Transposed Convolution

조희철

January 24, 2021

0.1 Transposed Covolution의 이해

♠ Transposed Convolution 1: normal convolution

image의 행과 열 사이에 0으로된 행과 열을 삽입(dilation)하고, padding을 더해, intermediate image를 만든 후, 주어진 kernel의 **flip과 convolution 연산**하는 것으로 transposed convolution을 정의한다.

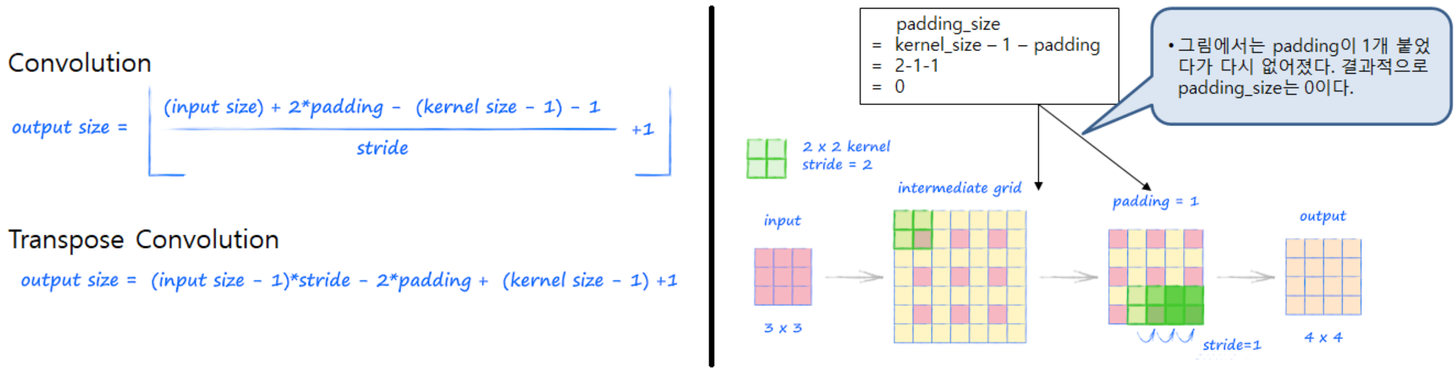


Figure 1: 1. transposed convolution은 입력 이미지를 dilation시키고, padding을 더해 큰 이미지(intermediate image)로 만든 후, convolution(pad=0, stride=1)을 적용한다.
2. image의 pixel 사이에 'stride-1' 만큼의 0을 삽입한 후, 'kernel-size - 1 - padding' 만큼의 padding를 붙히면, intermediate image가 만들어진다.
3. transpose covolution에서는 padding 크기가 커질수록 output의 크기는 작아진다. 반면, stride가 커지면 output의 크기도 커진다.
4. 'kernel-size - 1 - padding'가 0보다 작은 경우에도, output size가 양수이면 된다.
5. 이렇게 만들어진 intermediate image를 kernel의 flip과 convolution하면 transposed convolution이 된다.

♠ Transposed Convolution 2: kernel과의 행렬곱으로 정의

Transposed convolution이 왜 convolution 연산의 transpose인지 살펴보자. 우선, convolution연산을 행렬로 변환하는 2가지 방법이 있다.

- im2col: image data의 pixel을 중복하고, weight는 reshape만 한다. 이 방법은 메모리를 많이 사용하지만, 계산적인 측면에서 효율적이다.
- image flatten: $H \times W$ image는 reshape 하여 $1 \times (H \times W)$로 변환하고 weight는 $(H \times W) \times (OH \times OW)$로 변환한다. 변환된 2개의 행렬을 곱한 결과가 convolution 연산이 된다.

여기서는 image flatten 방식으로 convolution을 정의하고, 이로 부터 transposed convolution을 정의해 보자. 예를 들어서 살펴보자.

$$\text{image } X = \begin{pmatrix} x_{11} & x_{12} & x_{13} & x_{14} \\ x_{21} & x_{22} & x_{23} & x_{24} \\ x_{31} & x_{32} & x_{33} & x_{34} \\ x_{41} & x_{42} & x_{43} & x_{44} \end{pmatrix} \qquad \text{kernel } W = \begin{pmatrix} w_{11} & w_{12} \\ w_{21} & w_{22} \end{pmatrix}$$

image X를 flatten하여

$$X_f := \begin{pmatrix} x_{11} & x_{12} & x_{13} & x_{14} & x_{21} & x_{22} & x_{23} & x_{24} & x_{31} & x_{32} & x_{33} & x_{34} & x_{41} & x_{42} & x_{43} & x_{44} \end{pmatrix},$$

W를 재배치하여 W_r(아래 첨자 r을 붙혔다)을 그림(2)와 같이 정의하자.

X_f, W_r을 이렇게 정의하고 (행렬)곱을 한 후, reshape하면 convolution 연산 결과가 된다. 즉,

$$\text{Conv}(X, W) := X_f W_r \longrightarrow \text{reshape } (OH \times OW) = (3 \times 3)$$

$$
W_r = \begin{bmatrix}
w_{11} & 0 & 0 & O & O & O & O & O & O \\
w_{12} & w_{11} & 0 & O & O & O & O & O & O \\
0 & w_{12} & w_{11} & O & O & O & O & O & O \\
0 & 0 & w_{12} & O & O & O & O & O & O \\
w_{21} & 0 & 0 & w_{11} & 0 & 0 & O & O & O \\
w_{22} & w_{21} & 0 & w_{12} & w_{11} & 0 & O & O & O \\
0 & w_{22} & w_{21} & 0 & w_{12} & w_{11} & O & O & O \\
0 & 0 & w_{22} & 0 & 0 & w_{12} & O & O & O \\
O & O & O & w_{21} & 0 & 0 & w_{11} & 0 & 0 \\
O & O & O & w_{22} & w_{21} & 0 & w_{12} & w_{11} & 0 \\
O & O & O & 0 & w_{22} & w_{21} & 0 & w_{12} & w_{11} \\
O & O & O & 0 & 0 & w_{22} & 0 & 0 & w_{12} \\
O & O & O & O & O & O & w_{21} & 0 & 0 \\
O & O & O & O & O & O & w_{22} & w_{21} & 0 \\
O & O & O & O & O & O & 0 & w_{22} & w_{21} \\
O & O & O & O & O & O & 0 & 0 & w_{22}
\end{bmatrix}
$$

Figure 2: convolution kernel reshape. $\big((H \times W) \times (OH \times OW)\big) = (16 \times 9)$

이제, 그림 (1) 에서와 다른 방식의 transposed convolution을 정의해 보자. $(OH \times OW) = (3 \times 3)$ 크기의 임의의 image Y 와 kernel W 가 주어져 있을 때,

$$\text{TransposedConv}(Y, W) := Y_f \, W_r^T$$

를 Y, W 의 transposed convolution으로 정의하자. 이렇게 transposed convolution을 정의하면, 그림 (1) 에서의 정의와 동일한 결과가 된다. 그 이유를 알아보자. 먼저 그림 (3) 에서 W_r^T 를 관측해 보자. 이 행렬은 어떤 2×2 행렬의 (그림 (2) 에서 정의한) 재배치 행렬 $(\blacksquare_r)$ 의 일부이다. 정답은 바로 $W = \begin{pmatrix} w_{11} & w_{12} \\ w_{21} & w_{22} \end{pmatrix}$ 의 flip 행렬이다.

$$\text{flip}(W) := \begin{pmatrix} w_{22} & w_{21} \\ w_{12} & w_{11} \end{pmatrix}$$

$$
W_r^T = \begin{bmatrix}
w_{11} & w_{12} & 0 & 0 & w_{21} & w_{22} & 0 & 0 & O & O & O & O & O & O & O & O \\
0 & w_{11} & w_{12} & 0 & 0 & w_{21} & w_{22} & 0 & O & O & O & O & O & O & O & O \\
0 & 0 & w_{11} & w_{12} & 0 & 0 & w_{21} & w_{22} & O & O & O & O & O & O & O & O \\
O & O & O & O & w_{11} & w_{12} & 0 & 0 & w_{21} & w_{22} & 0 & 0 & O & O & O & O \\
O & O & O & O & 0 & w_{11} & w_{12} & 0 & 0 & w_{21} & w_{22} & 0 & O & O & O & O \\
O & O & O & O & 0 & 0 & w_{11} & w_{12} & 0 & 0 & w_{21} & w_{22} & O & O & O & O \\
O & O & O & O & O & O & O & O & w_{11} & w_{12} & 0 & 0 & w_{21} & w_{22} & 0 & 0 \\
O & O & O & O & O & O & O & O & 0 & w_{11} & w_{12} & 0 & 0 & w_{21} & w_{22} & 0 \\
O & O & O & O & O & O & O & O & 0 & 0 & w_{11} & w_{12} & 0 & 0 & w_{21} & w_{22}
\end{bmatrix}
$$

Figure 3: W_r 을 transpose한 matrix

좀 더 살펴보기 위해, W_r 의 transpose matrix W_r^T 를 변형한 $\overline{W_r^T}$ 를 그림 (4) 과 같이 정의하자.
그림 (4) 에서 정의한 $\overline{W_r^T}$ 는 flip(W) 의 재배치 (그림 (2) 에서 정의) 행렬 flip$(W)_r$ 과 일치함을 알 수 있다. 즉,

$$\text{flip}(W)_r = \overline{W_r^T}$$

이제 정리를 해보자.

- transposed convolution을 $W_r^T(9 \times 16)$ 를 이용해서 정의했고, 이 W_r^T 를 확장하여 25×16 크기의 행렬 $\overline{W_r^T}$ 를 만들었다. $\overline{W_r^T}$ 를 만들면서 추가된 부분이 계산에 영향을 미치지 않고, 이미지 Y_f 와 행렬곱이 될 수 있도록 해야한다. 그래서 Y_f 에 padding을 붙혀 $\overline{Y_f}$ 를 만든다.

$$
\overline{W_r^T} = \left[\begin{array}{cccc|cccc|cccc|cccc}
w_{22} & 0 & 0 & 0 & & & & & & & & & & & & \\
w_{21} & w_{22} & 0 & 0 & & & & & & & & & & & & \\
0 & w_{21} & w_{22} & 0 & & & & & & & & & & & & \\
0 & 0 & w_{21} & w_{22} & & & & & & & & & & & & \\
0 & 0 & 0 & w_{21} & & & & & & & & & & & & \\
\hline
w_{12} & 0 & 0 & 0 & w_{22} & 0 & 0 & 0 & & & & & & & & \\
w_{11} & w_{12} & 0 & 0 & w_{21} & w_{22} & 0 & 0 & & & & & & & & \\
0 & w_{11} & w_{12} & 0 & 0 & w_{21} & w_{22} & 0 & & & & & & & & \\
0 & 0 & w_{11} & w_{12} & 0 & 0 & w_{21} & w_{22} & & & & & & & & \\
0 & 0 & 0 & w_{11} & 0 & 0 & 0 & w_{21} & & & & & & & & \\
\hline
& & & & w_{12} & 0 & 0 & 0 & w_{22} & 0 & 0 & 0 & & & & \\
& & & & w_{11} & w_{12} & 0 & 0 & w_{21} & w_{22} & 0 & 0 & & & & \\
& & & & 0 & w_{11} & w_{12} & 0 & 0 & w_{21} & w_{22} & 0 & & & & \\
& & & & 0 & 0 & w_{11} & w_{12} & 0 & 0 & w_{21} & w_{22} & & & & \\
& & & & 0 & 0 & 0 & w_{11} & 0 & 0 & 0 & w_{21} & & & & \\
\hline
& & & & & & & & w_{12} & 0 & 0 & 0 & w_{22} & 0 & 0 & 0 \\
& & & & & & & & w_{11} & w_{12} & 0 & 0 & w_{21} & w_{22} & 0 & 0 \\
& & & & & & & & 0 & w_{11} & w_{12} & 0 & 0 & w_{21} & w_{22} & 0 \\
& & & & & & & & 0 & 0 & w_{11} & w_{12} & 0 & 0 & w_{21} & w_{22} \\
& & & & & & & & 0 & 0 & 0 & w_{11} & 0 & 0 & 0 & w_{21} \\
\hline
& & & & & & & & & & & & w_{12} & 0 & 0 & 0 \\
& & & & & & & & & & & & w_{11} & w_{12} & 0 & 0 \\
& & & & & & & & & & & & 0 & w_{11} & w_{12} & 0 \\
& & & & & & & & & & & & 0 & 0 & w_{11} & w_{12} \\
& & & & & & & & & & & & 0 & 0 & 0 & w_{11}
\end{array}\right]
$$

Figure 4: W_r^T 를 변형한 행렬. 이 $\overline{W_r^T}$ 행렬을 관찰해 보면, $\text{flip}(W)_r$ 임을 알 수 있다.

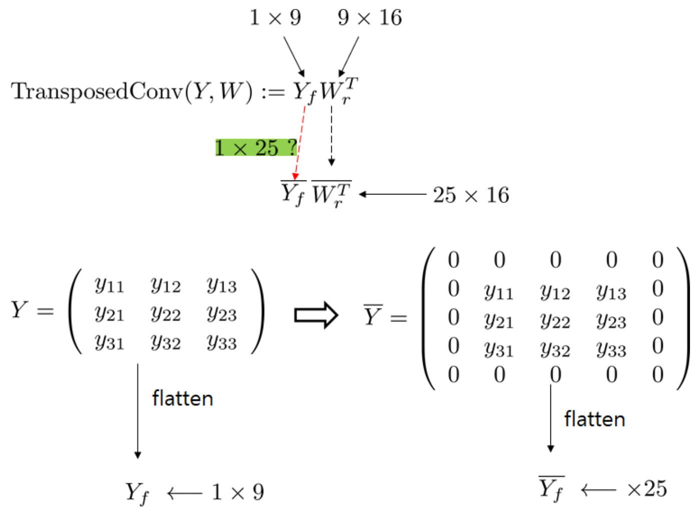


Figure 5: transposed convolution 전개 과정에서 행렬 크기의 변화.

$$
\begin{aligned}
\text{TransposedConv}(Y, W) &= Y_f\, W_r^T \longleftarrow (1\times 9)\ (9 \times 13) \\
&= \overline{Y_f}\, \overline{W_r^T} \longleftarrow (1\times 25)\ (25 \times 13) \\
&= \overline{Y_f}\ \text{flip}(W)_r \\
&= \text{Conv}(\overline{Y}, \text{flip}(W))
\end{aligned}
$$

♠ Transposed Convolution 3: kernel 전개

cs231n 강의[1]에서 transposed convolution을 kernel들에 대한 weighted sum으로 설명하고 있다. 이 때, weight는 각 pixel 값들이 된다.

이렇게 transposed covolution을 계산하면, 앞에서 정의한 결과와 동일하게 되는데, 그 이유는 그림(4)를 관측해 보면, 알 수 있다. $\overline{W_r^T}$ 의 모든 행은 $(w_{11}, w_{12}, 0, 0, w_{21}, w_{22})$ 를 포함하고 있다. $\overline{Y_f}$ 와 곱해는 과정에서 각각의 행은 Y 의 y_{ij} 와 순차적으로 곱해진다.

행렬곱으로 해석하면, 행벡터 $\overline{Y_f}$ 과 $\overline{W_r^T}$ 가 곱해지면, $\overline{W_r^T}$ 의 행들의 weighted sum으로 이해할 수 있다.

[1] http://cs231n.stanford.edu/slides/2019/cs231n_2019_lecture12.pdf

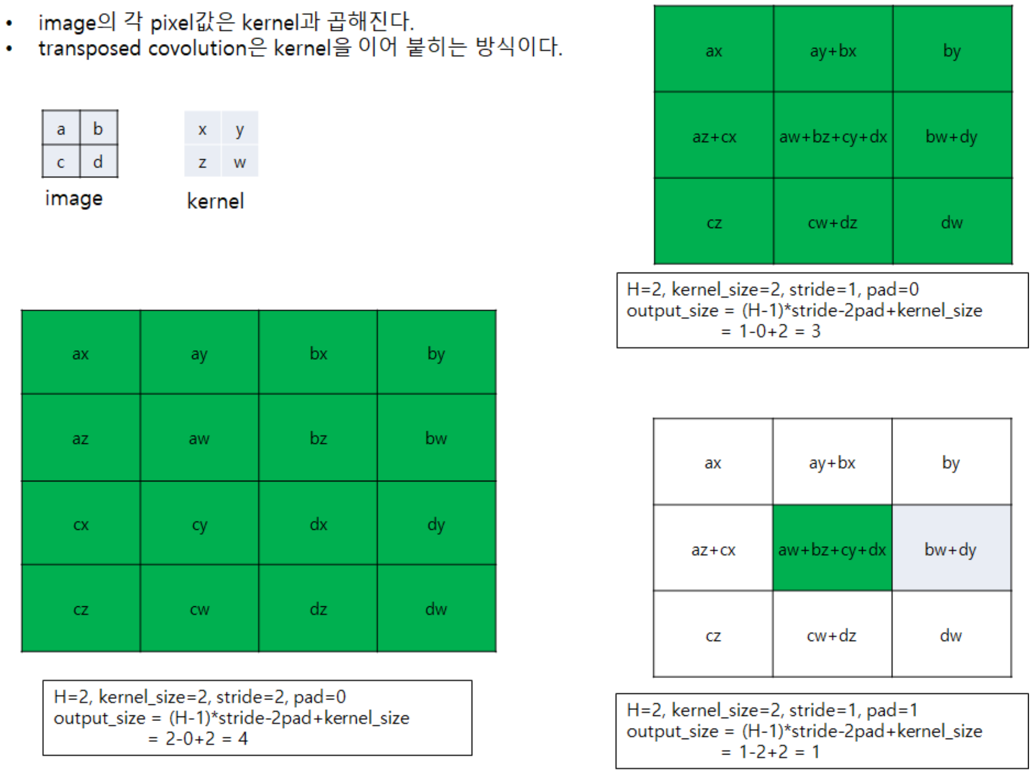
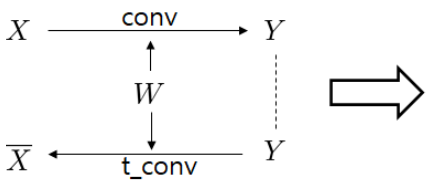


Figure 6: kernel 전개: ouptput 이미지의 크기를 (stride, padding을 고려하여) 미리 계산해 놓고, 각 cell의 값을 kernel과 하나의 pixel곱으로 더해나가는 방식. 모든 pixel에 대하여 반복적으로 수행하면 된다.

♠ Transposed Convolution 4: backward pass

Transposed Convolution을 **Convolution의 입력 이미지에 대한 미분**으로 보는 관점. 이런 관점은 Transposed Convolution의 정의가 아니라, 성질이라고 봐야한다.



$$\begin{cases} \dfrac{\partial Y}{\partial X} \cdot Y = \overline{X} & (1) \\[2ex] \dfrac{\partial \overline{X}}{\partial Y} \cdot \overline{X} = Y & (2) \end{cases}$$

Figure 7: 1. transposed convolution을 convolution의 backward로 이해할 수도 있다. 그림의 식(1)에서 Y, 식(2)에서 $\overline{X}$는 넘어온 gradient로 이해하면 된다.
2. 임의의 Y, W가 주어져 있을 때, transposed convolution $\overline{X}$를 식(1)로 구할 수는 없다. X를 알 수 없기 때문이다.
3. 식(1)은 행렬곱의 backpropagation을 생각해 보면 알 수 있다.
4. 식(1),(2)는 X, W를 2×2 행렬에 대해서 계산해 보면, 이해하는데 도움이 된다.

$$X = \begin{pmatrix} x_1 & x_2 \\ x_3 & x_4 \end{pmatrix} \qquad W = \begin{pmatrix} w_1 & w_2 \\ w_3 & w_4 \end{pmatrix}$$

$$\mathrm{Conv}(X, W) = x_1 w_1 + x_2 w_2 + x_3 w_3 + x_4 w_4 =: Y$$

$$\begin{aligned} \mathrm{TransposedConv}(Y, W) &= Y \begin{pmatrix} w_1 & w_2 \\ w_3 & w_4 \end{pmatrix} \\ &= Y \frac{\partial Y}{\partial X} \end{aligned}$$

$$\boxed{\mathrm{flip}(W) = \begin{pmatrix} w_4 & w_3 \\ w_2 & w_1 \end{pmatrix} \circledast \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & y & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}}$$

Figure 8: 2×2 행렬에서 convolution의 backward가 transposed convolution임을 확인할 수 있다.