KUBIG 24-WINTER

COMPUTER VISION STUDY

Generative Models

분반장: 17기 문성빈 임청수

Contents

- 1. Generative Models
- 2. PixelRNN and PixelCNN
- 3. Variational Autoencoders (VAE)
- 4. Generative Adversarial Networks (GAN)
- 5. Diffusion

■ Generative AI의 시대

- 생성 인공지능(Generative AI)의 발전은 매우 빠르게 진행 중
- 이미지, 영상 데이터 뿐만 아니라 텍스트나 오디오 등 다양한 형태의 데이터를 고품질로 생성하는데 활용되고 있음
- ex) 텍스트를 입력하여 원하는 영상이나 오디오 출력, 로봇 및 게임 캐릭터 모션 생성, 텍스트 기반 데이터 편집 등





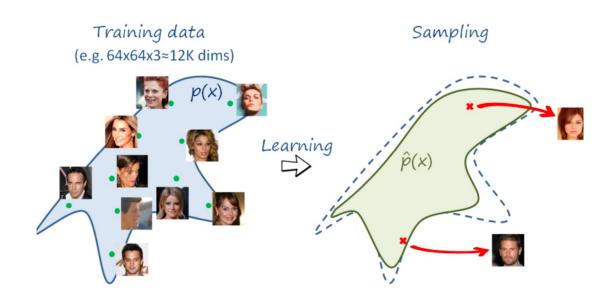




Generative Modeling

생성 : 통계학, 머신러닝 분야에서 생성은 학습과정에서 사용되지 않은 데이터를 데이터 공간 상의 확률분포 p_data에서 샘플링하는 것 생성모델의 목적 : 주어진 학습 데이터와 동일한 분포를 학습한 후 새로운 샘플을 생성하는 것

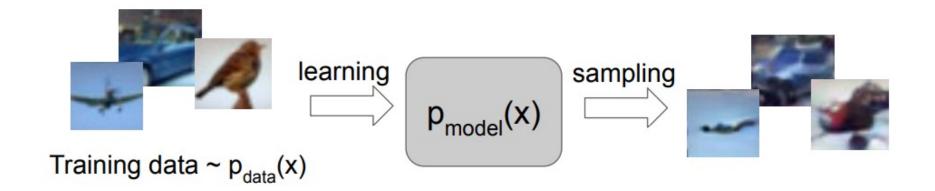
- 생성 모델이 출력한 값들의 분포와 실제 데이터가 인코딩된 분포가 매우 유사하여 통계적으로 구분하기 힘든 상태가 되도록 학습



Generative Modeling

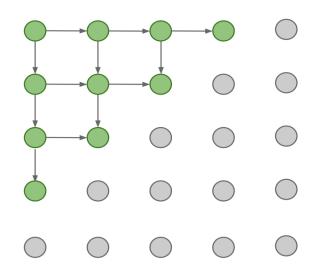
Explicit density estimation: P_model(x)을 명시적으로 정의함(PixelCNN, VAE 등)

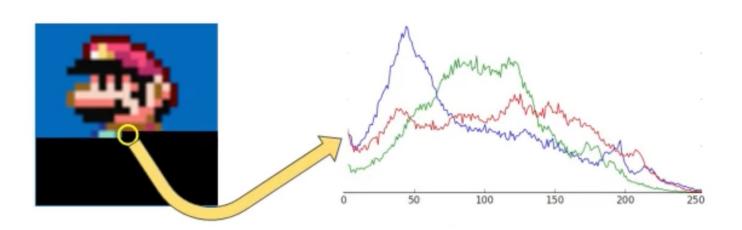
Implicit density estimation : P_model(x) 을 명시적으로 정의하지 않고, sampling만 가능한 모델 학습(GAN 등)



■ Fully Visible Belief Network

- 이미지가 주어졌을 때 이미지를 포함하는 확률분포 p(x)을 직접 구하는 방법
- 전체 이미지에 대한 확률분포는 매우 복잡하기 때문에 픽셀 단위로 확률분포를 계산하여 이미지 생성
- 1. 이미지 내의 픽셀들의 순서를 결정
- 2. 앞에서 생성한 픽셀을 조건부로 하여 다음 픽셀이 무슨 색인지 확률분포를 모델링함(분포 예측)
- 3. 분포에서 샘플링해서 다음 순서의 픽셀 값 생성





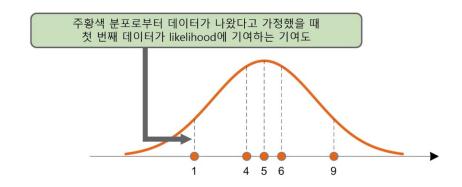
Explicit density estimation

Likelihood : 입력 데이터가 이 확률분포에서 나왔을 가능도.(=y값)

Chain rule: joint distribution을 product rule로 표현

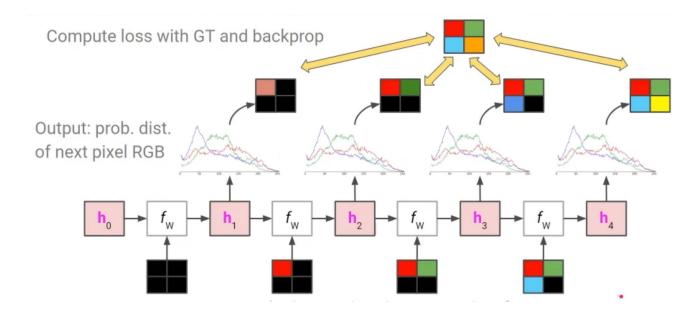
Product rule (chain rule)

$$P(X_1, ..., X_n) = P(X_1)P(X_2 \mid X_1)...P(X_n \mid X_1, ..., X_{n-1})$$



PixelRNN

- 1. hidden_0 랜덤 초기화
- 2. 학습 데이터와 hidden_0로 hidden_1 추출
- 3. Hidden_1에서 다음 픽셀에 대한 확률분포 모델링 후 샘플 추출
- 4. 생성한 픽셀 값과 실제 데이터와의 Loss 계산
- 5. 실제 값을 입력하고 다음 hidden_state 계산



Row LSTM vs Diagonal BiLSTM

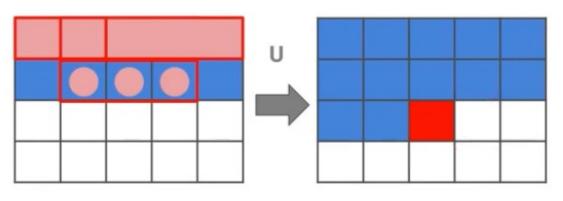
: 생성 순서에 따른 모델 구분

Row LSTM: 좌에서 우 방향으로 픽셀 생성.

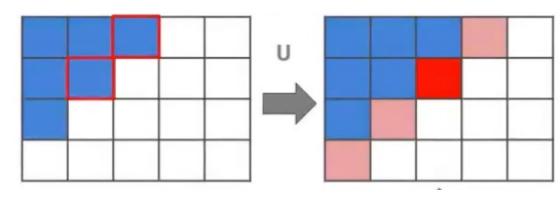
- 수용영역(Receptive field)이 삼각형 모양이 되므로 전에 생성된 픽셀들을 모두 반영하기 어려움

Diagonal BiLSTM: 좌상단에서 대각선 방향으로 픽셀 생성. 완료되면 우상단에서 동일하게 대각선 방향으로 픽셀 생성.

- 대각선은 직전 대각선 정보를 모두 포함하고 있음.



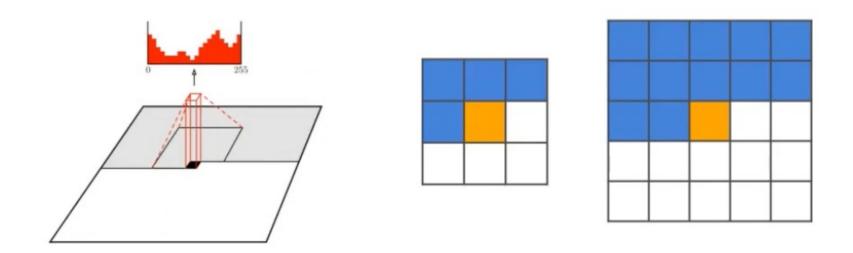




Diagonal BiLSTM

PixelCNN

- PixelRNN 모델은 sequential하게 학습되기 때문에 시간이 많이 소요됨
- PixelCNN은 근처에 픽셀만 고려하여 새로운 픽셀을 생성하는 모델
- 학습 시 모든 데이터 값을 알고 있기 때문에 병렬적으로 학습가능하다는 장점이 있음
- Mask를 통해 아직 생성되지 않은 픽셀을 못보도록 가리고 학습 진행



PixelCNN



32x32 CIFAR-10



32x32 ImageNet

■ PixelRNN and PixelCNN 정리

요약 : 픽셀 단위로 확률분포를 계산하여 chain rule을 통해 전체 확률분포를 명시적으로 구하는 모델

RowLSTM: 수직 순서로 픽셀을 생성하고 생성 시 수용영역이 삼각형으로 제한됨

Diagonal BiLSTM: 대각선 순서로 픽셀을 생성하고 직전에 생성한 모든 픽셀을 수용할 수 있음

PixelCNN: sequential하게 생성하지 않고 주변 픽셀로만 생성하면서 병렬적 학습이 가능하여 속도가 빨라지고 성능도 개선됨

- 장점

- 1. 명시적인 이미지의 확률분포인 p(x) 계산가능
- 2. 상대적으로 최적화하기 쉬움
- 단점
- 1. Inference 단계에서 이미지 생성 시 픽셀들을 순차적으로 생성해야 해서 매우 느림
- 2. 초기 픽셀이 이후 생성되는 모든 픽셀에 영향을 주기 때문에 초기 픽셀 값 선정에 매우 민감해짐
- 3. 생성된 이미지가 의미론적 관점에서 정보를 반영하지 못함(vs VAE, GAN)

What is VAE?

PixelCNN의 p(x)는 n개의 계산 가능한 픽셀 확률분포에 대하여 다음과 같이 정의된다.

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

Variational Autoencoders (VAEs)는 latent variable z에 대하여 다음과 같이 정의된다.

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

위 식은 모든 z에 대해 적분할 수 없기 때문에 계산이 불가능하다.

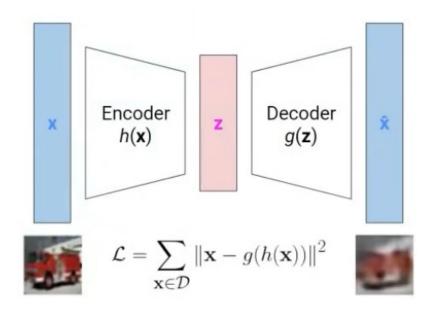
따라서 p(x)를 직접 최적화할 수 없으며 그 대신 p(x)의 lower bound를 구해서 최적화해야 한다.

1) z가 무엇인지 2) lower bound 최적화는 어떻게 진행하는지 알아보자

Background : Autoencoders

AE: 비지도학습으로 feature representation을 학습할 수 있는 모델이며 생성모델은 아님 AE는 z를 잘 추출하는 인코더를 학습하기 위해 디코더를 사용하므로 학습이 끝나면 디코더는 사용하지 않음 Loss는 입력 데이터와 출력 데이터를 비교하여 계산

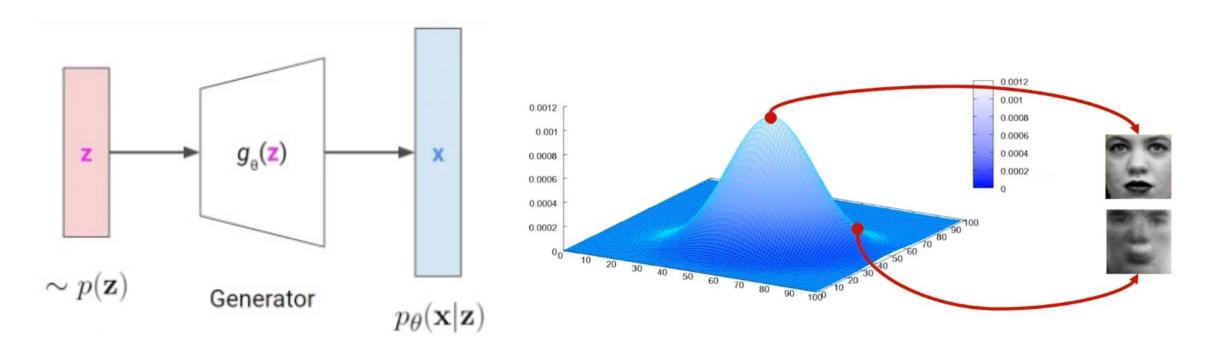
- 1) 입력 데이터 x를 인코더에 통과시켜 차원이 축소된 잠재 벡터인 z 출력
- 2) z를 다시 원래 데이터 x로 복원시키는 디코더에 통과시켜 x_hat 출력



VAEs

AE에서 디코더만 사용하여 random z값을 입력하면 생성이 잘 되지 않음

→ 생성이 잘 되기 위해서는 z가 원본 이미지를 잘 설명할 수 있는 확률분포로 가정해야 한다. 따라서 VAE는 z가 학습 이미지를 샘플링할 수 있는 확률분포를 모사하도록 하는 것이 목표

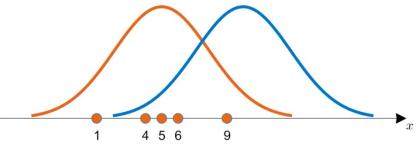


VAE : Intractability

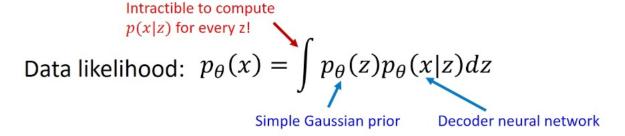
학습 데이터의 likelihood를 maximize하는 확률분포를 찾자 즉, 학습 데이터 x가 나올 확률이 가장 커지는 확률분포를 찾고 싶다

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

Joint probability : p(x,z) = p(x|z) * p(z)

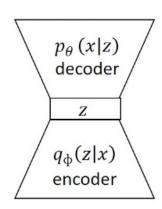


maximize likelihood estimation



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

p(z|x)를 q(z|x)의 네트워크로 근사하여 계산하는 것으로 가정 P(x)는 계산 불가능하므로 lower bound를 통해 maximize 할 수 있는지 확인



VAE loss function

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

$$= \mathbf{E}_{z} \left[\log \frac{p_{\theta}(x^{(i)}|z)p_{\theta}(z)}{p_{\theta}(z|x^{(i)})}\right] \qquad \text{Taking expectation wrt. } z \text{ (using encoder network) will come in handy later}$$

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

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

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

참고:
$$E_{z \sim q_{\phi}(z|x^{(i)})} \left[log \frac{q_{\phi}(z|x^{(i)})}{p_{\theta}(z)} \right] = \int_{z} \left[log \frac{q_{\phi}(z|x^{(i)})}{p_{\theta}(z)} q_{\phi}(z|x^{(i)}) dz \right]$$

$$KL(P||Q) = \sum_{x} P(x) log \frac{P(x)}{Q(x)}$$

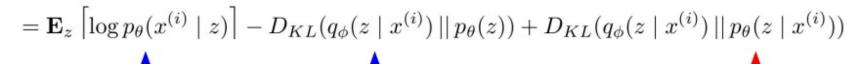
VAE loss function

첫번째 항: 모든 학습 데이터에서 출력된 z에 대하여 디코더의 likelihood를 최대화

두번째 항: 실제 z의 분포와 인코더 q가 예측한 분포가 유사하도록 KL Divergence를 최소화

실제 z의 분포는 가우시안 분포로 가정

세번째 항: 인코더를 근사한 q와 true distribution인 p의 분포를 비교하는데 p는 계산 불가



Decoder network gives $p_{\theta}(x|z)$, can compute estimate of this term through sampling.

This KL term (between Gaussians for encoder and z prior) has nice closed-form solution!

 $p_{\theta}(z|x)$ intractable (saw earlier), can't compute this KL term :(But we know KL divergence always >= 0.

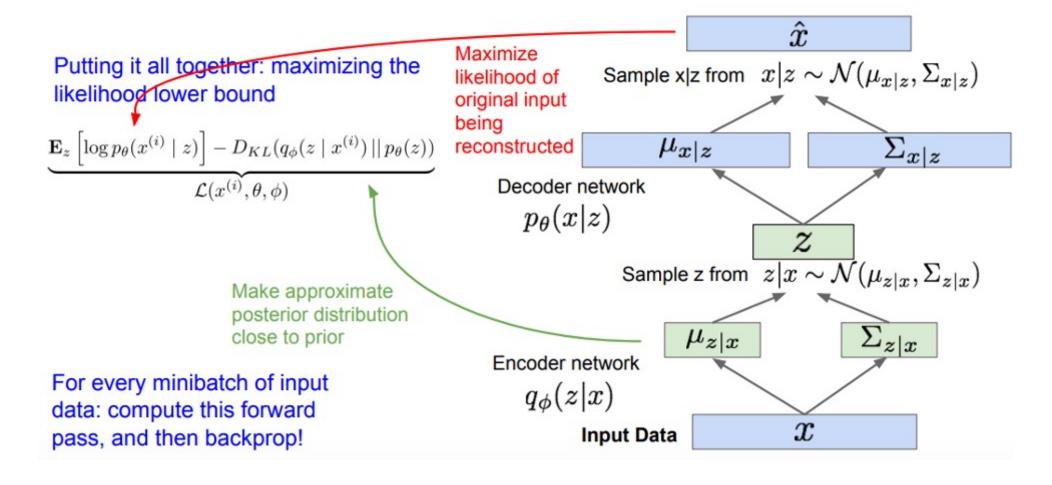
VAE loss function

$$= \int q_{\phi}(\mathbf{z}|\mathbf{x}) \log p_{\theta}(\mathbf{x}|\mathbf{z}) d\mathbf{z} - KL(q_{\phi}(\mathbf{z}|\mathbf{x})||p(\mathbf{z})) + KL(q_{\phi}(\mathbf{z}|\mathbf{x})||p_{\theta}(\mathbf{z}|\mathbf{x}))$$

$$\geq \int q_{\phi}(\mathbf{z}|\mathbf{x}) \log p_{\theta}(\mathbf{x}|\mathbf{z}) d\mathbf{z} - KL(q_{\phi}(\mathbf{z}|\mathbf{x})||p(\mathbf{z})) \longleftarrow \text{Evidence lower bound (ELBO)}$$
Reconstruction error Regularization error

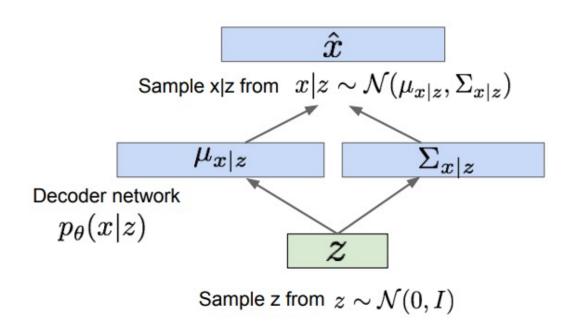
$$\arg\min_{\theta,\phi} \sum_{i} -\mathbb{E}_{q_{\phi}(z|x_{i})} \big[log\big(p(x_{i}|g_{\theta}(z))\big)\big] + \mathit{KL}(q_{\phi}(z|x_{i})||p(z))$$
 Reconstruction Error Regularization

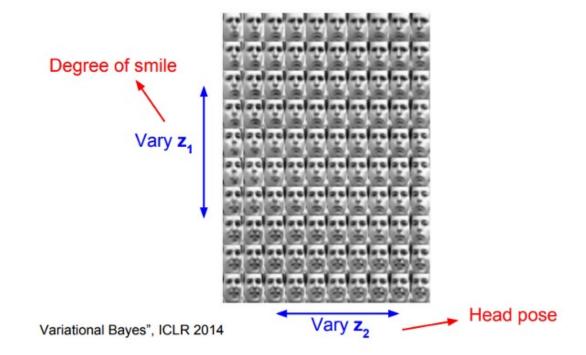
VAE loss function



Generating data

학습 단계에서는 z를 p(z|x) 분포에서 샘플링했는데 생성 단계에서는 z를 가우시안 분포에서 샘플링 진행





■ VAE 요약

데이터를 생성하기 위하여 AE에 분포와 샘플링 개념을 추가하고 확률분포의 근사적 최적화 진행

장점

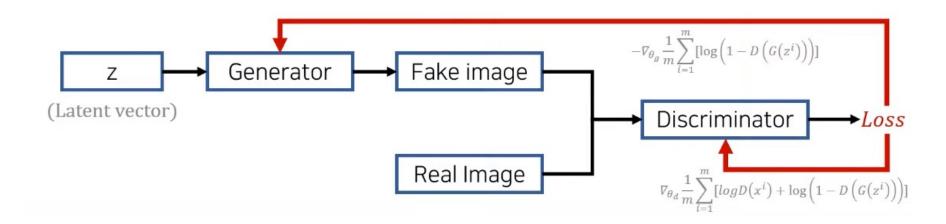
- 1. 수학적으로 잘 설명 가능한 모델
- 2. 의미론적 해석 가능

단점

- 1. GAN에 비해 블러가 많고 퀄리티가 떨어짐(가우시안 분포가 아닐 수도 있음)
- 2. PixelRNN/CNN 같이 직접적으로 density를 구한 모델보다는 성능이 떨어짐

GAN

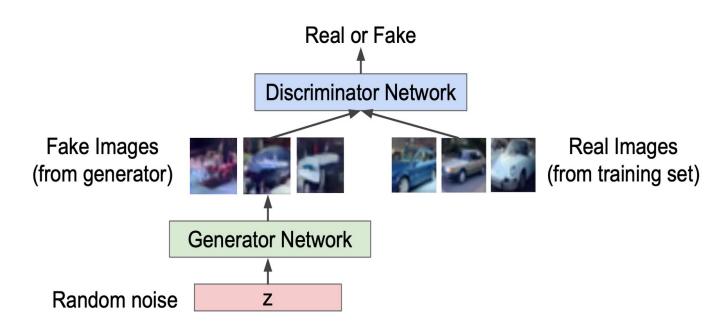
: 생성자(Generator)와 판별자(Discriminator) 두 개의 네트워크를 활용한 생성모델 PixelCNN과 VAE는 확률분포를 직접 모델링하지만 GAN은 직접 모델링하지 않음 두 네트워크의 게임이론을 통해 복잡한 확률분포를 학습한 후 샘플링을 잘하고자 함



Training GAN: Two-player game

Generator Network : real-looking images를 생성하여 discriminator 속이기

Discriminator Network : real images와 fake images 구분



Fake and real images copyright Emily Denton et al. 2015. Reproduced with permission.

■ Training GAN: Two-player game

- minimax objective function 정의

Theta_g는 목적함수를 최소화하는 것이 목표이고 theta_d는 목적함수를 최대화하는 것이 목표

Discriminator output : input data(fake or real)가 real image distribution P_data 에 속할 likelihood (0~1)

Generator output: new data instance

Goal of Discriminator : Maximize objective = D(x) is close to 1 (real) + D(G(z)) is close to 0 (fake)

Goal of Generator : Minimize objective = D(G(z)) is close to 1 (real) <- fooling discriminator

Minimax objective function:

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

Training GAN: Two-player game

GAN은 Generator와 Discriminator를 번갈아가면서 학습

D는 maximize를 위하여 gradient ascent를 이용

G는 minimize를 위하여 gradient descent를 이용

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

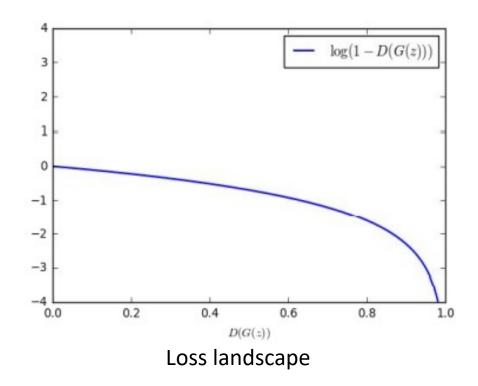
$$\max_{\theta_d} \left[\mathbb{E}_{x \sim p_{data}} \log D_{\theta_d}(x) + \mathbb{E}_{z \sim p(z)} \log (1 - D_{\theta_d}(G_{\theta_g}(z))) \right]$$

2. Gradient descent on generator

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

Training GAN: Problem – optimizing G does not work well

Log (1-x) 그래프 특성상, x가 1에 가까울수록 기울기 급격히 증가, 반면 0에서는 flat에 가까움 Generated sample이 이미 좋은 상태일때 학습이 많이 이루어지고, 초기에는 학습이 잘 되지 않음

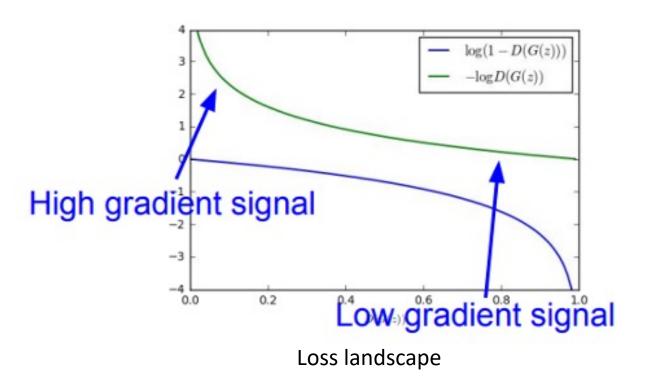


Gradient descent on generator

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

Training GAN: Problem – optimizing G does not work well

Log graph를 뒤집는 trick 사용 초기 bad sample에서 higher gradient 얻을 수 있음!



2. Gradient descent on generator

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



2. Instead: Gradient ascent on generator, different objective

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

Training GAN : Algorithm

for number of training iterations do

for k steps do

- Sample minibatch of m noise samples $\{z^{(1)}, \ldots, z^{(m)}\}$ from noise prior $p_g(z)$.
- Sample minibatch of m examples $\{x^{(1)}, \ldots, x^{(m)}\}$ from data generating distribution $p_{\text{data}}(x)$.
- Update the discriminator by ascending its stochastic gradient:

$$\nabla_{\theta_d} \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m \left[\log D_{\theta_d}(x^{(i)}) + \log(1 - D_{\theta_d}(G_{\theta_g}(z^{(i)}))) \right]$$

end for

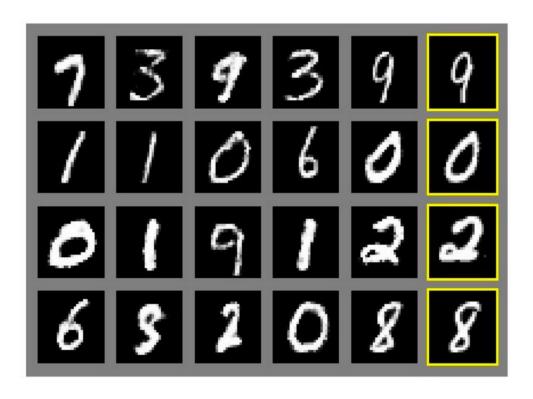
- Sample minibatch of m noise samples $\{z^{(1)}, \ldots, z^{(m)}\}$ from noise prior $p_g(z)$.
- Update the generator by ascending its stochastic gradient (improved objective):

$$\nabla_{\theta_g} \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m \log(D_{\theta_d}(G_{\theta_g}(z^{(i)})))$$

end for

Generated Samples

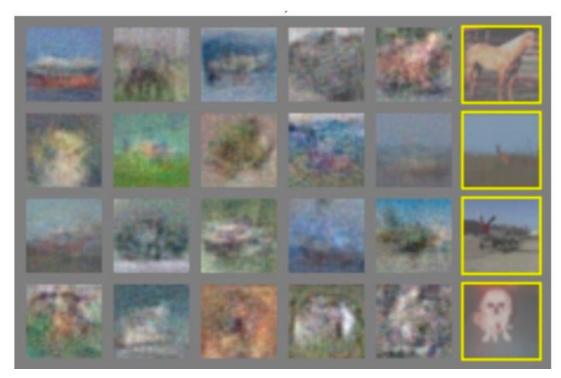
Generated samples

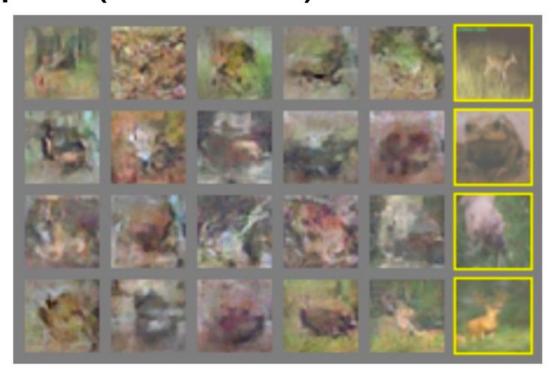




Generated Samples

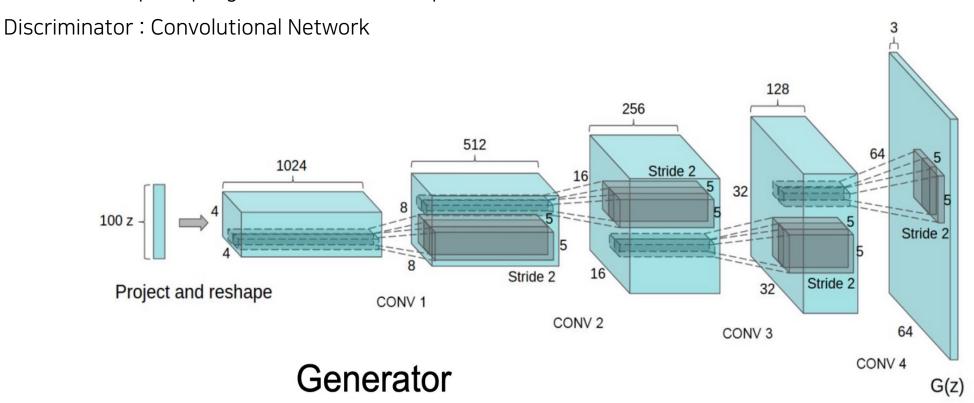
Generated samples (CIFAR-10)





Convolutional Architectures

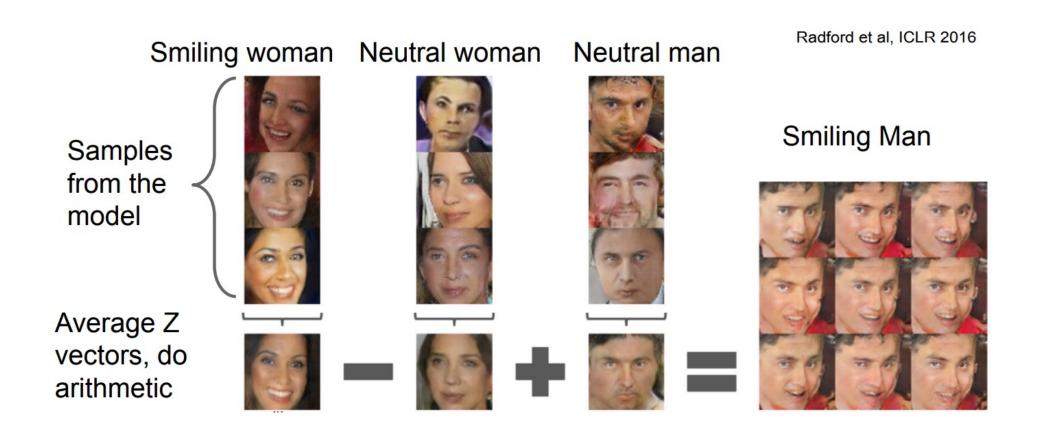
Generator: Upsampling Network with Transposed convolutions



Radford et al, "Unsupervised Representation Learning with Deep Convolutional Generative Adversarial Networks", ICLR 2016

04. Generative Adversarial Network

■ Generative Adversarial Networks: Interpretable Vector Math



04. Generative Adversarial Network

■ GAN 요약

학습 데이터에 대한 특정 확률 분포를 정의하지 않고 샘플링을 통해 간접적으로 생성 Two player game이론을 통해 학습 데이터의 분포로부터 생성 모델을 학습

장점

- 1. 앞선 PixelCNN, VAE보다 좋은 성능
- 2. 정확한 density function을 몰라도 이미지 생성 가능

단점

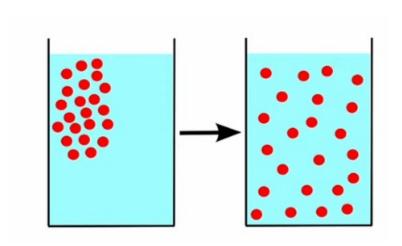
- 1. 학습이 까다롭고 불안정
- 2. Likelihood에 대한 Objective function을 직접적으로 최적화하지 못함

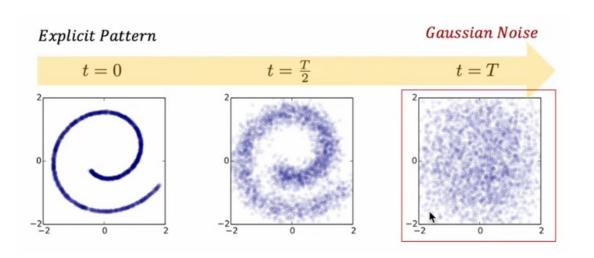
■ What is Diffusion?

Diffusion = 확산

물리학에서 'Diffusion'은특정한 물질(기체, 액체 등)이 조금씩 번지면서 농도로 바뀌는 현상

생성모델에서 'Diffusion'은 원래 데이터의 패턴이 diffusion 과정을 거쳐서 Gaussian Noise로 와해되는 현상을 의미함



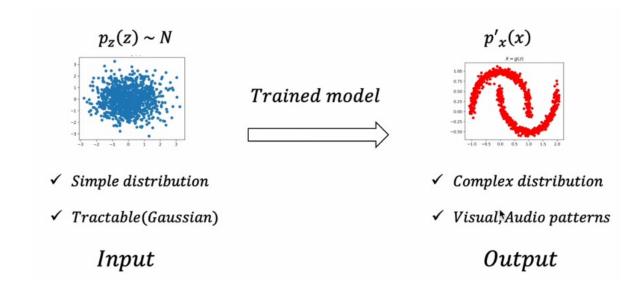


Generative model : Latent variable model

매우 간단한 분포에서 특정한 패턴을 갖는 분포로 변환(mapping, transformation, sampling)하는 것

VAE : 학습된 디코더를 통해 latent variable을 특정한 패턴의 분포로 mapping

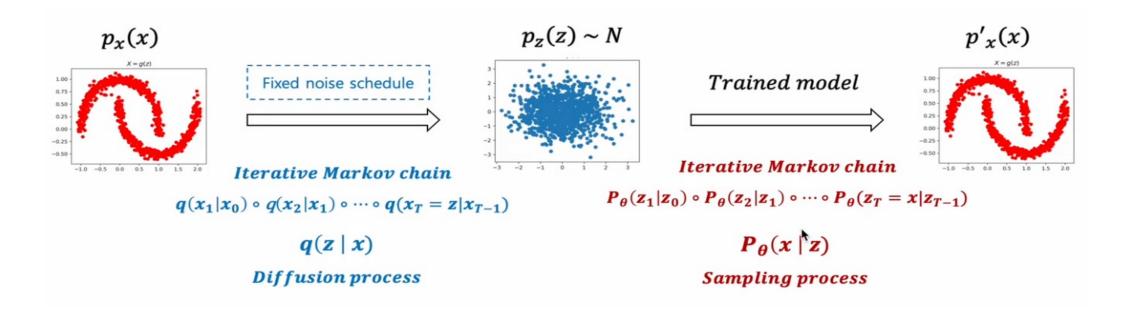
GAN : 학습된 Generator를 통해 latent variable을 특정한 패턴의 분포로 mapping



Generative model : Latent variable model

Diffusion: 학습된 Diffusion model의 조건부 확률분포 p(x|z)를 통해 특정한 패턴의 분포 획득이러한 forward 과정에서 다른 모델과 달리 네트워크를 학습하진 않음.

왼쪽 과정을 학습과정으로 정의하지 않고 사전에 정의된 스케쥴에 따라 노이즈를 주입하는 과정으로 정의 두 과정 모두 조건부 확률 분포의 마코브 체인으로 구성



Reverse process

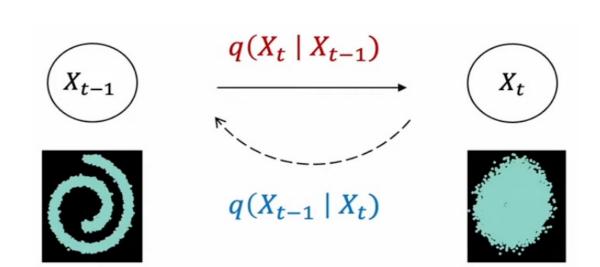
05. Diffusion

Diffusion model

Diffusion model은 Generative model에서 학습된 데이터의 패턴을 생성해내는 역할을 함

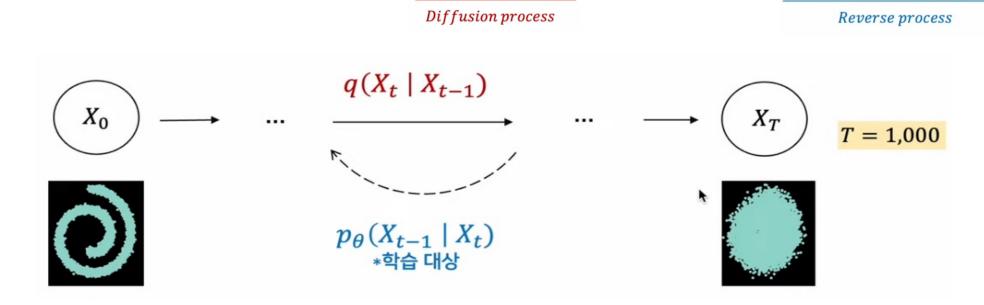
패턴 생성 과정을 학습하기 위해 고의적으로 패턴을 무너뜨리고(Noising), 이를 다시 복원하는 조건부 PDF를 학습(Denoising)

Diffusion process



Diffusion model

Diffusion model은 Generative model에서 학습된 데이터의 패턴을 생성해내는 역할을 함 패턴 생성 과정을 학습하기 위해 고의적으로 패턴을 무너뜨리고(Noising), 이를 다시 복원하는 조건부 PDF를 학습(Denoising)



한번에 변환하기 어렵기 때문에 2개의 변화 과정은 Markov Chain을 통해 매우 많은 단계로 구성됨

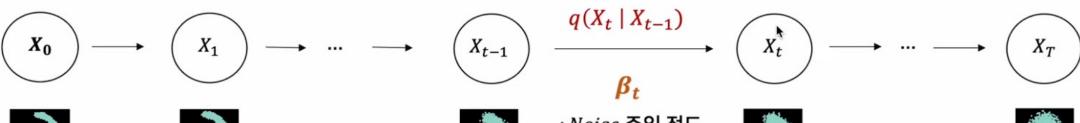
Diffusion model : Forward process

Gaussian Noise를 주입하는 과정

한 step마다 주입하는 noise는 사전에 정의됨 (β)

점진적으로 커지는 Noise (Linear, Sigmoid, Quadratic)

$$q(X_{1:T} \mid X_0) := \prod_{t=1}^T q(X_t \mid X_{t-1}), \qquad q(X_t \mid X_{t-1}) := N(X_t; \ \mu_{X_{t-1}}, \Sigma_{X_{t-1}}) := N(X_t; \sqrt{1 - \beta_t} X_{t-1}, \ \beta_t \cdot I)$$









: Noise 주입 정도

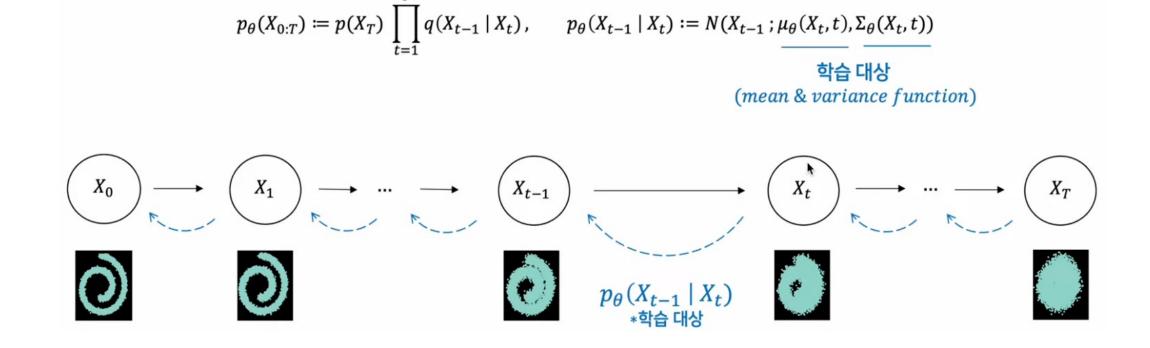




■ Diffusion model : Reverse process

패턴을 복원해내는 과정으로 학습의 대상

조건부 가우시안 분포의 parameter : 평균과 분포를 학습

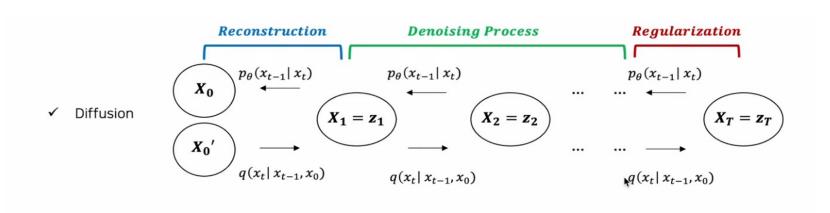


Diffusion model : Reverse process Loss

VAE와 동일하게 reconstruction loss와 regularization을 가짐

Denoising process 항을 추가로 가지고 있다는 것이 특징

모든 t 시점의 z를 학습하기 위해 t시점의 forward process 분포와 reverse process 분포가 KL Divergence로 같아지도록 학습



$$Loss_{Diffusion} = D_{KL}(q(z \mid x_0) \parallel P_{\theta}(x_0 \mid z)) - E_{z \sim q(z \mid x)}[\log P_{\theta}(z)]$$

$$= D_{KL}(q(z \mid x_0) \parallel P_{\theta}(z)) + \sum_{t=2} D_{kL}(q(x_{t-1} \mid x_t, x_0) \parallel P_{\theta}(x_{t-1} \mid x_t)) - E_q[\log P_{\theta}(x_0 \mid x_1)]$$
Regularization
Denoising Process
Reconstruction

과제 소개

homework

코드과제

주어진 코드 과제 문제 풀이 후 kubig 공식 github에 업로드 마감 :과제가 제시된 후 <u>2월 5(월) 자정</u>까지 제출

Github는 과제제출 - 해당주차내에 파일명: 00기_이름_0주차 로 통일



homework

■ 공지

개별 스터디(3주간 진행)

- 큰 주제는 설문 관련 주제로 선정하되 디테일한 방향성은 스터디원과 논의

프로젝트(4주 후 2월 29일 KUBIG Contest 진행)

- 다음주까지 주제 선정 권장



Thank you for Listening