}(\mathbf{x}))}_{\text{本物を見分ける項}} + \underbrace{\log(1 - \sigma(D_{\varphi}(G_{\theta}(\mathbf{z}))))}_{\text{偽物を見分ける項}}\Big] \begin{array}{l} \uparrow \text{ w.r.t. } \varphi \\ \downarrow \text{ w.r.t. } \theta \end{array}$$

2. Optimal Transport (OT)

2.1. What is the Optimal Transport ?

■Mongeの問題

コスト最小限の輸送 $\begin{array}{c} p(\mathbf{x}) \\ \uparrow_{T} \\ q(\mathbf{x}) \end{array}$



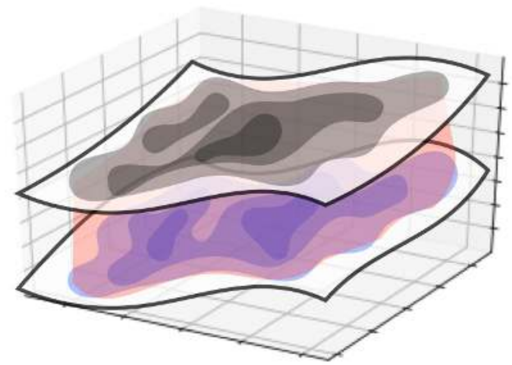
- 輸送コスト最小方法を求めたい： $\min_{T} \int \underbrace{\|\mathbf{x} - T(\mathbf{x})\|}_{\text{ユークリッド距離}} q(\mathbf{x}) d\mathbf{x}$
- ただし、確率解釈は保存したい： $\int \delta(\mathbf{x} - T(\mathbf{y})) q(\mathbf{y}) d\mathbf{y} = p(\mathbf{x})$

解の存在は、一般に非自明（いつでも存在するとは限らない）

2.1. What is the Optimal Transport ?

■Kantorovichによる問題の緩和

コスト最小限の確率 $p(\mathbf{x}) \,\Big|_{\pi}\, q(\mathbf{x})$



- 輸送コスト最小方法を求めたい： $\min_{\pi} \int \underbrace{\|\mathbf{x}-\mathbf{y}\|}_{\text{ユークリッド距離}} \pi(\mathbf{x},\mathbf{y}) d\mathbf{x} d\mathbf{y}$
- 確率解釈保存： $\int \pi(\mathbf{x},\mathbf{y}) d\mathbf{y} = p(\mathbf{x})$、$\int \pi(\mathbf{x},\mathbf{y}) d\mathbf{x} = q(\mathbf{y})$

確率間の距離とみなせる: $D_W(p,q)$ (1-Wasserstein距離)

2.2. Generative models and Optimal transport

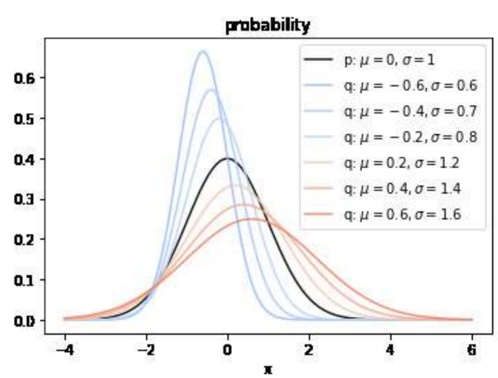
生成モデルの訓練：

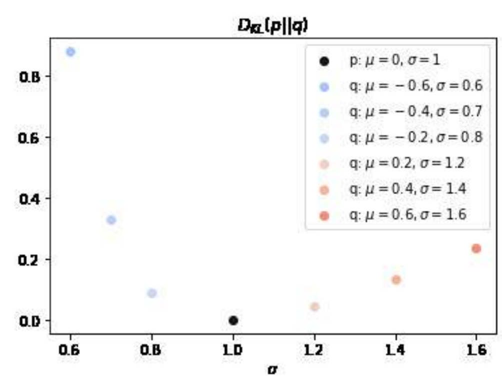
$$\min_{\color{blue}\theta} \underbrace{D(p_{\mathcal{X}}, {\color{blue}p_\theta})}_{\text{何らか距離、0以上}}$$

■例：$D = D_{KL}$(サンプル数無限の最尤推定)

$$p_{\mathcal{X}}(x) = \frac{e^{-\frac{x^2}{2}}}{\sqrt{2\pi}}$$

$$\color{blue} p_{\mu,\sigma}(x) = \frac{e^{-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}}}{\sqrt{2\pi\sigma^2}}$$

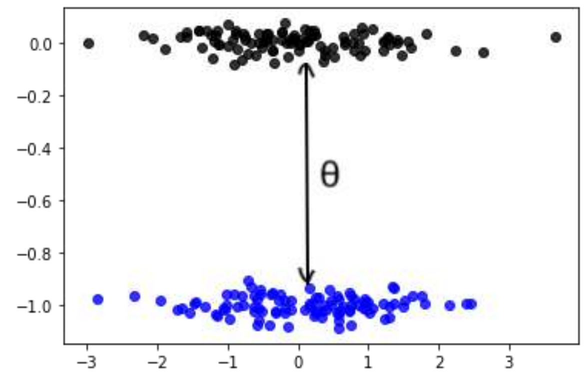




2.2. Generative models and Optimal transport

■確率分布が重ならないとき [Arjovsky+ (2017)]

$$p_{\mathcal{X}}(x) = \{\bullet\}$$
$$p_\theta(x) = \{\bullet\}$$



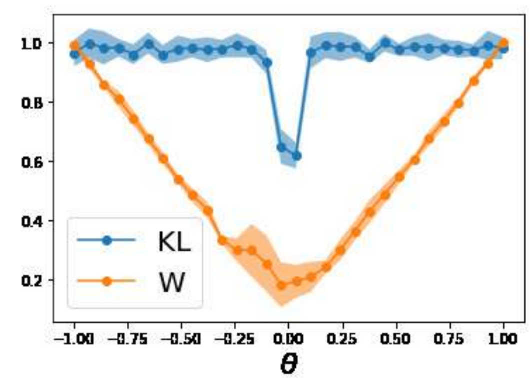
- Kullback-Leibler vs Wasserstein

確率分布が重ならない場合

D_{KL} ：ほとんど勾配がない

D_W: 勾配をもつ

$\Rightarrow \min_\theta D_W(p_{\mathcal{X}}, p_\theta)$がベター?



2.3. Duality

■ Wasserstein Auto-Encoder [Tolstikhin+ (2017)]

$D_W(p_{\mathcal{X}}, p_\theta)$ を最適輸送問題と思う：

$$\min_{\theta} \underbrace{\min_{\pi \in \Pi(p_{\mathcal{X}}, p_\theta)} \int \|\mathbf{x} - \mathbf{y}\| \pi(\mathbf{x}, \mathbf{y}) d\mathbf{x} d\mathbf{y}}_{D_W(p_{\mathcal{X}}, p_\theta)}$$

で $\pi(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \int d\mathbf{z}\, p_\theta(\mathbf{y}|\mathbf{z}) q_\varphi(\mathbf{z}|\mathbf{x}) p_{\mathcal{X}}(\mathbf{x})$ と仮定すると？

- 最適輸送問題＝再構成誤差最小化
- 確率解釈保存＝符号化誤差最小化

変分自己符号化機の一種と思える

2.3. Duality

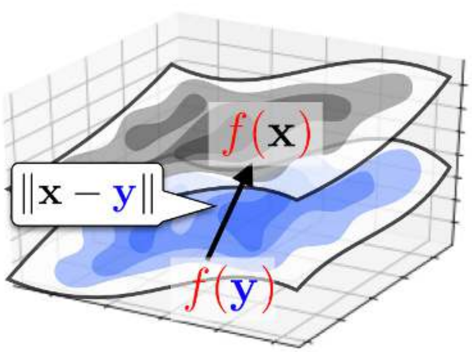
■ Kantorovich-Rubinstein 双対性

最適輸送問題　　　　　　　　　その双対問題

$$\min_{\pi \in \Pi(p,q)} \int \|\mathbf{x}-\mathbf{y}\| \pi(\mathbf{x},\mathbf{y}) d\mathbf{x} d\mathbf{y} \quad = D_W = \quad \max_{f \in \mathrm{Lip}} \left\{ \int f(\mathbf{x}) p(\mathbf{x}) d\mathbf{x} - \int f(\mathbf{y}) q(\mathbf{y}) d\mathbf{y} \right\}$$

Lipはリプシッツ制約: $|f(\mathbf{x}) - f(\mathbf{y})| \leq \|\mathbf{x}-\mathbf{y}\|$

- 直感的(?)な説明(きちんとした説明:Herrmann氏ブログ)



最適輸送問題(運送屋)

$\|\mathbf{x}-\mathbf{y}\|$ 円の報酬

※なるべく安い輸送を目指す

双対問題(商人)

$f(\mathbf{y})$円で買い$f(\mathbf{x})$円で売る

※運送屋より安くないと選ばれない

$$\hookrightarrow \underbrace{|f(\mathbf{x}) - f(\mathbf{y})|}_{\text{商人儲け}} \leq \underbrace{\|\mathbf{x}-\mathbf{y}\|}_{\text{運送屋儲け}}$$

2.3. Duality

■ Wasserstein GAN [Arjovsky+ (2017)]

$D_W(p_{\mathcal{X}}, p_\theta)$ を双対問題と思う：

$$\min_{\theta} \underbrace{\max_{f \in \mathrm{Lip}} \left\{ \int f(\mathbf{x}) p_{\mathcal{X}}(\mathbf{x}) d\mathbf{x} - \int f(\mathbf{y}) p_\theta(\mathbf{y}) d\mathbf{y} \right\}}_{D_W(p_{\mathcal{X}}, p_\theta)}$$

で $f(\mathbf{x}) = D_\varphi(\mathbf{x})$ と仮定すると？

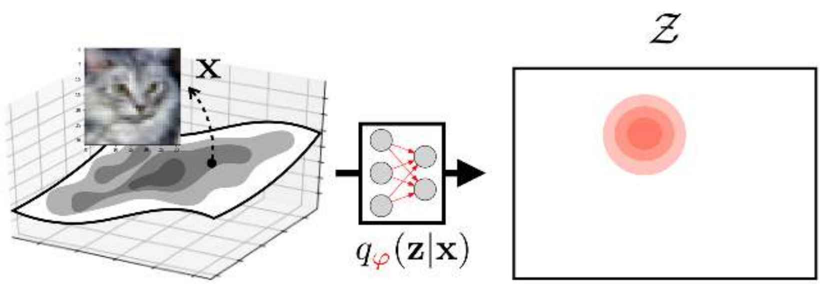
- １項目＝本物を見分ける項
- ２項目＝偽物を見分ける項

$p_\theta(\mathbf{y}) = \int \delta(\mathbf{y} - G_\theta(\mathbf{z})) p_{\mathcal{Z}}(\mathbf{z}) d\mathbf{z}$ → 敵対的生成ネットワークの一種

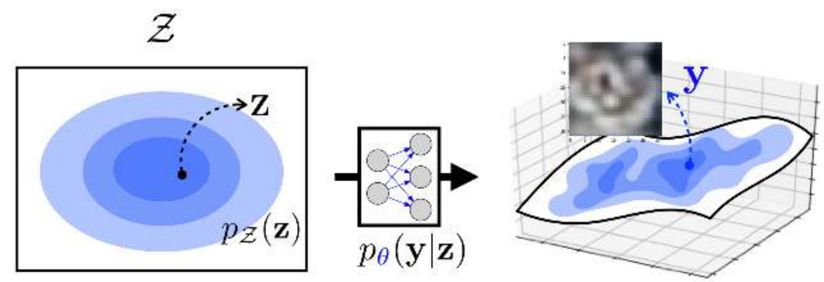
3. Post processing on DGMs

3.1. Motivations

■VAEのトレーニング後



符号化器



復号化器

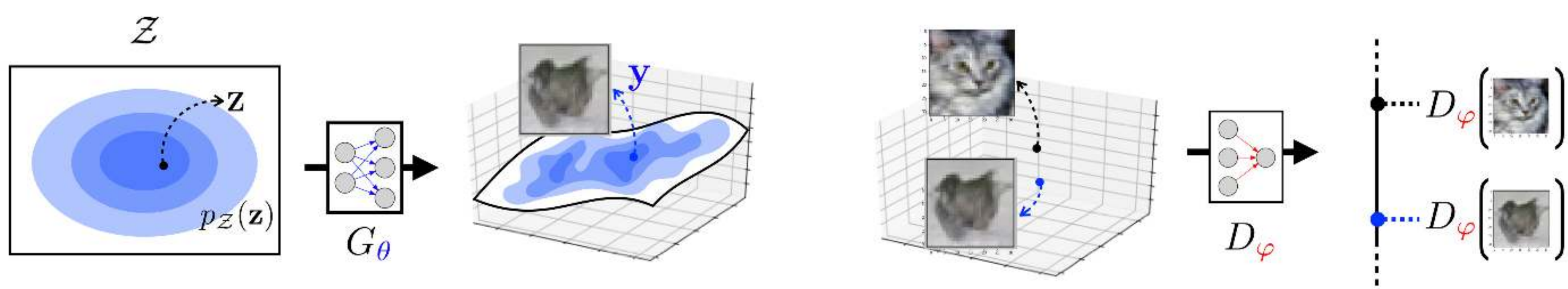
トレーニング後の用途：

- 復号化器 ＝ 生成モデル（潜在空間から画像を作る）
- 符号化器 ＝ 画像を潜在空間に埋め込む

どちらも使える

3.1. Motivations

■GANのトレーニング後



生成器　　　　　　　　　　　　識別器

トレーニング後の用途：

- 生成器 ＝ 生成モデル（潜在空間から画像を作る）
- 識別器 ＝ ？？？

識別器も訓練するので、何かに使いたい

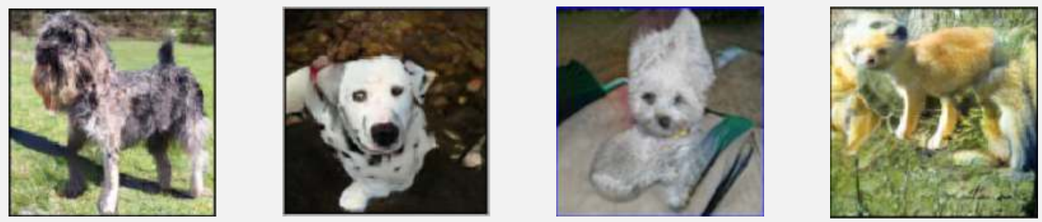
3.1. Motivations

■GANのトレーニング後

生成画像に「不自然な部分」が出てくる場合がある

◎ ○ △ ×

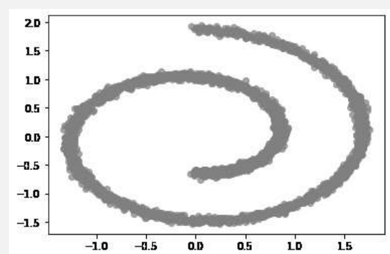
画像の例:

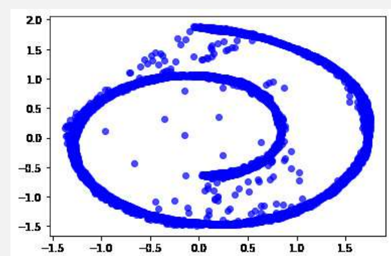


https://github.com/pfnet-research/sngan_projection

$p_{\mathcal{X}}(\mathbf{x})$ $p_\theta(\mathbf{x})$

2Dの例:





どうにかして「不自然な部分」を直せないか？

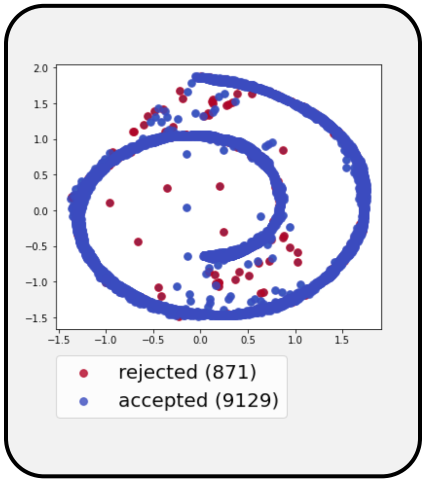
3.2. Post processing of GAN

■識別器による棄却サンプリング [Azadi+ (2018)]

$$D^* = \arg\max_D \left[\underbrace{\log \sigma(D(\mathbf{x}))}_{\text{本物を見分ける項}} + \underbrace{\log(1 - \sigma(D(G_\theta(\mathbf{z}))))}_{\text{偽物を見分ける項}} \right]$$

$$\Rightarrow e^{-D^*(\mathbf{x})} = \frac{p_\theta(\mathbf{x})}{p_{\mathcal{X}}(\mathbf{x})} \approx D_\varphi(\mathbf{x})$$:密度比を近似

$\Rightarrow$ 棄却サンプリングの近似が可能



手順

1. $M = 1/\min(e^{-D_\varphi(\mathbf{x})})$
2. $\mathbf{z} \sim p_{\mathcal{Z}}, \mathbf{y} = G_\theta(\mathbf{z})$
3. 確率 $1/(Me^{-D(\mathbf{y})})$ で $\mathbf{y}$ を採用

3.2. Post processing of GAN

■ 識別器による最適輸送 [AT (2019)]

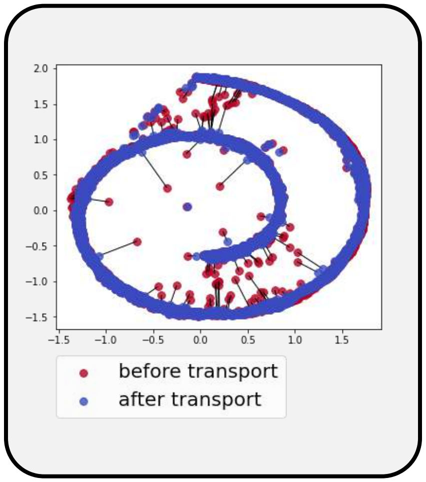
$$\max_{D} \left[\underbrace{\log \sigma(D(\mathbf{x}))}_{\text{本物を見分ける項}} + \underbrace{\log(1 - \sigma(D(G_\theta(\mathbf{z}))))}_{\text{偽物を見分ける項}} \right]$$

$$\leq \max_D \left[D(\mathbf{x}) - D(G_\theta(\mathbf{z})) \right] \approx D_W(p_{\mathcal{X}}, p_\theta)$$: 双対問題を近似

$\Rightarrow$ OTの近似が可能(→なぜ？)

手順:

1. $\mathbf{z} \sim p_{\mathcal{Z}}, \mathbf{y} = G_\theta(\mathbf{z})$
2. 以下繰り返す
3. $\mathbf{y} = \mathbf{y} - \epsilon \nabla_{\mathbf{y}}(\|\mathbf{y} - G_\theta(\mathbf{z})\| - D_\varphi(\mathbf{y}))$

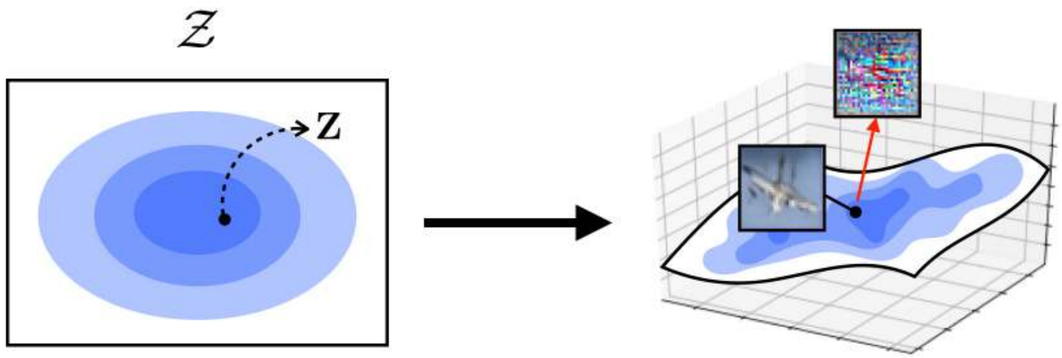


3.2. Post processing of GAN

■識別器による最適輸送 [AT (2019)]

画像空間で直接最適輸送をやろうとすると失敗する

推測:高次元＋多様体仮説のせい？



高次元だと外にはみ出やすい？

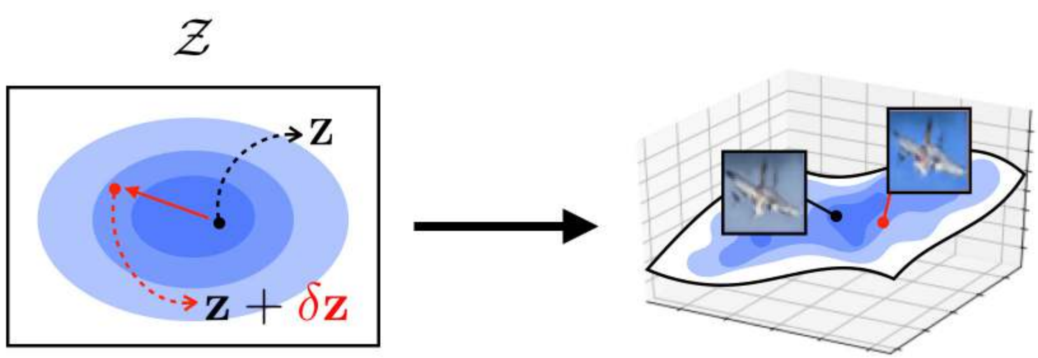
例：$\mathrm{dim}(\mathcal{X}) = 10, \mathrm{dim}(\mathcal{Z}) = 2$

$\Rightarrow$ 直行する次元=8

3.2. Post processing of GAN

■識別器による最適輸送 [AT (2019)]

潜在空間に"引き戻す"と良い



仮定:$G_\theta(\mathbf{z}_x) = \mathbf{x} \Rightarrow$ 潜在空間の $p_\mathcal{Z}$ についての最適輸送

$$\max_D \left[D(\mathbf{x}) - D(G_\theta(\mathbf{z})) \right] \approx \max_D \left[D(G_\theta(\mathbf{z}_x)) - D(G_\theta(\mathbf{z})) \right]$$

$D \circ G_\theta$ を $D_W(G_\theta^{-1} p_\mathcal{X}, p_\mathcal{Z})$ の双対問題の解だと考える

3.2. Post processing of GAN

■識別器による最適輸送 [AT (2019)]

↓元の生成画像 https://github.com/pfnet-research/sngan_projection

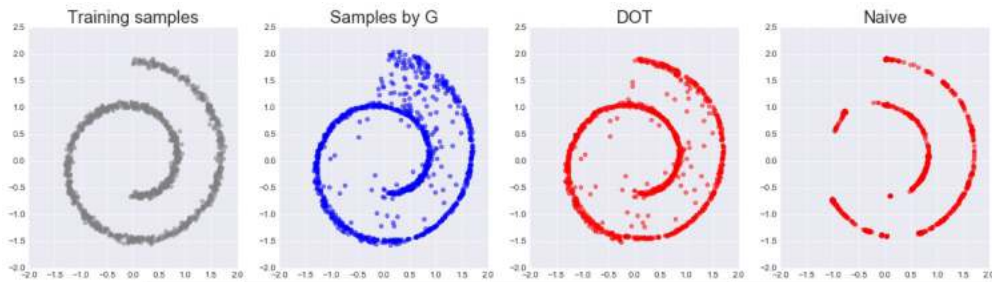
生成画像クォリティ値の改善(IS(大が良い)/FID(小が良い))

	Gのみ		改善後
CIFAR-10:	7.85/21.53	→	8.50/19.71
STL-10:	9.29/45.79	→	10.30/40.51
ImageNet:	36.40/43.34	→	37.61/42.35

3.2. Post processing of GAN

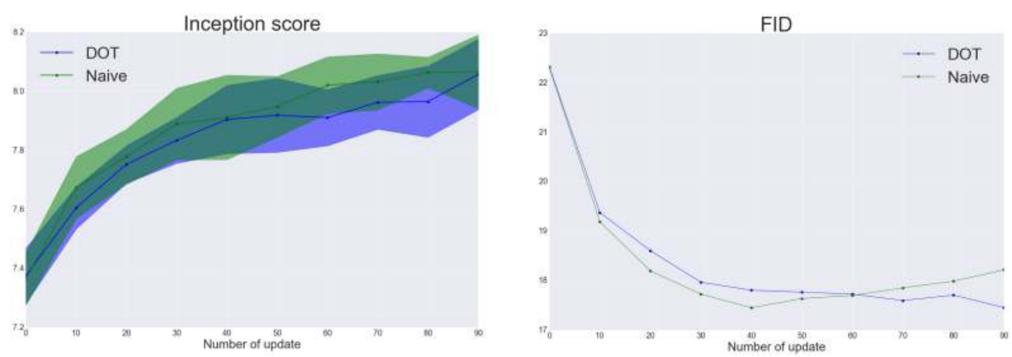
■識別器による最適輸送 [AT (2019)]

コメント1. 低次元では「素朴な改善(D$\uparrow$の改善)」より良い



EMD	0.021(05)	**0.020(06)**	0.160(22)

コメント2. 高次元(画像)では「素朴な改善」より少し良いくらい



3.3. Related works

- MHGAN [Turner+ (2018)]

棄却サンプリングではなくMCMCで効率を上げる。

- Energy-based改善 [Arbel+ (2020)] [Che+ (2020)]

訓練後D = ポテンシャル
潜在空間サンプリング=Langevin動力学で改善

チュートリアルやテキスト

- GAN: [Goodfellow (2016)]
- VAE: [Kingma&Welling (2019)]
- 最適輸送: [Peyré&Cuturi (2018)]

Summary

- やったこと
  - GAN+最適輸送理論 → 識別器による最適輸送を提案
  - 画像の場合 → 潜在空間の最適輸送と思うと◯
  - 全ての場合で改善がみられた
    - ただし、パラメータの調節は必須
    - 画像の場合は潜在空間に戻らないとだめ
    - 潜在空間でのOTは理論的に弱い(が、実験では成功する)
- 素朴な疑問(個人的にできたら面白いと思っていること)
  - 潜在空間でのOTの理論？
  - 画像生成ではなく、文章生成に応用？
    - "離散"最適輸送？
  - 潜在空間の確率 $p_{\mathcal{Z}}$ の役割は何か？

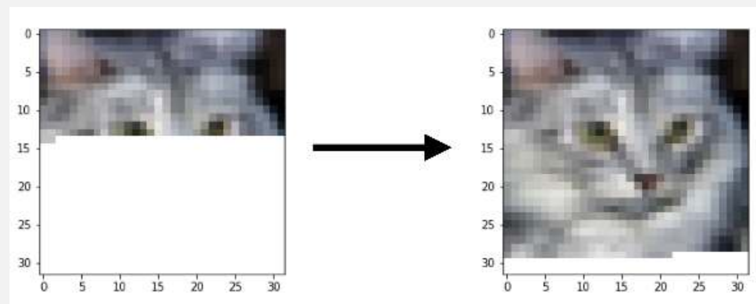
Appendix

他の深層生成モデル ↩

■ other models

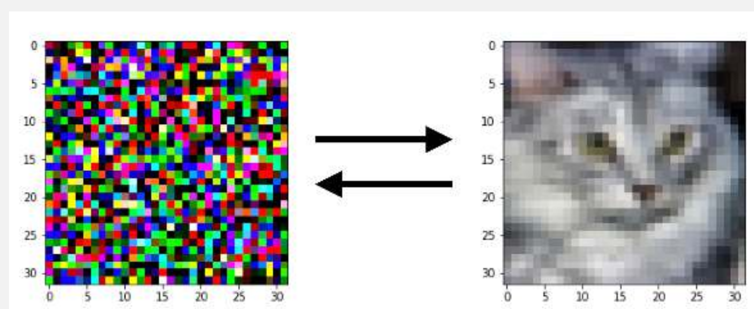
- 自己回帰モデル: ベクトル $\mathbf{x}$ の成分を順番に生成する

$$p_\theta(\mathbf{x}) = \prod_i p_\theta(x_i \mid x_1, \ldots, x_{i-1})$$



- Flow-basedモデル: 逆関数をもつf_θで単純な分布に変形

$$p_\theta(\mathbf{x}) = p_{\mathrm{simple}}(f_\theta(\mathbf{x}))J_\theta(\mathbf{x})$$



なぜ双対問題から最適輸送が導かれるか ↩

entropy制約バージョンの説明。 一般の場合の詳細は、Monge問題の解の存在仮定が必要。詳しくは論文 [AT (2019)] の付録

最適輸送 双対

$$\min_{\pi} \int \left(\|\mathbf{x} - \mathbf{y}\| + \frac{1}{\beta} \log \pi(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \right) \pi(\mathbf{x}, \mathbf{y}) d\mathbf{x} d\mathbf{y} \quad = \quad \max_{f,g} \left\{ \int f(\mathbf{x}) p(\mathbf{x}) d\mathbf{x} + \int g(\mathbf{y}) q(\mathbf{y}) d\mathbf{y} \right\}$$

以下が成り立つ
([Proposition 4.3. Peyré&Cuturi]や[拙書6.3.2節]参照)：

- $\pi^*(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \propto \exp\left[-\beta(\|\mathbf{x} - \mathbf{y}\| - f^*(\mathbf{x}) - g^*(\mathbf{y}))\right]$
- $\pi^*(\mathbf{x}|\mathbf{y}) \propto \exp\left[-\beta\underbrace{(\|\mathbf{x} - \mathbf{y}\| - f^*(\mathbf{x}))}_{\text{ここが最小の}\mathbf{x}\text{にピーク}} \right]$：最適輸送に対応