

BACHELORARBEIT

Contrastive Learning mit Stable Diffusion-basierter Datenaugmentation

Verbesserung der Bildklassifikation
durch synthetische Daten

vorgelegt am 23. September 2024
Paul Hofmann

Erstprüferin: Prof. Dr. Larissa Putzar
Zweitprüfer: Prof. Dr. Jan Neuhöfer

**HOCHSCHULE FÜR ANGEWANDTE
WISSENSCHAFTEN HAMBURG**
Department Medientechnik
Finkenau 35
22081 Hamburg

**FRAUNHOFER-INSTITUT FÜR
PRODUKTIONSANLAGEN UND
KONSTRUKTIONSTECHNIK IPK**
Pascalstraße 8–9
10587 Berlin

Zusammenfassung

Diese Bachelorarbeit untersucht die Verbesserung der Bildklassifikation durch synthetische Daten im Supervised Contrastive Learning (SCL). Ziel ist es, die Eignung von DA-Fusion, einer Stable Diffusion-basierten Methode zur Datenaugmentation, für die Generierung synthetischer Daten in einem Anwendungsfall aus der Recyclingwirtschaft zu evaluieren. Daraüber hinaus wird untersucht, wie generierte Near Out-of-Distribution (OOD)-Daten in das Supervised Contrastive Learning integriert werden können, um als negativ-Beispiele zu dienen und die Repräsentationen der In-Distribution-Daten weiter zu verbessern. Die Ergebnisse zeigen, dass DA-Fusion geeignete In-Distribution-Augmentationen liefert, welche die Klassifikationsleistung verbessern. Jedoch führte die Integration von Near OOD-Daten im SCL zu einer Verschlechterung der Modellgenauigkeit, da die Beispiele oft zu weit von den In-Distribution-Daten entfernt waren. Die Arbeit hebt die Herausforderungen bei der Generierung und Nutzung synthetischer Daten hervor und bietet Ansätze zur Optimierung von Contrastive Learning in diesem Kontext.

Abstract

This bachelor thesis investigates how image classification can be improved using synthetic data for Supervised Contrastive Learning (SCL). The aim is to evaluate the suitability of DA-Fusion, a stable diffusion-based data augmentation method, for generating synthetic data in a use case from the recycling industry. It also investigates how synthetic near out-of-distribution (OOD) images can be integrated into supervised contrastive learning to serve as negative examples in order to further improve the representation of in-distribution data. The results show that DA-Fusion provides suitable in-distribution augmentations that improve classification performance. However, the integration of near OOD data in SCL led to a deterioration of model accuracy, as the examples were often too dissimilar from the in-distribution data. The thesis highlights the challenges of generating and using synthetic data and offers approaches to optimize contrastive learning in this context.

Danksagung

An erster Stelle möchte ich mich herzlich bei meiner Erstprüferin und Betreuerin, Frau Prof. Dr. Larissa Putzar, für ihre kontinuierliche Unterstützung und fachliche Begleitung während meiner Bachelorarbeit bedanken.

Außerdem gilt ein besonderer Dank Herrn Prof. Dr. Jan Neuhöfer, meinem Zweitprüfer, der mich bereits während meines Praktikums am Fraunhofer-IPK begleitet hat.

Ebenso möchte ich mich bei meinem Betreuer am Fraunhofer-IPK, Herrn Paul Koch, für seine Unterstützung und die konstruktive Zusammenarbeit bedanken. Sein wertvolles Feedback hat wesentlich dazu beigetragen, diese Arbeit erfolgreich abzuschließen.

Darüber hinaus danke ich dem Fraunhofer-IPK für die Möglichkeit, mein Praktikum am Institut zu absolvieren und diese Arbeit in enger Kooperation durchzuführen. Die gewonnenen Einblicke und die technische Unterstützung haben diese Arbeit entscheidend geprägt.

Nicht zuletzt möchte ich mich bei meinen Freunden und meiner Familie bedanken. Ihr Zuspruch und ihre Unterstützung haben mir geholfen, auch in schwierigen Phasen motiviert zu bleiben und diese Arbeit erfolgreich zu beenden.

Inhaltsverzeichnis

Abbildungsverzeichnis	III
Tabellenverzeichnis	IV
1 Einleitung	1
1.1 Motivation	1
1.2 Zielsetzung	2
1.3 Aufbau der Arbeit	3
2 Theoretische Grundlagen	5
2.1 Maschinelles Lernen	5
2.1.1 Überwachtes und unüberwachtes Lernen	6
2.1.2 Deep Learning	7
2.1.3 Neuronale Netze	8
2.1.4 Datenaugmentation	10
2.1.5 Out-of-Distribution Daten	11
2.2 Synthetische Daten	12
2.2.1 Variational Autoencoder	13
2.2.2 Generative Adversarial Networks	15
2.2.3 Diffusionsmodelle	16
2.2.4 DA-Fusion	18
2.3 Contrastive Learning	20
2.3.1 Unsupervised Contrastive Learning	20
2.3.2 Supervised Contrastive Learning	22
2.4 Klassifikation von Gebrauchsgegenständen in der Recyclingwirtschaft	23
2.4.1 Herausforderungen bei der Generierung synthetischer Daten	24
2.4.2 Synthetische Daten als negativ-Beispiele im Contrastive Learning	25
2.4.3 Integration von DA-Fusion und Supervised Contrastive Learning	26
3 Methodisches Vorgehen	27
3.1 MVIP-Datensatz	27
3.1.1 Teildatensatz	27
3.1.2 Vorverarbeitung	28

3.2	Implementierung	28
3.2.1	DA-Fusion	29
3.2.2	Supervised Contrastive Learning	30
3.3	Versuchsaufbau	31
3.3.1	Synthetische Datengenerierung	31
3.3.2	Trainings- und Testdurchläufe	32
3.3.3	Evaluationsmethoden und Metriken	33
4	Ergebnisse	34
4.1	Die generierten synthetischen Daten	34
4.1.1	In-Distribution-Augmentationen	34
4.1.2	Near Out-of-Distribution-Augmentationen	35
4.2	Trainings- und Testergebnisse	35
4.2.1	Contrastive Pre-Training	35
4.2.2	Lineare Klassifikation	36
4.3	Vergleich der Ergebnisse	38
4.3.1	Mit und ohne In-Distribution-Augmentationen	38
4.3.2	Mit und ohne Near Out-of-Distribution-Augmentationen	39
5	Diskussion	40
5.1	Eignung von DA-Fusion für die synthetische Datengenerierung	40
5.2	Wirksamkeit von Near Out-of-Distribution-Augmentationen im Supervised Contrastive Learning	42
6	Fazit	44
6.1	Zusammenfassung der wichtigsten Erkenntnisse	44
6.2	Beantwortung der Forschungsfragen	44
6.3	Ausblick und potenzielle Weiterentwicklungen	45
Literatur		46
Anhang		49
.1	Implementierung	49
.2	Beispiele für Augmentationen	53

Abbildungsverzeichnis

2.1	Ein einfaches Venn-Diagramm, das die Beziehung zwischen KI, ML und DL veranschaulicht.	7
2.2	Schematische Abbildung eines künstlichen Neurons.	8
2.3	Architektur eines Convolutional Neural Networks.	10
2.4	Einige Beispiele für unterschiedliche Datenaugmentationstechniken und Kombinationen, die in (Chen et al., 2020) verwendet wurden.	11
2.5	Aufbau eines Autoencoders.	13
2.6	Überblick über das GAN-Training.	15
2.7	Darstellung der Vorwärts- und Rückwärtsdiffusion in einem Diffusionsmodell.	16
2.8	Darstellung der Vorwärts- und Rückwärtsdiffusion in Stable Diffusion. . . .	18
2.9	Überblick über den Prozess zur Datenaugmentation mit DA-Fusion.	19
2.10	Die Mensch-Maschine-Schnittstelle des EIBA-Systems.	23
3.1	Beispielbilder aus dem MVIP-Datensatz, die auf die Region of Interest (ROI) zugeschnitten wurden.	28
3.2	Übersicht des Versuchsaufbaus für die Generierung der synthetischen Daten mit DA-Fusion und die Trainings- und Testdurchläufe mit Supervised Contrastive Learning.	32
4.1	Trainings- und Validierungsfehler während des Contrastive Pre-Trainings. .	36
4.2	Trainings- und Validierungsfehler der linearen Klassifikation.	37
4.3	Trainings- und Validierungs-Accuracy während der linearen Klassifikation. .	37
4.4	ID- und OOD-Confidence während der linearen Klassifikation.	38

Tabellenverzeichnis

4.1 Die finalen Testergebnisse der linearen Klassifikation auf den Validierungsdaten. 36

1 Einleitung

Es folgt zunächst eine Einleitung in das Thema der Arbeit, die Motivation für die Untersuchung, die Zielsetzung und der Aufbau der Arbeit.

1.1 Motivation

Die Forschung in den Bereichen der Künstlichen Intelligenz (KI) und des Maschinellen Lernens (ML) deckt eine immer breitere Palette von Anwendungen ab, die an vielen Stellen in unserem Alltag Einzug halten. In den vergangenen Jahren ist insbesondere die generative Modellierung in ein neues Zeitalter eingetreten, wie durch die Popularität von Sprachmodellen wie ChatGPT oder Bildgeneratoren wie DALL-E und Stable Diffusion gezeigt wird. Diese Modelle sind in der Lage, menschenähnliche Texte zu schreiben, fotorealistische Bilder zu erzeugen und sogar Videos und Musik zu kreieren, wodurch sie die Art und Weise verändern, wie KI mit kreativen Prozessen interagiert.

Auch für industrielle Anwendungen hat diese Entwicklung eine immense Bedeutung, insbesondere im Bereich des Maschinellen Sehens, bei dem es darum geht, visuelle Informationen zu verarbeiten und zu interpretieren. Es ist die Grundlage vieler automatisierter Prozesse, wie etwa der Qualitätskontrolle in Produktionslinien, der Objekterkennung in der Robotik oder der Bildklassifikation in der Medizin. Ein zentrales Ziel dabei ist es, Modelle zu entwickeln, die in der Lage sind, zuverlässig Muster in visuellen Daten zu erkennen und daraus Entscheidungen zu treffen.

Ein wesentlicher Faktor für den Erfolg dieser Modelle ist die Verfügbarkeit von Daten. Industrielle Anwendungsfälle sind allerdings von domänenspezifischen Anforderungen und einer hohen Komplexität geprägt, weshalb herkömmliche Ansätze der Datenbeschaffung oft an ihre Grenzen stoßen (Kraljevski et al., 2023; Lu et al., 2024). Die manuelle Erfassung und Annotation von Daten ist zeitaufwendig, teuer und in vielen Fällen nicht praktikabel. Zudem sind die verfügbaren Datenmengen in hochspezialisierten Anwendungen oft zu gering oder zu homogen, um ein Modell mit der nötigen Robustheit und Generalisierungsfähigkeit zu trainieren. Dies führt dazu, dass die Modelle im Umgang mit neuen Daten nicht die gewünschte Leistung erzielen, da sie mit Out-of-Distribution (OOD)-Daten konfrontiert werden, also mit Daten, welche nicht aus der gleichen Verteilung stammen wie die Trainingsdaten.

Hier kommen synthetische Daten ins Spiel, die durch generative Modelle künstlich erzeugt werden. Der Vorteil dieser synthetischen Daten liegt darin, dass sie in beliebiger Menge und Varianz produziert werden können, um die Datenvielfalt zu erhöhen und das Modell auf verschiedenste Szenarien vorzubereiten. Trotz dieser Vorteile ist auch die synthetische Datengenerierung von den Herausforderungen der industriellen Anwendungen betroffen und scheitert oft bei der realistischen Darstellung komplexer, domänenspezifischer Konzepte aus einer limitierten Menge an Beispielen (Lu et al., 2024).

Die vorliegende Arbeit basiert auf einem Pflichtpraktikum am Fraunhofer Institut für Produktionsanlagen und Konstruktionstechnik (IPK) in Berlin, wo diese Herausforderungen im Rahmen eines konkreten Anwendungsfalls erlebt wurden. Es handelte sich dabei um ein Forschungsprojekt zur Entwicklung eines KI-Systems für die Klassifikation von Gebrauchsgegenständen in der Recyclingwirtschaft. Dafür sollten synthetische Daten der teils sehr komplexen Objekte generiert werden, um sie in unterschiedlichen Gebrauchszuständen darzustellen. Obwohl verschiedene Ansätze getestet wurden, erzielten sie nur mittelmäßige Ergebnisse, weshalb die Suche nach einer effektiven Methode zur Generierung synthetischer Daten für industrielle Anwendungen auch für diese Arbeit die zentrale Motivation darstellt.

1.2 Zielsetzung

Vor diesem Hintergrund befasst sich die Arbeit mit der Untersuchung der Methode DA-Fusion (Trabucco et al., 2023), welche ein vortrainiertes Stable Diffusion-Modell benutzt, um automatisch semantisch sinnvolle Variationen von Bildern zu generieren, ohne dass dem Modell die dargestellten Konzepte vorher bekannt sein müssen.

Ein weiterer wichtiger Teil der Arbeit ist der Einsatz von Contrastive Learning, einer Methode, die in den letzten Jahren immer mehr an Bedeutung gewonnen hat. Contrastive Learning zielt darauf ab, repräsentative Merkmale von Daten zu lernen, indem es ähnliche Datenpunkte in einem latenten Repräsentationsraum näher zusammenbringt und unähnliche weiter voneinander entfernt. Diese Technik erwies sich als besonders nützlich, um robuste und generalisierbare Repräsentationen zu erlernen (Liu, 2021).

Mit der Kombination von DA-Fusion und Contrastive Learning soll dabei nicht nur die Generalisierungsfähigkeit der Bildklassifikation verbessert werden, sondern auch untersucht werden, ob mangelhafte synthetische Daten einen Mehrwert für die Modellleistung haben können, wenn sie ausschließlich als negative Beispiele im Contrastive Learning integriert werden. Hier bietet DA-Fusion die Möglichkeit, einerseits „normale“ synthetische Daten zu generieren und andererseits „Near Out-of-Distribution“ (Near OOD)-Daten.

Konkret sollen somit zwei zentrale Forschungsfragen beantwortet werden:

1. Kann DA-Fusion synthetische Daten für die Recyclingwirtschaft erzeugen, die die Generalisierungsfähigkeit des Modells im Supervised Contrastive Learning verbessern?
2. Können Near OOD-Augmentationen im Supervised Contrastive Learning dazu beitragen, die Robustheit des Modells gegenüber OOD-Daten zu erhöhen und die Repräsentationen von In-Distribution-Daten weiter zu verbessern?

1.3 Aufbau der Arbeit

Die vorliegende Arbeit gliedert sich in sechs Kapitel.

In Kapitel 2 werden zunächst die theoretischen Grundlagen gelegt, die das Verständnis für die darauffolgenden Kapitel ermöglichen. Es beginnt mit einer Einführung in das Maschinelle Lernen, wobei sowohl überwachte als auch unüberwachte Lernverfahren erklärt werden, bevor tiefer auf Deep Learning und neuronale Netze eingegangen wird. Ein besonderes Augenmerk wird dabei auf die Bedeutung der Datenaugmentation und das Konzept der Out-of-Distribution-Daten gelegt. Im Anschluss daran wird auf die verschiedenen Ansätze zur Generierung synthetischer Daten eingegangen, darunter Variational Autoencoder (VAE), Generative Adversarial Networks (GANs) und Diffusionsmodelle, wobei der Fokus auf Stable Diffusion und DA-Fusion liegt. Das Kapitel schließt mit einer ausführlichen Betrachtung von Contrastive Learning, insbesondere des Supervised Contrastive Learning (SCL), sowie der Beschreibung des Anwendungsfalls zur Klassifikation von Gebrauchsgegenständen in der Recyclingwirtschaft. Hier werden die Herausforderungen bei der Generierung synthetischer Daten, die Möglichkeit zur Nutzung synthetischer Daten als negative Beispiele im SCL und der eigene Ansatz zur Integration von DA-Fusion in das SCL beschrieben.

Kapitel 3 beschreibt das methodische Vorgehen. Hier wird zunächst der verwendete MVIP-Datensatz detailliert erläutert, der verwendete Teildatensatz definiert und die notwendigen Vorverarbeitungsschritte erklärt. Danach wird auf die Implementierung der DA-Fusion-Methode und des Supervised Contrastive Learning eingegangen. Das Kapitel schließt mit einer Beschreibung des Versuchsaufbaus, der sowohl die Generierung der synthetischen Daten mittels DA-Fusion als auch die Trainingsdurchläufe und die verwendeten Evaluationsmethoden umfasst.

In Kapitel 4 werden die Ergebnisse der Arbeit präsentiert. Zunächst werden die erzeugten synthetischen Daten vorgestellt und in zwei Kategorien eingeteilt: In-Distribution- und Near-Out-of-Distribution-Daten. Daraufhin folgen die Ergebnisse der Trainings- und Testdurchläufe, die das Pre-Training mittels Supervised Contrastive Learning und die darauf aufbauende lineare Klassifikation betreffen. Im Anschluss werden die erzielten Resultate mit

und ohne In-Distribution-Augmentationen sowie mit und ohne Near OOD-Augmentationen miteinander verglichen.

Kapitel 5 widmet sich der Diskussion der Ergebnisse. Hier wird insbesondere die Eignung von DA-Fusion zur Generierung synthetischer Daten bewertet. Zudem wird die Wirksamkeit der Near Out-of-Distribution-Daten im Rahmen des Supervised Contrastive Learning diskutiert, um zu analysieren, ob diese zur Verbesserung der Modellleistung beitragen.

Abschließend folgt in Kapitel 6 eine Zusammenfassung der wichtigsten Erkenntnisse der Arbeit. Hier werden die Forschungsfragen beantwortet und ein Ausblick auf mögliche Weiterentwicklungen und zukünftige Forschungsarbeiten gegeben.

2 Theoretische Grundlagen

Das folgende Kapitel gibt eine Einführung in die theoretischen Grundlagen, die für das Verständnis der Arbeit notwendig sind. Dabei werden vor allem zentrale Konzepte und Methoden des maschinellen Lernens, der synthetischen Datengenerierung, sowie des Contrastive Learning behandelt. Darauffolgend wird der Anwendungsfall vorgestellt, den die Arbeit behandelt, und ein eigener Ansatz zur Integration der Methoden DA-Fusion und Supervised Contrastive Learning beschrieben.

2.1 Maschinelles Lernen

Maschinelles Lernen (ML) hat sich zu einem zentralen Bestandteil der Künstlichen Intelligenz (KI) entwickelt, einem interdisziplinären Forschungsfeld, das sich mit Algorithmen und Techniken befasst, welche es Computern ermöglichen, menschenähnliche Intelligenz zu erlangen.

Die ersten großen Durchbrüche in der KI kamen im Bezug auf Aufgaben, die für Menschen intellektuell eine große Herausforderung darstellten, die aber von Computern relativ einfach zu lösen waren, da sie als Liste formaler, mathematischer Regeln beschrieben werden konnten. Die große Schwierigkeit lag allerdings in den Aufgaben, die für Menschen relativ einfach und intuitiv sind, welche sich aber nur schwer formal beschreiben lassen (Goodfellow et al., 2016). Hierunter fallen z.B. die Spracherkennung, oder Objekterkennung.

Maschinelles Lernen bezeichnet einen Ansatz, bei dem Computer mit der Fähigkeit ausgestattet werden, selbstständig Wissen aus Erfahrung zu generieren, indem Muster und Konzepte aus rohen Daten erlernt werden. So kann ein Computerprogramm auf Basis von Beispielen lernen, wie es eine bestimmte Aufgabe lösen soll, ohne dass ihm explizit Regeln oder Algorithmen vorgegeben werden.

Eine allgemeine Definition für Maschinelles Lernen bietet (Mitchell, 1997):

Ein Computerprogramm soll aus Erfahrung E in Bezug auf eine Klasse von Aufgaben T und Leistungsmaß P lernen, wenn sich seine Leistung bei Aufgaben T , gemessen durch P , mit Erfahrung E verbessert.

Die Erfahrung E besteht dabei aus einer Menge von Trainingsdaten, beispielsweise Bilder. Die Aufgaben T können sehr unterschiedlich sein, von einfachen Klassifikations- und Regressionsaufgaben bis hin zu komplexen Problemen wie Spracherkennung oder autonomes Fahren. Das Leistungsmaß P gibt an, wie gut die Aufgaben T gelöst werden. Für Klassifikationsaufgaben wird häufig die Accuracy (Genauigkeit) verwendet, welche den Anteil der korrekt klassifizierten Datenpunkte angibt.

Durch das Lernen aus den Trainingsdaten ergibt sich ein *Modell* des zugrundeliegenden Problems, das dann auf neue, unbekannte Daten angewendet werden kann, um Vorhersagen zu machen oder Entscheidungen zu treffen.

2.1.1 Überwachtes und unüberwachtes Lernen

Wie genau Wissen aus Erfahrung bzw. aus Rohdaten generiert wird hängt vom gewählten Verfahren ab. Im Maschinellen Lernen gibt es dabei hauptsächlich zwei Paradigmen; das überwachte und das unüberwachte Lernen.

Beim überwachten Lernen (Supervised Learning) wird das Modell mit einem vollständig annotierten Datensatz trainiert. In den meisten Fällen bedeutet das, dass jeder Datenpunkt mit einem Klassenlabel versehen ist, sodass Eingabe-Ausgabe-Paare entstehen. Ziel ist es, eine Funktion zu lernen, welche die Eingaben auf die entsprechenden Ausgaben abbildet. Ein einfaches Beispiel wäre ein Bildklassifikator, der darauf trainiert wird, Katzen und Hunden zu unterscheiden. Hier würden alle Trainingsbilder entweder mit dem Label „Katze“ oder „Hund“ versehen sein. Im Training kann die Vorhersage des Modells dann mit dem tatsächlichen Label verglichen werden, um den Fehler zu berechnen und die Modellparameter entsprechend anzupassen.

Im Gegensatz dazu arbeitet unüberwachtes Lernen (Unsupervised Learning) mit unbeschrifteten Daten; es gibt also keine vorgegebenen Ausgaben. Stattdessen wird versucht, ein Modell zu befähigen, eigenständig Muster und Strukturen in den Daten zu erkennen und z.B. nützliche Repräsentationen der Eingangsdaten zu erlernen. Zu den häufigsten Methoden des unüberwachten Lernens gehören Clustering- und Assoziationsalgorithmen. Ein Beispiel ist die Segmentierung von Kunden in verschiedene Gruppen basierend auf ihrem Kaufverhalten (Shen, 2021).

In der Praxis werden oft auch hybride Ansätze genutzt, wie das semi-überwachte Lernen (Semi-Supervised Learning), bei dem eine Kombination aus beschrifteten und unbeschrifteten Daten verwendet wird, oder das selbstüberwachte Lernen (Self-Supervised Learning), bei dem das Modell eigenständig Teile der Daten zur Erzeugung von Überwachungssignalen verwendet, anstatt sich auf externe, von Menschen bereitgestellte Labels zu verlassen.

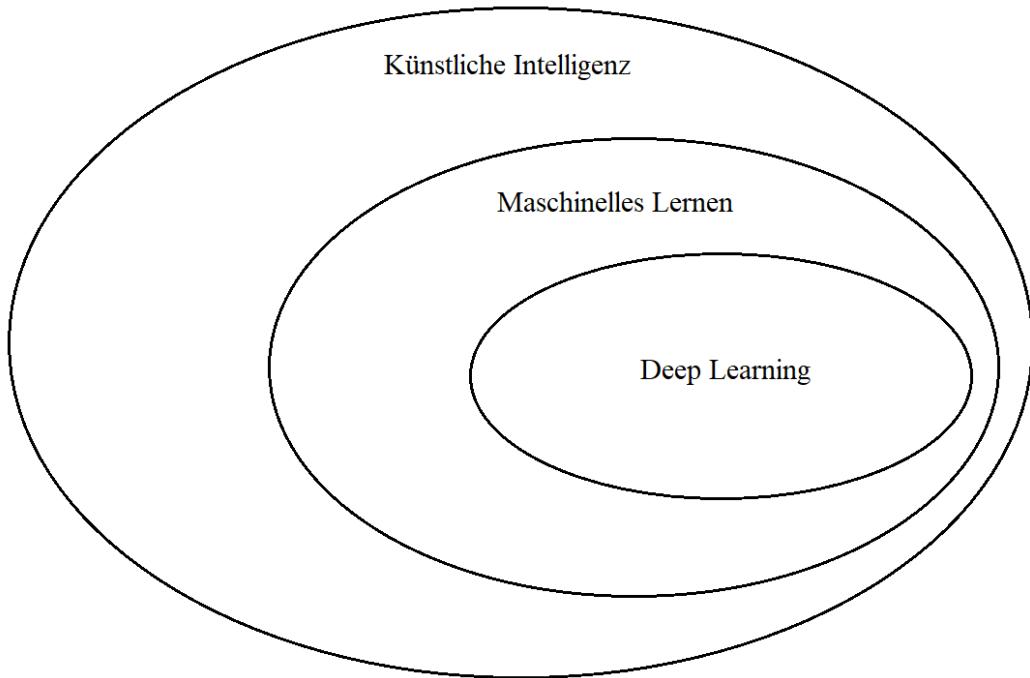


Abbildung 2.1: Ein einfaches Venn-Diagramm, das die Beziehung zwischen KI, ML und DL veranschaulicht.

2.1.2 Deep Learning

Das Wissen, das ein Modell aus den Trainingsdaten lernt, wird in Form von sogenannten Features repräsentiert. Diese Features können einfache Konzepte wie Kanten oder Farben sein, oder komplexere Konzepte wie Gesichter oder Objekte. Unter Deep Learning (DL) versteht man eine tiefe, hierarchische Vernetzung dieser Konzepte, sodass komplexere Konzepte auf simpleren Konzepten aufbauen können. Visuell veranschaulicht entsteht ein Graph mit vielen Ebenen (Goodfellow et al., 2016).

Deep Learning ist also eine Unterkategorie des Maschinellen Lernens (siehe Abbildung 2.1), bei der die Eingabedaten mehrere Verarbeitungsschichten durchlaufen, um eine hierarchische Repräsentation zu ermöglichen. Jede Schicht transformiert die Eingabedaten in eine etwas abstraktere Darstellung. Aus diesem Grund fällt Deep Learning auch unter den Begriff des Representation Learning (Zhou, 2021).

Heutzutage bilden Deep Learning-Modelle die Grundlage für viele Anwendungen der Künstlichen Intelligenz, darunter Bild- und Spracherkennung, maschinelle Übersetzung, medizinische Diagnose und autonomes Fahren. Die rasante Entwicklung in diesem Bereich ist vor allem auf die Verfügbarkeit großer Datenmengen und immer leistungsfähigere Hardware zurückzuführen (Goodfellow et al., 2016).

2.1.3 Neuronale Netze

Während die rasante Entwicklung von Deep Learning in den vergangenen Jahren besonders spürbar geworden ist, sind die zugrundeliegenden Algorithmen und Konzepte schon seit Jahrzehnten bekannt (Goodfellow et al., 2016). Künstliche Neuronale Netze (KNN) bilden dabei die Grundlage der allermeisten Deep Learning-Modelle. Sie sind inspiriert von der Struktur und Funktionsweise des menschlichen Gehirns und bestehen aus einer Vielzahl von miteinander verbundenen Neuronen, die in Schichten organisiert sind. Die Schichten teilen sich auf in eine Eingabeschicht (Input Layer), eine oder mehrere verdeckte Schichten (Hidden Layers) und eine Ausgabeschicht (Output Layer).

Bei den einzelnen Neuronen handelt es sich um mathematische Modellierungen des biologischen Neurons, die erstmals in (McCulloch & Pitts, 1943) vorgestellt wurden, wobei sich die heute verwendeten Neuronenmodelle kaum unterscheiden. In Abbildung 2.2 ist ein solches Neuronenmodell dargestellt.

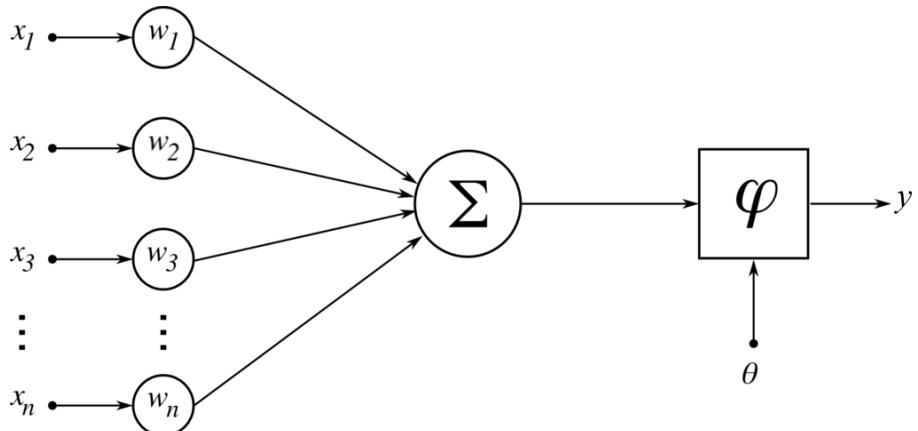


Abbildung 2.2: Schematische Abbildung eines künstlichen Neurons (Burgmer, 2005).

Jedes Neuron empfängt eine Reihe von Eingaben x_1, x_2, \dots, x_n , entweder von externen Quellen oder von den Ausgaben anderer Neuronen. Für jede dieser Eingaben gibt es zugehörige Gewichtungen (Weights) w_1, w_2, \dots, w_n , welche die Stärke und Richtung (positiv oder negativ) des Einflusses der jeweiligen Eingaben auf das Neuron bestimmen. Das Neuron berechnet dann die gewichtete Summe aller Eingaben. Zusätzlich wird ein Schwellenwert (Bias) θ hinzugefügt. Die Aktivierung y des Neurons kann dementsprechend wie in Gleichung 2.1 beschrieben werden.

$$y = \varphi \left(\sum_{i=1}^n w_i x_i + \theta \right), \quad (2.1)$$

wobei φ eine Aktivierungsfunktion ist, die die Ausgabe des Neurons bestimmt. Häufig wird die Sigmoid-Funktion verwendet (siehe Gleichung 2.2), die, im Gegensatz zu einer einfachen Schwellenwertfunktion, kontinuierlich und differenzierbar ist. Dies vereinfacht die Optimierung des Netzwerks (Zhou, 2021).

$$\text{Sigmoid}(x) = \frac{1}{1 + e^{-x}} \quad (2.2)$$

Die Sigmoid-Funktion eignet sich gut für binäre Klassifikationsprobleme. Für Multiklassenprobleme wird jedoch die Softmax-Funktion verwendet, die eine Wahrscheinlichkeitsverteilung über alle Klassen berechnet (siehe Gleichung 2.3) (Goodfellow et al., 2016).

$$\text{Softmax}(x)_i = \frac{e^{x_i}}{\sum_{j=1}^N e^{x_j}}, \quad (2.3)$$

wobei N die Anzahl der Klassen ist.

Im Training fließen die Eingabedaten in einer Vorwärtsausbreitung (Forward Propagation) durch das Netzwerk, um die Ausgabe zu berechnen, welche sich aus der Aktivierung der Neuronen in der Ausgabeschicht ergibt. Es wird dann eine geeignete Verlustfunktion angewendet, um den Fehler (Loss) des Modells zu berechnen. Das Ziel des Trainings ist es, die Gewichtungen der Neuronen so anzupassen, dass der Fehler minimiert wird.

Die Wahl der Verlustfunktion hängt von der Art des Problems ab, das gelöst werden soll. Für Klassifikationsprobleme wird häufig die Kreuzentropie (Cross Entropy) verwendet, die den Fehler zwischen den tatsächlichen und den vorhergesagten Wahrscheinlichkeiten berechnet (siehe Gleichung 2.4).

$$\text{Loss} = - \sum_{i=1}^N y_i \log \hat{y}_i, \quad (2.4)$$

wobei N die Anzahl der Klassen ist, y_i die tatsächliche Wahrscheinlichkeit für Klasse i und \hat{y}_i die vorhergesagte Wahrscheinlichkeit.

Die Optimierung geschieht durch eine Rückwärtsausbreitung (Backpropagation), welche den berechneten Fehler rückwärts durch das Netz propagt, um die Gewichte und Schwellenwerte um einen geringen Wert in die Richtung anzupassen, die den Fehler minimieren würde. Die Richtung wird bestimmt, indem der Gradient der Verlustfunktion berechnet wird. Die Lernrate (Learning Rate) bestimmt, wie groß die Schritte sind, die entlang des Gradienten gemacht werden. So bewegt sich das Modell iterativ entlang des Gradienten hin zu einem lokalen Minimum der Verlustfunktion. Dieser Algorithmus wird als Gradient Descent (Gradientenabstieg) bezeichnet. Im Maschinellen Lernen kommt hauptsächlich der Stochastic

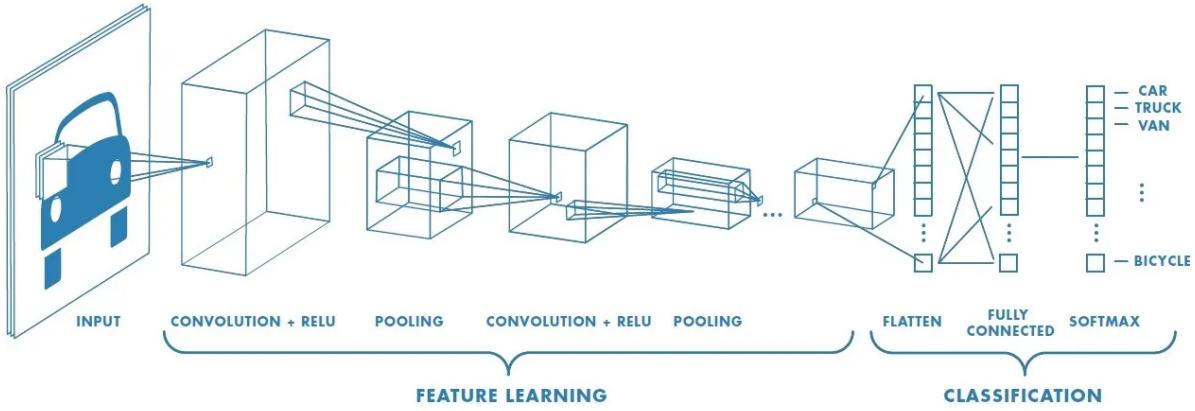


Abbildung 2.3: Architektur eines Convolutional Neural Networks (Saha, 2018).

Gradient Descent (SGD) zum Einsatz, der immer nur einen kleinen, zufällig ausgewählten Teil der Trainingsdaten (einen sogenannten Batch) verwendet, um den Gradienten zu berechnen.

Deep Learning mit neuronalen Netzen kann gut am Beispiel des Convolutional Neural Networks (CNN) veranschaulicht werden, welches speziell für die Verarbeitung von Bildern entwickelt wurde (siehe Abbildung 2.3). Mit Backpropagation trainierte CNNs wurden erstmals in (Cun et al., 1989) behandelt, bilden aber auch heute noch die Grundlage von zahlreichen Anwendungen im ML.

Ein CNN besteht aus mehreren Schichten, darunter Convolutional Layers, Pooling Layers und Fully Connected Layers. Die Convolutional Layers extrahieren sogenannte *Feature Maps* aus den Eingabebildern, indem sie Faltungskerne über das Bild schieben und die gewichteten Summen der Pixel berechnen. Die Pooling Layers reduzieren die Dimensionalität der Feature Maps und die Fully Connected Layers kombinieren die extrahierten Features, um die endgültige Klassifikation vorzunehmen. Dadurch berücksichtigen sie auf effektive Weise die räumliche Struktur von Bildern und können benötigen dabei weniger Parameter als herkömmliche neuronale Netze (Goodfellow et al., 2016).

2.1.4 Datenaugmentation

Wenn ein Modell so stark an die Trainingsdaten angepasst wird, dass es nicht in der Lage ist, auf neuen, unbekannten Daten zu generalisieren, spricht man von Overfitting (Goodfellow et al., 2016). Statt die zugrundeliegenden Muster zu lernen, speichert das Modell auch zufällige Rauschsignale und Fehler. Dies führt dazu, dass das Modell auf den Trainingsdaten eine hohe Genauigkeit erreicht, aber auf neuen Daten eine schlechtere Leistung zeigt. Man verwendet daher neben den Trainingsdaten auch Validierungsdaten (Daten, die nicht zum Training des Modells verwendet werden) zur Überwachung des Overfittings.

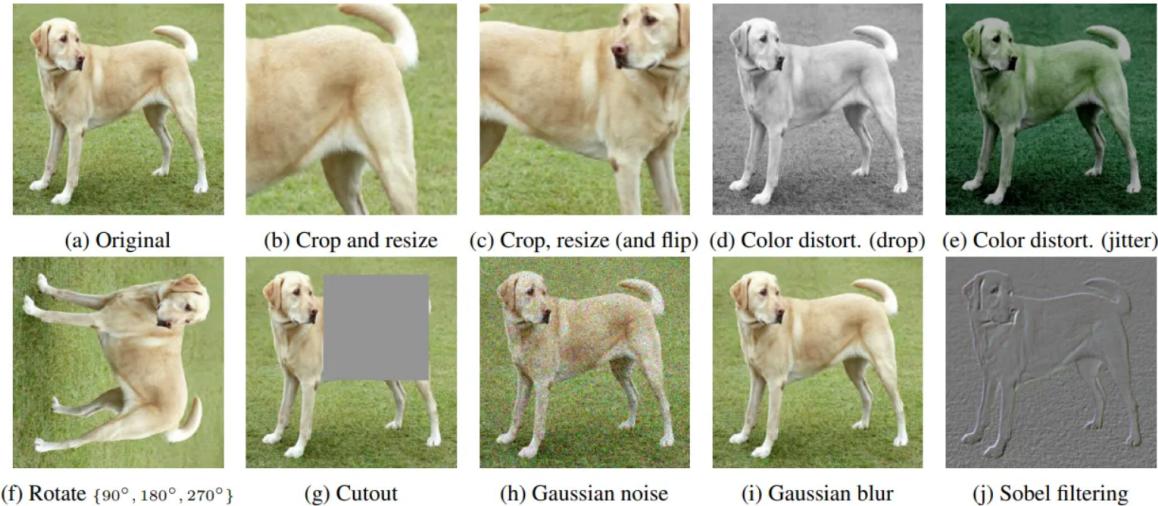


Abbildung 2.4: Einige Beispiele für unterschiedliche Datenaugmentationstechniken und Kombinationen, die in (Chen et al., 2020) verwendet wurden.

Während Overfitting auch das Resultat einer zu hohen Komplexität des Modells sein kann, die dafür sorgt, dass die Trainingsdaten zu genau modelliert werden, liegt das Problem oftmals in der Quantität und Qualität der Trainingsdaten selbst. Sind nicht genügend Daten vorhanden, oder sind die Daten nicht divers genug, kann das Modell nicht generalisieren.

Dabei kann das Modell auch ohne völlig neue Daten zu beschaffen robuster gegenüber Variationen gemacht werden, indem es mit leicht veränderten Versionen der Trainingsdaten trainiert wird. Bei der Datenaugmentation werden unterschiedliche Transformationen auf die vorhandenen Daten angewendet, z.B. Rotation, Skalierung, Verschiebung, Spiegelung, Helligkeitsanpassung oder Rauschen (Shorten & Khoshgoftaar, 2019). Die Transofrmationen werden meist zufällig parametrisiert, um eine Vielzahl von Variationen zu erzeugen. Das Ziel ist es, das Modell zu zwingen, die zugrundeliegenden Muster der Daten zu lernen, anstatt sich auf spezifische Merkmale zu verlassen, die nur in den Trainingsdaten vorhanden sind. Einige Beispiele für Datenaugmentationstechniken sind in Abbildung 2.4 dargestellt.

Datenaugmentation hat sich als eine der wichtigsten Ansätze zur Vermeidung von Overfitting und zur Verbesserung der Generalisierungsfähigkeit von Modellen erwiesen. Sie findet in fast allen Methoden des Maschinellen Lernens Anwendung.

2.1.5 Out-of-Distribution Daten

Wenn ein KI-Modell mit Daten konfrontiert wird, die außerhalb des Bereichs liegen, den es während des Trainings gesehen hat, spricht man von Out-of-Distribution (OOD)-Daten. Es handelt sich also um Datenpunkte oder Muster, die sich signifikant von den Trainingsdaten

unterscheiden. Dies kann zu Problemen führen, da das Modell möglicherweise nicht in der Lage ist, angemessene Vorhersagen oder Entscheidungen für diese Daten zu treffen. Die Erkennung von OOD-Daten ist daher ein wichtiges Forschungsgebiet im maschinellen Lernen, da sie dazu beitragen kann, die Zuverlässigkeit und Sicherheit von KI-Systemen zu verbessern.

Grundsätzlich sollte ein Neuronales Netz höhere Softmax-Wahrscheinlichkeiten für In-Distribution (ID)-Daten und niedrigere Wahrscheinlichkeiten für OOD-Daten ausgeben. Tatsächlich sind die Wahrscheinlichkeiten für OOD-Daten fast immer sehr hoch, meist reicht aber der Abstand zwischen ID- und OOD-Daten aus, um OOD-Instanzen frühzeitig zu identifizieren (Hendrycks & Gimpel, 2018).

Oftmals ist die OOD-Detektion aber weniger trivial, etwa wenn sich ID- und OOD-Daten sehr ähnlich sind. Es wird daher stets nach alternativen Ansätzen gesucht, um die OOD-Detektion zu verbessern. In (Hendrycks & Gimpel, 2018) wird beispielsweise ein Klassifikator erweitert, um Rekonstruktionen der Eingabedaten zu erstellen und den Fehler zwischen den Original- und Rekonstruktionsdaten zu messen. Ein hoher Rekonstruktionsfehler kann auf OOD-Daten hinweisen.

2.2 Synthetische Daten

Datenaugmentation wurde bereits als eine Möglichkeit vorgestellt, um die Menge und Vielfalt der Trainingsdaten zu erhöhen und damit die Generalisierungsfähigkeit des Modells zu verbessern. Allerdings kann die bloße Augmentation an ihre Grenzen stoßen, wenn die verfügbaren Trainingsdaten selbst nicht genügend Vielfalt aufweisen. In solchen Fällen können synthetische Daten eine nützliche Ergänzung sein. Anstatt einfache Transformationen auf die Eingangsdaten anzuwenden, werden völlig neue Datenpunkte generiert, die die zugrundeliegenden Muster der realen Daten nachahmen. Auch im Hinblick auf den Datenschutz sind synthetische Daten vielversprechend, da sie die Möglichkeit bieten, sensible und personenbezogene Informationen zu schützen.

Während synthetische Daten auch manuell mit Hilfe von Simulationssoftware erstellt werden können, hat insbesondere die Entwicklung generativer KI-Modelle in den letzten Jahren zu einer neuen Ära der synthetischen Datenerzeugung geführt. Diese Modelle sind in der Lage, komplexe Datenstrukturen zu lernen und realistische Daten zu generieren, die von echten Daten kaum zu unterscheiden sind.

Da sich diese Arbeit mit der Bildklassifikation beschäftigt, wird im Folgenden vor allem auf generative Modelle eingegangen, die darauf spezialisiert sind, Bilder zu generieren. Es sollen einige der wichtigsten Modelle vorgestellt werden, um eine Grundlage für den aktuellen Stand der synthetischen Datengenerierung zu schaffen.

2.2.1 Variational Autoencoder

Ein Autoencoder ist eine spezielle Art von KI-Modell, das entwickelt wurde, um Daten effizient zu komprimieren und anschließend zu rekonstruieren. Es wurde im Wesentlichen in (Hinton & Salakhutdinov, 2006) vorgestellt, die Grundideen gehen jedoch bis in die 1980er Jahre zurück, wie z.B. in (Rumelhart et al., 1986), wo auch das Backpropagation-Verfahren zur Optimierung neuronaler Netze beschrieben wurde.

Autoencoder bestehen aus zwei Hauptkomponenten; einem *Encoder*, der die Eingabedaten in einen niedrigdimensionalen Darstellungsvektor komprimiert, und einem *Decoder*, der den Darstellungsvektor wieder in die ursprünglichen Daten umwandelt. So wird das Originalbild als Punkt in einem mehrdimensionalen latenten Raum abgebildet, in dem jede Dimension eine bestimmte Eigenschaft des Bildes kodiert.

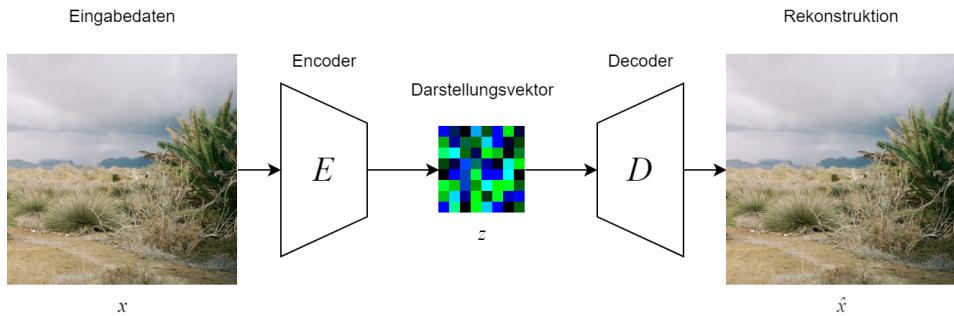


Abbildung 2.5: Aufbau eines Autoencoders.

Das Training eines Autoencoders erfolgt durch Minimierung des Rekonstruktionsfehlers, der die Differenz zwischen den Eingabedaten und den Rekonstruktionen beschreibt. Eine gängige Verlustfunktion hierfür ist der Mean Squared Error (MSE), der in Gleichung 2.5 formuliert ist.

$$Loss = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (x_i - \hat{x}_i)^2, \quad (2.5)$$

wobei x_i die Eingabedaten und \hat{x}_i die Rekonstruktionen sind.

Autoencoder können theoretisch zur Generierung synthetischer Daten verwendet werden, indem ein beliebiger Punkt im latenten Raum gewählt und durch den Decoder rekonstruiert wird. Allerdings hat der herkömmliche Autoencoder einige Schwächen in Bezug auf diese Aufgabe (Foster, 2020): Da er immer nur einen festen Punkt im latenten Raum für jede Eingabe lernt, entsteht ein diskreter und unstrukturierter latenter Raum. Es ist weder die Kontinuierlichkeit zwischen den Punkten der Eingabedaten noch die Vollständigkeit des latenten Raums sichergestellt, sodass neue Stichproben aus dem latenten Raum nicht unbedingt realistische Daten erzeugen.

Der *Variational Autoencoder* (VAE) (Kingma & Welling, 2013) adressiert die Schwachstellen des Autoencoders und verwendet probabilistische Methoden, um die Datenverteilung im latenten Raum zu modellieren; anstelle eines einzelnen, festen Punktes im latenten Raum wird für jede Eingabe eine Verteilung gelernt, aus der die latenten Variablen stammen. Die Verteilung entspricht dabei einer einfachen, bekannten Verteilung, wie z.B. einer Normalverteilung $\mathcal{N}(0, 1)$.

Um die Verteilungen zu lernen, berechnet der Encoder einerseits den Mittelwert μ und die Standardabweichung σ , und erzeugt außerdem eine zufällige Stichprobe der Verteilung. Der Decoder nimmt diese Stichprobe und rekonstruiert die Eingabedaten. Beim Training wird nicht nur der Rekonstruktionsfehler minimiert, sondern auch die sogenannte Kullback-Leibler-Divergenz (KL-Divergenz), welche die Ähnlichkeit zwischen zwei Wahrscheinlichkeitsverteilungen Q und P misst (siehe Gleichung 2.6), in diesem Fall zwischen der latenten Verteilung und einer Normalverteilung (siehe Gleichung 2.7) (Foster, 2020).

$$D_{KL}(Q||P) = \int q(x) \log \frac{q(x)}{p(x)} dx \quad (2.6)$$

$$D_{KL}(\mathcal{N}(\mu, \sigma^2) || \mathcal{N}(0, 1)) = \frac{1}{2} \sum (1 + \log(\sigma^2) - \mu^2 - \sigma^2) \quad (2.7)$$

Durch die Kombination von Rekonstruktionsfehler und KL-Divergenz ergibt sich nun eine Annäherung an die Log-Likelihood $\log p(x)$ der Daten, also der Wahrscheinlichkeit, dass das Modell die Eingabedaten korrekt rekonstruiert. Diese Annäherung wird als Evidence Lower Bound (ELBO) bezeichnet. Sie ist deshalb notwendig, weil zur direkten Berechnung der Log-Likelihood die Integration über alle möglichen Werte der latenten Variablen z erforderlich wäre, was in der Praxis nicht möglich ist.

Die finale Verlustfunktion, die sowohl den Rekonstruktionsfehler als auch die KL-Divergenz kombiniert, ergibt sich aus der negativen ELBO (siehe Gleichung 2.8). Diese Verlustfunktion wird minimiert, um sowohl die Qualität der Rekonstruktionen zu maximieren als auch die latente Verteilung näher an die Normalverteilung anzunähern.

$$Loss = -\mathbb{E}q(z|x)[\log p(x|z)] + D_{KL}(q(z|x)||p(z)), \quad (2.8)$$

wobei $p(z|x)$ die latente Verteilung eines gegebenen Datenpunktes x , $p(x|z)$ die Rekonstruktion des Datenpunktes x aus der latenten Darstellung z und $p(z)$ die Prior-Verteilung der latenten Variablen ist.

2.2.2 Generative Adversarial Networks

Ein weiteres berühmtes KI-Modell ist das *Generative Adversarial Network* (GAN), das in (Goodfellow et al., 2014) vorgestellt wurde. GANs bestehen aus einem *Generator*- und einem *Diskriminator*-Modell, die in einem adversariellen Prozess gegeneinander antreten.

Der Generator nimmt Zufallsrauschen als Eingabe und erzeugt daraus Daten, die möglichst realistisch wirken sollen. Der Diskriminatator erhält sowohl echte Daten aus dem Trainingsdatensatz als auch die vom Generator erzeugten Daten. Seine Aufgabe ist es, zwischen echten und künstlichen Daten zu unterscheiden. Dafür gibt er für einen gegebenen Datenpunkt die Wahrscheinlichkeit aus, dass dieser echt ist. Abbildung 2.6 gibt einen Überblick über das ganze System.

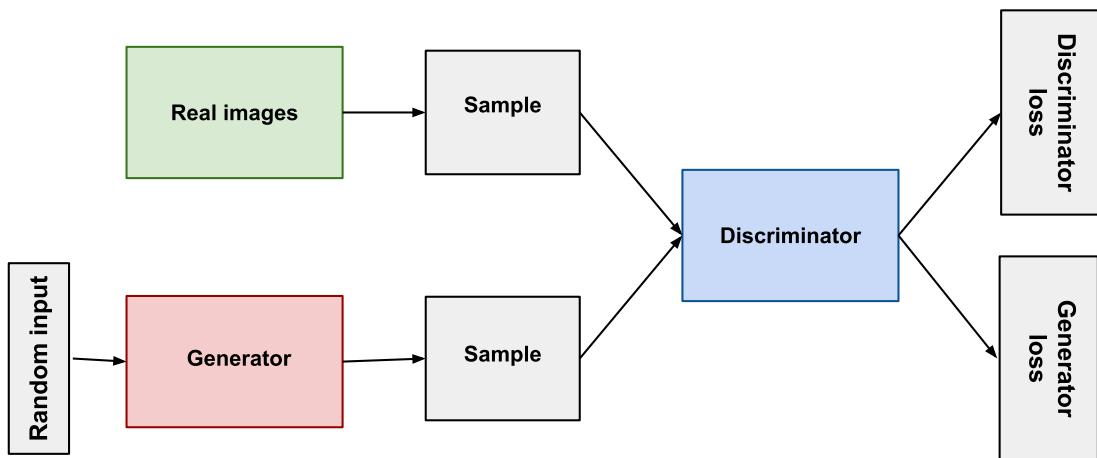


Abbildung 2.6: Überblick über das GAN-Training (Google for Developers, 2022).

Der Diskriminatorverlust ergibt sich aus der Differenz zwischen der Wahrscheinlichkeit, dass echte Daten als echt und künstliche Daten als falsch klassifiziert werden. Der Generatorverlust ergibt sich aus der Differenz zwischen der Wahrscheinlichkeit, dass künstliche Daten als echt klassifiziert werden und der tatsächlichen Wahrscheinlichkeit, dass sie echt sind. Die Verlustfunktionen für den Generator und den Diskriminatoren sind in Gleichung 2.9 formuliert.

$$\begin{aligned} Loss_D &= -\mathbb{E}_{x \sim P}[\log D(x)] - \mathbb{E}_{z \sim P(z)}[\log(1 - D(G(z)))] \\ Loss_G &= -\mathbb{E}_{z \sim P(z)}[\log D(G(z))] \end{aligned} \quad (2.9)$$

Besonders in der Bildgenerierung haben GANs eine hohe Qualität erreicht. GANs sind auch flexibel in Bezug auf die Eingangsdaten und können mit verschiedenen Datentypen wie Bildern, Texten oder Audiodaten arbeiten. Dennoch gibt es einige Nachteile. Beispielsweise kann das Training eines GANs sehr instabil sein, da es schwierig ist, ein Gleichgewicht

zwischen Generator und Diskriminatoren zu finden. Es kann auch zum sogenannten Modus-Kollaps kommen, bei dem der Generator nur eine begrenzte Anzahl von Beispielen erzeugt, da der Diskriminatoren diese als besonders realistisch bewertet (Foster, 2020). Der Generator lernt dann, nur diese Beispiele zu reproduzieren, anstatt die gesamte Datenverteilung zu lernen. Auch die Wahl geeigneter Hyperparameter ist eine Herausforderung.

2.2.3 Diffusionsmodelle

In den letzten Jahren haben Diffusionsmodelle zu einem enormen Fortschritt in der Bildgenerierung, insbesondere der Text-to-Image (T2I)-Generierung, geführt. Diese Modelle basieren auf dem Konzept der Diffusion, das den Prozess der langsamen Vermischung von Teilchen oder Informationen über die Zeit beschreibt. Im maschinellen Lernen fand das Konzept erstmals in (Sohl-Dickstein et al., 2015) Anwendung, mit der Idee, die Struktur von Daten durch Hinzufügen von Rauschen schrittweise aufzulösen und anschließend ein Modell darauf zu trainieren, das ursprüngliche Bild zu rekonstruieren (siehe Abbildung 2.7). Seitdem haben sich Diffusionsmodelle als eine neue Klasse von generativen Deep Learning-Modellen etabliert, die in der Lage sind, noch realistischere Bilder zu generieren als GANs.

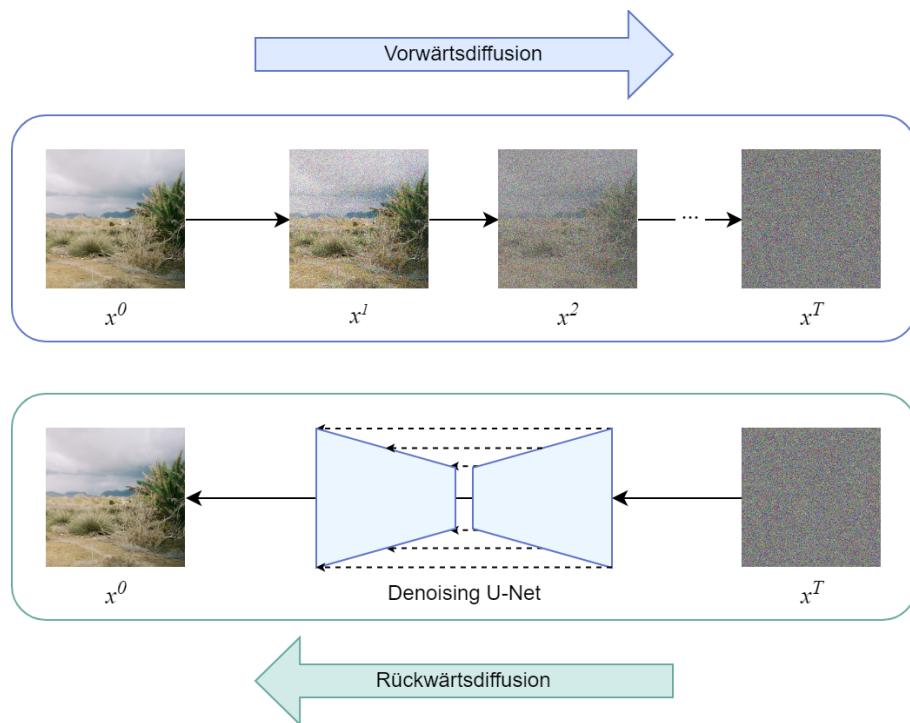


Abbildung 2.7: Darstellung der Vorwärts- und Rückwärtsdiffusion in einem Diffusionsmodell.

Das Training von Diffusionsmodellen teilt sich in zwei Phasen auf, die Vorwärts- und die Rückwärtsdiffusion, welche beide als Markov-Ketten modelliert werden können, also sto-

chastische Prozesse, bei denen die zukünftige Entwicklung eines Systems nur von seinem aktuellen Zustand abhängt. Im Bezug auf Diffusionsmodelle repräsentiert jeder Schritt in der Markov-Kette einen Zeitschritt t und die Zustände $x^{(t)}$ sind die Bilder zu diesem Zeitschritt.

In der Vorwärtsdiffusion fügt das Modell einem Bild schrittweise Rauschen hinzu, sodass es sich am Ende des Prozesses wie eine Normalverteilung verhält. Die Wahrscheinlichkeitsdichte des verrauschten Bildes wird durch die Produktregel der bedingten Wahrscheinlichkeiten berechnet (siehe Gleichung 2.10).

$$q(x^{(0\dots T)}) = q(x^{(0)}) \prod_{t=1}^T q(x^{(t)}|x^{(t-1)}) \quad (2.10)$$

In der Rückwärtendiffusion wird das Modell darauf trainiert, das verrauschte Bild schrittweise in das ursprüngliche Bild zurückzuwandeln. Die Wahrscheinlichkeitsdichte des ursprünglichen Bildes wird ebenfalls durch die Produktregel der bedingten Wahrscheinlichkeiten berechnet (siehe Gleichung 2.11).

$$p(x^{(0\dots T)}) = p(x^{(T)}) \prod_{t=1}^T p(x^{(t-1)}|x^{(t)}) \quad (2.11)$$

Das Neuronale Netz, das zur Vorhersage der Zustände $x^{(t-1)}$ aus den verrauschten Zuständen $x^{(t)}$ verwendet wird, ist typischerweise ein Denoising U-Net (siehe Abbildung 2.7). Es hat eine ähnliche Struktur wie ein Autoencoder, wobei Skip Connections zwischen den Encoder- und Decoder-Schichten bestehen, um die Rekonstruktion des ursprünglichen Bildes zu verbessern. Die Hauptaufgabe des U-Nets besteht darin, das hinzugefügte Rauschen zu schätzen, welches anschließend subtrahiert wird, um das ursprüngliche Bild zu rekonstruieren.

Die Verlustfunktion wird oft als MSE formuliert, um den Unterschied zwischen dem generierten Rauschen und dem tatsächlichen Rauschen zu minimieren.

Anders als bei GANs gibt es keine direkten adversarialen Optimierungsmechanismen, die zu einem Ungleichgewicht führen können. Es wird stattdessen explizit die Wahrscheinlichkeitsdichte zwischen den realen Daten und den erzeugten Daten minimiert, was zu einem robusteren und stabileren Trainingsprozess führt.

Eine entscheidende Weiterentwicklung der Diffusionsmodelle war die Text-Konditionierung des generativen Prozesses. In (Ramesh et al., 2022) wurde *DALL-E 2* vorgestellt, welches ein Diffusionsmodell verwendet, das in der Lage ist, Bilder aus Textbeschreibungen zu generieren. *DALL-E 2* verwendet das Transformer-Modell (Vaswani et al., 2017), um die Textbeschreibungen in eine latente Repräsentation zu kodieren, die dann im Diffusionsprozess verwendet wird.

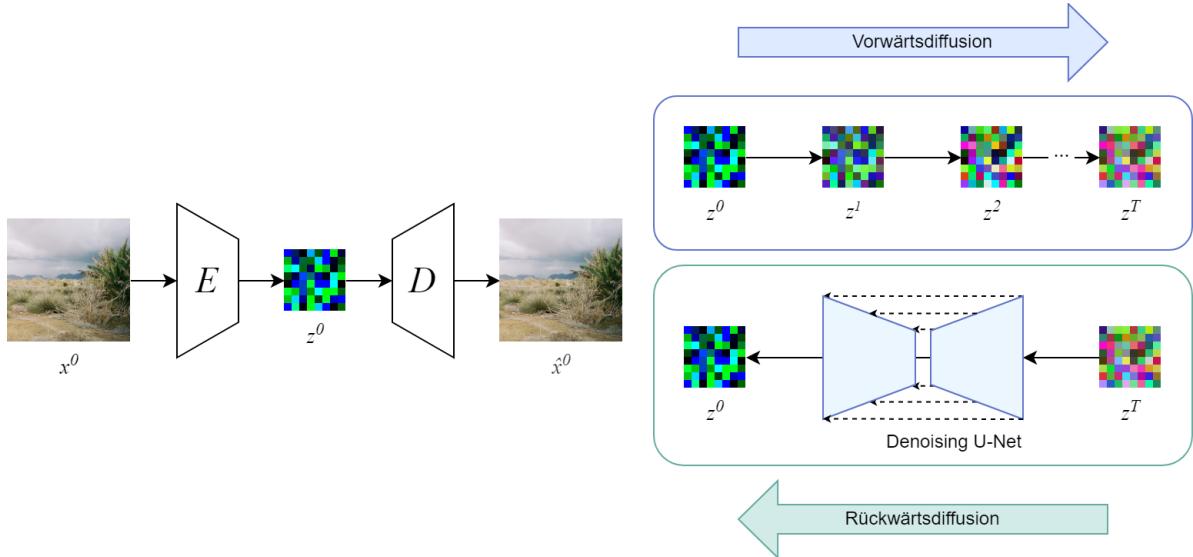


Abbildung 2.8: Darstellung der Vorwärts- und Rückwärtsdiffusion in Stable Diffusion:
Die Diffusionsprozesse werden auf die latenten Darstellungen der Bilder angewendet (rechts), welche vorher mit einem VAE encodiert wurden (links).

Stable Diffusion ist ein besonders einflussreiches Diffusionsmodell, das sich durch die Verwendung eines latenten Diffusionsprozesses auszeichnet (Rombach et al., 2022). Anstatt den Diffusionsprozess direkt auf den hochdimensionalen Bildraum anzuwenden, führt Stable Diffusion die Diffusion in einem niedrigdimensionalen latenten Raum durch, der durch ein VAE-ähnliches Netzwerk generiert wird (siehe Abbildung 2.8). Diese Technik reduziert die Rechenkosten und beschleunigt den Generierungsprozess erheblich, während gleichzeitig hochauflösende und realistische Bilder erzeugt werden.

2.2.4 DA-Fusion

DA-Fusion (Trabucco et al., 2023) ordnet sich zwischen den Bereichen der Datenaugmentation und der synthetischen Datengenerierung ein. Es handelt sich um eine Methode zur semantischen Datenaugmentation von Bildern unter Verwendung eines vortrainierten Stable Diffusion-Modells.

Der traditionelle Ansatz der Datenaugmentation, wie in Unterabschnitt 2.1.4 beschrieben, hat sich als effektiv erwiesen, um die Generalisierungsfähigkeit von Modellen zu verbessern. Allerdings erfordert dieser Ansatz auch eine gute Intuition in Bezug auf den verwendeten Datensatz, um zu vermeiden, dass Transformationen gewählt werden, durch die Informationen verloren gehen, die für die Aufgabe des zu trainierenden Modells wichtig sind. Wenn beispielsweise Farbinformationen für die Klassifizierung von Blumen wichtig sind, könnte die

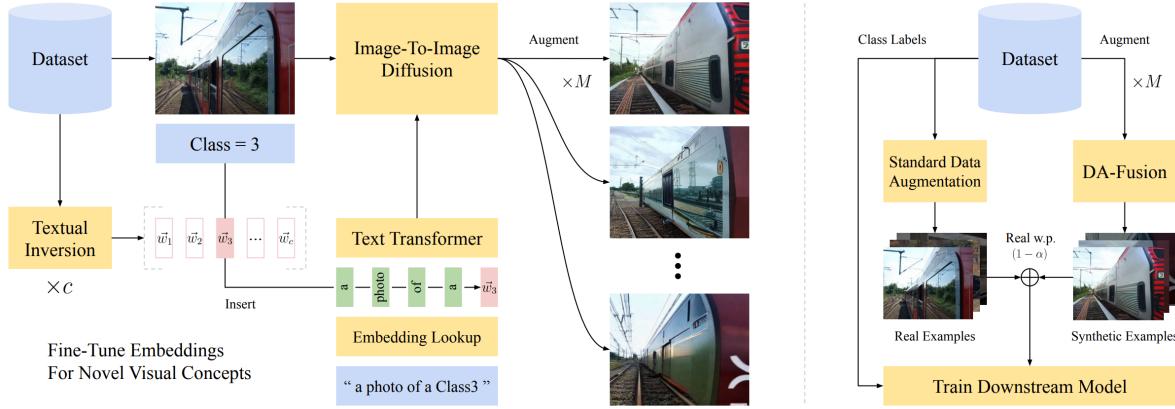


Abbildung 2.9: Überblick über den Prozess zur Datenaugmentation mit DA-Fusion (Trabucco et al., 2023).

Datenaugmentation durch zufällige Farbänderungen verschlechtert die Leistung des Modells. Ein weiteres Beispiel sind Objekte, die klein im Bild sind und durch zufällige Ausschnitte des Bildes aus der Sicht des Modells verschwinden können. DA-Fusion hingegen nutzt das Wissen eines vortrainierten Diffusionsmodells, um den Bildinhalt semantisch zu verstehen und automatisch neue, realistische Variationen zu generieren.

Dafür wird zunächst die Methode Textual Inversion aus (Gal et al., 2022) angewendet, um ein vortrainiertes Stable Diffusion-Modell auf den gegebenen Datensatz feinabzustimmen (Fine-tuning). Für jedes Konzept bzw. für jede Klasse wird ein neues Text-Embedding $\langle y \rangle$ als Platzhalter in das Modell integriert, das unter Verwendung von Trainings-Prompts wie "a photo of a $\langle y \rangle$ " und den zugehörigen Bilddaten trainiert wird. Entscheidend ist hier, dass nicht das ganze Diffusionsmodell neu trainiert wird, sondern lediglich neue Wörter erlernt werden, welche die spezifischen Konzepte repräsentieren, sodass sich bei der Bildgenerierung weiterhin auf das vortrainierte semantische Wissen des Modells gestützt werden kann (siehe Abbildung 2.9).

Anschließend können die Bilder augmentiert werden, indem ihnen eine geringe Menge an Rauschen hinzugefügt wird (also ein Prozess der Vorwärtsdiffusion), welches dann durch das feinabgestimmte Modell wieder entfernt werden soll (die Rückwärtsdiffusion, die von dem Modell gelernt wurde). Hier kommen die selben Text-Prompts zum Einsatz, welche die Text-Embeddings der Konzepte beinhalten. Auf diese Weise müssen keine völlig neuen Bilder generiert werden, denn die grundlegende Struktur wird durch die ursprünglichen Bilder vorgegeben. Dieser Prozess bietet die Möglichkeit, den Grad der Augmentation durch die Wahl des Zeitschritts t zu steuern, an dem das Bild in die Rückwärtsdiffusion eingefügt wird und wie stark es dafür vorher verrauscht werden muss. So entstehen stärkere oder subtilere Augmentationen.

Der beschriebene Image-to-Image-Generierungsprozess baut dabei weitgehend auf dem in (Meng et al., 2022) beschriebenen Ansatz *SDEdit* auf. DA-Fusion unterscheidet sich jedoch dadurch, dass es neue Text-Embeddings für die Konzepte feinabstimmmt und somit speziell für die semantische Datenaugmentation zuvor unbekannter Konzepte konzipiert ist.

2.3 Contrastive Learning

Ein zentrales Thema dieser Arbeit ist das Contrastive Learning. Es ordnet sich in den Bereich des Representation Learning ein, bei dem es darum geht, nützliche Repräsentationen von Daten zu lernen. Die Besonderheit des Contrastive Learning ist, dass es auf der Kontrastierung von Daten basiert, um ähnliche Beispiele zu gruppieren und unähnliche Beispiele voneinander zu trennen. Dies hat sich als effektive Methode mit erstaunlicher Generalisierungsfähigkeit und Robustheit gegenüber Adversarial Attacks erwiesen (Liu, 2021).

Das Contrastive Learning stammt ursprünglich aus dem unüberwachten Lernen, wird aber oft als selbstüberwachte Methode bezeichnet, da die Kontrastierung der Daten eine Art Selbstüberwachung darstellt. Die erlernten Repräsentationen haben sich als deutlich genauer als im traditionellen überwachten Lernen herausgestellt, wo diese ausschließlich zur Klassenunterscheidung optimiert werden (Keshtmand et al., 2022). Da die Methode nicht auf annotierte Daten angewiesen ist, kann sie ein sehr effizienter Ansatz sein, um Modelle vorzutrainieren, die sich durch Finetuning an spezifische Aufgaben anpassen, während sie gleichzeitig allgemeinere, von der Aufgabe unbeeinflusste Merkmale lernen (Radford et al., 2021).

Aufgrund des Erfolgs im unüberwachten Lernen gibt es vermehrt Ansätze, Contrastive Learning auch im überwachten Setting anzuwenden. Hier wird nicht nur zwischen einzelnen Instanzen unterschieden, sondern auch die Klassenzugehörigkeit der Beispiele berücksichtigt.

In den folgenden Abschnitten wird genauer auf die Funktionsweise von sowohl unüberwachten als auch überwachten Varianten des Contrastive Learning eingegangen, die in den letzten Jahren vielversprechende Ergebnisse erzielt haben.

2.3.1 Unsupervised Contrastive Learning

Im Contrastive Learning soll die Distanz ähnlicher Beispiele in einem latenten Repräsentationsraum minimiert und die Distanz unähnlicher Beispiele maximiert werden. Dabei zieht das Modell verschiedene Ankerbeispiele heran und kontrastiert sie mit positiv- und negativ-Beispielen.

Es kommen verschiedene Verlustfunktionen zum Einsatz, wobei der Fehler grundsätzlich darüber aussagt, ob ähnliche Beispiele auch im latenten Raum nahe beieinander liegen. Verlustfunktionen unterscheiden sich zum Beispiel in der Wahl der Distanzmetrik, oder der Anzahl der positiven und negativen Beispiele, die für den Vergleich herangezogen werden.

Das wohl prominenteste Beispiel für Contrastive Learning in der visuellen Domäne ist *SimCLR*, das in (Chen et al., 2020) vorgestellt wurde. SimCLR verwendet den sogenannten NT-Xent Loss (Normalized Temperature-scaled Cross-Entropy Loss), der die Ähnlichkeiten zwischen allen Paaren im Batch berücksichtigt, anstatt nur einzelne Triplets oder Paare. Jedes Beispiel wird dabei zweimal augmentiert, um ein positives Paar aus zwei Ansichten des Beispiels zu erhalten. Alle anderen Beispiele (bzw. dessen Ansichten) im Batch werden als negativ-Beispiele gesehen.

Die Eingabedaten werden durch ein CNN in eine latente Repräsentation encodiert. SimCLR verwendet anschließend einen sogenannten Projection Head, der die Repräsentationen weiter transformiert, um einen Repräsentationsraum zu lernen, der für die Unterscheidung der Beispiele geeignet ist. In diesem Representationsraum werden die Ähnlichkeitswerte der Paare berechnet, um den Fehler zu bestimmen. Dafür wird die Kosinus-Ähnlichkeit $s_{i,j}$ der Repräsentationen z_i und z_j eines Paares berechnet (siehe Gleichung 2.12).

$$s_{i,j} = \frac{z_i \cdot z_j}{\|z_i\| \cdot \|z_j\|} \quad (2.12)$$

Der NT-Xent Loss ergibt sich dann aus der Berechnung des Softmax über die Ähnlichkeiten aller Paare in einem Batch mit N Beispielen, skaliert mit einem Temperaturparameter τ , um die Unterscheidung zwischen positiven und negativen Paaren hervorzuheben (siehe Gleichung 2.13).

$$\text{Loss} = - \sum_{i=1}^N \log \frac{\exp(s_{i,i}/\tau)}{\sum_{j=1}^{2N} \exp(s_{i,j}/\tau)}, \quad (2.13)$$

wobei $s_{i,i}$ das positive Paar aus den zwei augmentierten Ansichten repräsentiert und $s_{i,j}$ die negativen Paare.

Die Verwendung aggressiver Datenaugmentation zur Erzeugung der zwei Ansichten in (Chen et al., 2020) wurde als entscheidender Faktor identifiziert, um die Robustheit der Repräsentationen zu verbessern. Dabei soll die gemeinsame Information der zwei Ansichten so weit wie möglich minimiert werden, ohne Task-relevante Informationen zu verlieren (Tian et al., 2020). Es wurde auch der positive Effekt von *Hard Negatives* herausgestellt, also von Paaren, welche unterschiedliche Konzepte darstellen, aber sehr ähnlich aussehen. Größere Batch Sizes und längere Trainingszeiten begünstigen ebenfalls die Lernfähigkeit des Modells.

2.3.2 Supervised Contrastive Learning

Auch im überwachten Kontext findet Contrastive Learning zunehmend Anwendung, da es das Potenzial hat, die Leistungsfähigkeit von Modellen durch die Nutzung von Label-Informationen zu steigern.

Mit *SupCon* (Khosla et al., 2021) wird eine Weiterentwicklung der Verlustfunktion aus SimCLR geboten, die das Contrastive Learning auf das überwachte Setting anpasst und mehrere positiv-Beispiele pro Ankerbeispiel berücksichtigt. Dabei werden neben den zwei augmentierten Ansichten des Ankerbeispiels weitere Beispiele der gleichen Klasse als positiv-Beispiele herangezogen. Das soll auch die Notwendigkeit des „Hard Negative-Minings“ reduzieren. Trotzdem wird gezeigt, dass das Training sowohl von Hard Negatives wie auch von Hard Positives profitiert.

Die Verlustfunktion von SupCon aus allen N Beispielen im Batch kann wie in Gleichung 2.14 formuliert werden.

$$Loss = - \sum_{i=1}^N \log \left(\frac{1}{|\mathcal{P}(i)|} \sum_{p \in \mathcal{P}(i)} \frac{\exp(s_{i,p}/\tau)}{\sum_{j=1}^N \exp(s_{i,j}/\tau)} \right), \quad (2.14)$$

wobei $\mathcal{P}(i)$ die positiv-Beispiele für das Ankerbeispiel i sind. Die Verwendung des Mittelwertes der positiven Repräsentationen stabilisiert das Training und führt zu einer verbesserten Leistung (Khosla et al., 2021).

Das Einbeziehen der Klassenzugehörigkeiten verbessert nicht nur die Generalisierungsfähigkeit der Modelle, sondern wirkt sich auch positiv auf die OOD-Detektion aus, insbesondere bei *Near OOD*-Daten, die sich nur geringfügig von den Trainingsdaten unterscheiden (Keshtmand et al., 2022).

Im überwachten Kontext bieten sich auch neue Möglichkeiten zur Weiterentwicklung des Contrastive Learning. So wird beim *SCL with Hard Negatives* (Jiang et al., 2024) eine zusätzliche Einschränkung in der Kontrastierung der Beispiele vorgenommen, um ausschließlich Hard Negatives als negativ-Beispiele für ein gegebenes Ankerbeispiel zu selektieren. Dies wird erreicht, indem die negativ-Beispiele im Repräsentationsraum nahe am Ankerbeispiel liegen müssen. Die Strategie hat sich als effektiv erwiesen, um die Generalisierungsfähigkeit der Modelle zu verbessern.

2.4 Klassifikation von Gebrauchsgegenständen in der Recyclingwirtschaft

Der konkrete Anwendungsfall, auf den sich diese Arbeit bezieht, ist die Klassifikation verschiedener industrieller Objekte und Gebrauchsgegenstände in der Recyclingwirtschaft. Grundlage dafür ist das Forschungsprojekt „Sensorische Erfassung, automatisierte Identifikation und Bewertung von Altteilen anhand von Produktdaten sowie Informationen über bisherige Lieferungen“ (EIBA), das im Rahmen der Fördermaßnahme „Ressourceneffiziente Kreislaufwirtschaft – Innovative Produktkreisläufe (ReziProK)“ des Bundesministeriums für Bildung und Forschung entstand (Wagner, 2022). Neben dem Fraunhofer-IPK waren auch die Technische Universität Berlin, die Deutsche Akademie der Technikwissenschaften (acatech), sowie die Circular Economy Solutions GmbH beteiligt.

Das Ziel des Projekts war die Entwicklung eines KI-gestützten Systems, welches Daten aus verschiedenen digitalen Sensoren, sowie Kontextdaten aus dem Geschäftsprozess verarbeitet, um bei der Identifikation, Inspektion und Sortierung von Altteilen zu unterstützen.

Viele der Altteile sind sehr ähnlich und erfordern Expertenwissen, um sie korrekt zu identifizieren und den Beschädigungsgrad zu bewerten, wobei die Beschriftungen und Barcodes oft nicht mehr lesbar sind. Hier setzt das KI-System an, um den Menschen zu unterstützen. Es werden dafür multimodale Sensordaten verwendet, unter anderem Tiefenkameras

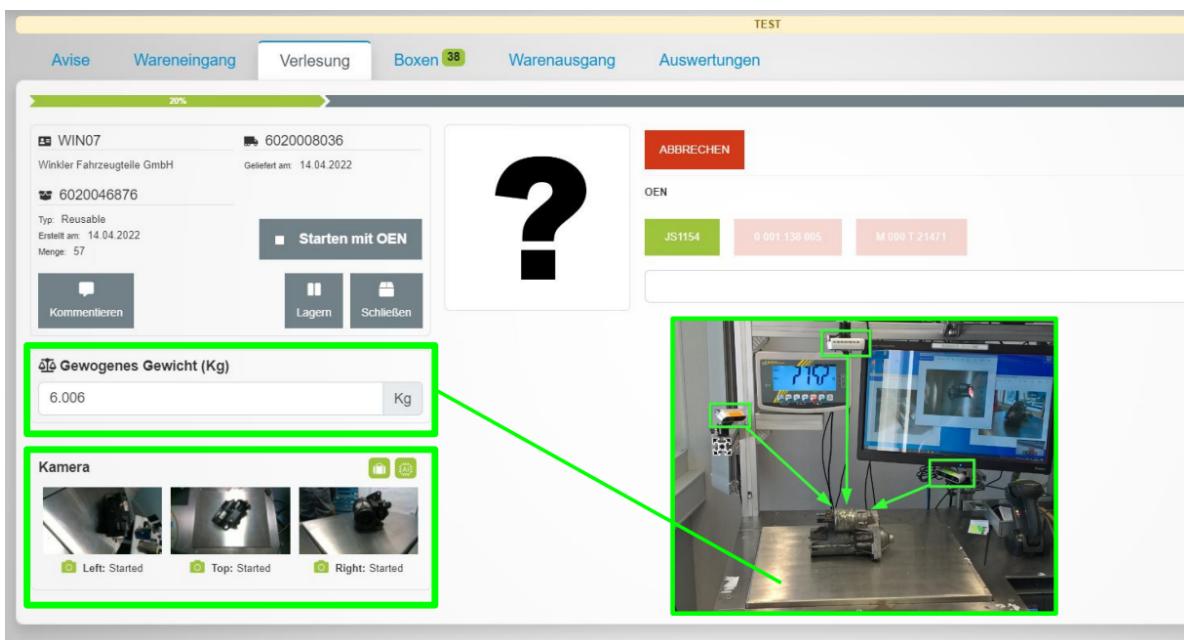


Abbildung 2.10: Die Mensch-Maschine-Schnittstelle des EIBA-Systems (Wagner, 2022).

(RGB-D) und eine Waage zur Erfassung des Gewichts zum Einsatz. In Abbildung 2.10 ist die Mensch-Maschine-Schnittstelle einer mobilen Teststation des Systems dargestellt.

Das System konnte am Beispiel von gebrauchten Fahrzeugteilen bereits eine gute Accuracy erreichen. Die Beschaffung einer ausreichenden Menge an Beispielbildern—sowohl für das Training als auch für die Validierung—meist jedoch äußerst schwierig. Dadurch werden die Objektklassen nicht mit ausreichend Variation repräsentiert, was die Generalisierungsfähigkeit der Modelle beeinträchtigen könnte.

2.4.1 Herausforderungen bei der Generierung synthetischer Daten

Um die Datenvielfalt zu erhöhen, bietet sich die Generierung von synthetischen Daten an. Dabei steht vor allem die Darstellung unterschiedlicher Gebrauchszustände im Vordergrund, die in der Realität nur schwer zu beschaffen sind. In Abschnitt 2.2 wurden bereits verschiedene Methoden zur Bildgenerierung vorgestellt, die sich für diesen Zweck eignen. Dabei ergeben sich jedoch eine Reihe von Herausforderungen, die bereits in der Einleitung angesprochen wurden.

Der Anwendungsfall zeichnet sich durch folgende Eigenschaften aus, die die Generierung synthetischer Daten erschweren:

1. Die Objekte weisen teilweise eine sehr hohe Komplexität auf, etwa bei Motoren oder Generatoren mit vielen Details.
2. Es gibt oft nur feine Unterschiede zwischen den Klassen, die es zu berücksichtigen gilt.
3. Die Bilder haben nur wenig Variation, vor allem in den Hintergründen. Auch die Objekte selbst sind zwar aus verschiedenen Perspektiven aufgenommen, bieten aber pro Klasse nicht viel Variation.

Dies führt bei der Verwendung herkömmlicher Methoden zur synthetischen Datengenerierung zu Problemen. Einerseits scheitern viele dieser Methoden bei der Generierung komplexer Konzepte (Lu et al., 2024), was aufgrund der feinen Unterschiede zwischen den Klassen besonders problematisch ist. Auch die Verwendung von „Off-the-shelf“-Modellen zur T2I-Generierung sind deshalb oft nicht in der Lage spezifische Konzepte eines Anwendungsfalls akkurat wiederzugeben (Fan et al., 2023). Wenn synthetische Daten mit mangelhafter Qualität auf naive Weise in das Training integriert werden, kann sich dann die Leistung der Modelle verschlechtern (van Breugel et al., 2023).

Es ergeben sich also hohe Anforderungen. Einerseits muss die Genauigkeit der generierten Daten gewährleistet sein, um die Klassifikation der Modelle nicht zu beeinträchtigen. Andererseits muss genügend Variation ermöglicht werden, um die Generalisierungsfähigkeit der Modelle zu verbessern.

DA-Fusion soll deshalb in dieser Arbeit als Methode zur Generierung synthetischer Daten untersucht werden. Sie bietet womöglich eine Lösung für die genannten Probleme, indem die Bilder nicht von Grund auf neu generiert werden, sondern die Struktur der echten Daten beibehalten. Dadurch könnte die Genauigkeit der generierten Daten erhöht und gleichzeitig die Variation der Daten verbessert werden.

2.4.2 Synthetische Daten als negativ-Beispiele im Contrastive Learning

Neben der Generierung von synthetischen Daten stellt sich die Frage, wie diese effektiv in das Training von Modellen integriert werden können.

Mit Blick auf die Herausforderungen bei der Generierung synthetischer Daten, zusammen mit den Besonderheiten des Contrastive Learning, ergibt sich eine interessante Forschungslücke: Ist es möglich, auch aus *mangelhaften* synthetischen Daten zu lernen, wenn sie ausschließlich als negativ-Beispiele im Contrastive Learning verwendet werden? Lässt sich so die Leistung eines Modells bei der Klassifikation von echten Daten verbessern und gleichzeitig die Robustheit gegenüber OOD-Daten erhöhen?

Bisherige Ansätze im Contrastive Learning, wie etwa (Khosla et al., 2021), haben sich weitgehend auf reale Daten als negative Beispiele verlassen. Die Idee, synthetische Daten gezielt als negativ-Beispiele zu nutzen, stellt einen neuen Ansatz dar. Dies könnte besonders dann interessant sein, wenn die generierten OOD-Daten visuell ähnlich zu den ID-Daten sind. Solche Near OOD-Daten könnten für die ID-Daten eine ähnliche Funktion wie Hard Negatives erfüllen und gleichzeitig die Fehlklassifikation von OOD-Daten reduzieren.

Die bisherigen Erfolge von Contrastive Learning, insbesondere von SimCLR, zeigen, dass das Modell von Hard Negatives besonders stark profitiert (Chen et al., 2020). Auch (Jiang et al., 2024) baut auf dieser Erkenntnis auf und führt eine Strategie zum Hard Negative Sampling im Supervised Contrastive Learning ein—jedoch ohne Verwendung von synthetischen Daten.

Es gilt also zu untersuchen, ob ein Modell durch den Einsatz von synthetischen negativ-Beispielen, die mittels Diffusionsmodellen oder ähnlichen Techniken generiert wurden, seine Fähigkeit zur Generalisierung verbessern kann. Insbesondere stellt sich die Frage, ob diese synthetischen Daten die Robustheit gegenüber echten OOD-Daten erhöhen können.

2.4.3 Integration von DA-Fusion und Supervised Contrastive Learning

Im Rahmen dieser Arbeit wird ein Ansatz vorgestellt, bei dem synthetische Augmentationen, die mit DA-Fusion generiert wurden, gezielt in das Supervised Contrastive Learning eingebunden werden. Die Grundidee besteht darin, sowohl ID-Daten (In-Distribution) als auch Near OOD-Daten (Near Out-of-Distribution) durch eine kontrollierte Anpassung der Augmentationsstärke zu erzeugen. Die Near OOD-Daten werden dabei im Contrastive Learning als Hard Negatives verwendet, um die Repräsentationen des Modells zu verbessern.

Wie bereits erwähnt, ist DA-Fusion für die Generierung von Augmentationen vielversprechend. Durch die Erhöhung des Parameters für die Augmentationsstärke können zunehmend variierende Beispiele generiert werden. Für die ID-Daten wird eine moderate Augmentationsstärke verwendet. Demgegenüber werden die Near OOD-Daten durch eine stärkere Augmentation erzeugt, wobei noch ausreichend Ähnlichkeit zu den ID-Daten bestehen bleibt, um als Hard Negative zu gelten.

Im Kontext des Supervised Contrastive Learning wird eine eigene Sampling-Strategie für Near OOD-Daten entwickelt. Diese Daten werden nicht wahllos als negativ-Beispiele verwendet, sondern gezielt aus den Augmentationen derselben Klasse des Ankerbeispiels ausgewählt. Dies stellt sicher, dass die negativen Beispiele in den gleichen semantischen Raum fallen, aber durch die Augmentationen genug variieren, um als OOD-Daten zu gelten. Die Idee ist, dass so feinere Unterschiede innerhalb und außerhalb der Klasse gelernt werden, wodurch die Generalisierungsfähigkeit gegenüber realen Daten verbessert wird.

Die Formulierung der Verlustfunktion aus dem Supervised Contrastive Learning in Gleichung 2.14 wird entsprechend der Verwendung von Near OOD-Daten in Gleichung 2.15 leicht angepasst.

$$Loss = - \sum_{i=1}^N \log \left(\frac{1}{|\mathcal{P}(i)|} \sum_{p \in \mathcal{P}(i)} \frac{\exp(s_{i,p}/\tau)}{\sum_{j \in \mathcal{J}(i)} \exp(s_{i,j}/\tau)} \right), \quad (2.15)$$

wobei $\mathcal{J}(i)$ die negativ-Beispiele für das Ankerbeispiel i sind (ID und OOD), welche gefiltert wurden, um von den OOD-Augmentationen nur solche zu verwenden, die aus der Klasse des Ankerbeispiels generiert wurden und somit als Near OOD gelten.

3 Methodisches Vorgehen

In diesem Kapitel wird das methodische Vorgehen der Arbeit beschrieben. Als Basis für die Untersuchung der Forschungsfragen wird zunächst der MVIP-Datensatz vorgestellt, auf dem die Experimente durchgeführt werden. Anschließend wird die Implementierung der Modelle DA-Fusion und Supervised Contrastive Learning erläutert. Schließlich wird der Versuchsaufbau für die Generierung der synthetischer Daten mit DA-Fusion und die Trainings- und Testdurchläufe mit Supervised Contrastive Learning beschrieben.

3.1 MVIP-Datensatz

Grundlage der Forschungsarbeit ist der im Rahmen des EIBA-Projekts entstandene MVIP-Datensatz (Koch et al., 2023), wobei MVIP für *Multi-View Industrial Parts* steht. Er enthält 308 Klassen, welche wiederum in 18 verschiedene Oberklassen (Super Classes) eingeteilt sind. Insgesamt gibt es etwa 71.276 Sets an Bildern, die jeweils RGB- und Tiefendaten, sowie Segmentierungsmasken enthalten. Die Bilddaten stammen aus Intel RealSense D435 und D415 Tiefenkameras, die die Objekte gleichzeitig aus verschiedenen Perspektiven aufnehmen.

Darüber hinaus gibt es auch Metadaten, etwa zum Gewicht des Objekts, oder Beschreibungen in natürlicher Sprache durch verschiedene Stichwörter (z.B. „Used“, „Rusty“, usw.).

3.1.1 Teildatensatz

Da relativ viele Trainings- und Testdurchläufe vorgesehen waren, war es notwendig, einen Teildatensatz auszuwählen, um die Rechenzeit zu reduzieren.

Konkret wurden 20 Klassen aus der Oberklasse „CarComponent“ ausgewählt, da diese Objekte wie Motoren und Generatoren enthält, welche von den in Unterabschnitt 2.4.1 beschriebenen Herausforderungen besonders betroffen sind. Insgesamt enthält der Teildatensatz 2390 Trainingsbilder und 1000 Validierungsbilder. Darüber hinaus kamen die Segmentierungsmasken in der Vorverarbeitung zum Einsatz, die im nachfolgenden Abschnitt behandelt wird.



Abbildung 3.1: Beispielbilder aus dem MVIP-Datensatz, die auf die Region of Interest (ROI) zugeschnitten wurden (Koch et al., 2023).

3.1.2 Vorverarbeitung

Die Vorverarbeitung der Bilder unterscheidet sich nur leicht zwischen dem Fine-tuning der Text-Embeddings für DA-Fusion und den Trainings- und Testdurchläufen mit Supervised Contrastive Learning. In beiden Fällen wurden die Bilder auf die Region of Interest (ROI) zugeschnitten (siehe Abbildung 3.1), um mehr Fokus auf die Objekte zu legen und den Hintergrund zu minimieren. Für den MVIP-Datensatz war dies besonders wichtig, da alle Objekte in einer kaum variierenden Laborumgebung aufgenommen wurden, und weil einige der Objekte einen kleineren Anteil des Bildes einnehmen als andere.

Für den ROI-Crop wurden die Segmentierungsmasken verwendet, um die Bounding Box der Objekte zu bestimmen und die Bilder entsprechend zuzuschneiden. Die Ausgabe ist ein quadratisches Bild, das die Objekte in der Mitte enthält. Die Implementierung wird in Abschnitt 3.2 genauer erläutert.

Zusätzlich wurden verschiedene „klassische“ Augmentationen angewendet, um die Daten zu erweitern und die Modelle robuster zu machen. Dazu gehören z.B. Rotation, ColorJitter und Normalisierung. Die Parameter für die Augmentationen wurden eher konservativ gewählt, um die feinen Unterschiede zwischen den Klassen nicht zu verwischen.

3.2 Implementierung

Zur Vorbereitung der Experimente mussten zunächst die Implementierungen der Modelle DA-Fusion und Supervised Contrastive Learning aufgesetzt werden. Dabei stützt sich diese Arbeit im Wesentlichen auf die Implementierungen von DA-Fusion aus (Trabucco, 2024) und Supervised Contrastive Learning aus (Tian, 2023).

Es wurde seitens des Fraunhofer-IPK ein Zugang zu einem leistungsstarken Rechner bereitgestellt, der über zwei NVIDIA-Grafikkarten mit CUDA-Unterstützung¹ verfügt. Die Implementierung der Modelle und Experimente erfolgte in Python 3.7 unter Verwendung der Bibliotheken PyTorch 1.12.1, Torchvision 0.13.1 und weitere.

Die grundlegende Funktionsweise dieser Implementierungen sowie die Anpassungen, die im Rahmen des untersuchten Ansatzes vorgenommen wurden, sollen nun näher erläutert werden.

3.2.1 DA-Fusion

Die Implementierung von DA-Fusion kann weitgehend unverändert angewendet werden, um synthetische Daten für den MVIP-Teildatensatz zu generieren. Allerdings musste dieser zunächst als eigene Klasse mit den Methoden `get_image_by_idx(idx)` und `get_label_by_idx(idx)` unter `semantic_aug/datasets/mvip.py` implementiert werden. Insbesondere musste die Auswahl der 20 „CarComponent“ Klassen sichergestellt werden, wofür die JSON-Dateien der Objekt-Metadaten ausgelesen werden (siehe Anhang .1, Codeblock 1).

Um das Fine-tuning eines vortrainierten Stable Diffusion-Modells mittels Textual Inversion durchzuführen, muss das Skript `fine_tune_upstream.py` mit den entsprechenden Argumenten zur Wahl des Datensatzes und der Hyperparameter aufgerufen werden. Das Argument `examples_per_class` bestimmt dabei die Anzahl der verwendeten Beispielbilder pro Klasse.

Während des Trainings werden die Bilder zusammen mit Text-Prompts, welche das zu trainierende Text-Embedding enthalten, zur Textual Inversion verwendet. Die Text-Prompts wurden zuvor in einer Liste definiert. Für die Experimente wurde die Liste leicht angepasst, vor allem um weniger angemessene Formulierungen wie "a rendering of a {}" und "a photo of a cool {}" zu entfernen. Das Symbol {} wird durch das Text-Embedding der Klasse ersetzt.

Es werden außerdem mit der Funktion `log_validation` Validierungsbilder zur visuellen Inspektion generiert, welche den Prompt "a photo of a {}" verwenden, der als Argument übergeben wird. Diese Bilder werden von Grund auf neu generiert und sind deshalb nicht mit den späteren Augmentationen vergleichbar, bieten aber eine Möglichkeit, den Verlauf des Trainings zu überwachen.

Die gelernten Text-Embeddings werden in .bin-Dateien gespeichert und anschließend mit dem Skript `aggregate_embeddings.py` in ein klassenagnostisches Template zusammengengeführt, das im nachfolgenden Schritt verwendet wird.

¹Compute Unified Device Architecture, eine API-Technologie von NVIDIA für parallele Berechnungen auf Grafikkarten

Zur Generierung der Augmentationen wird schließlich das Skript `generate_augmentations.py` ausgeführt. Ähnlich wie bei der Textual Inversion wird den Bildern Rauschen hinzugefügt, bevor sie unter Konditionierung auf den gelernten Text-Embeddings rekonstruiert werden, wobei hier eine Stable Diffusion Image-to-Image-Pipeline verwendet wird. Der genaue Prompt kann als Argument übergeben werden, wobei auch hier "a photo of a {}" als Standardwert verwendet wird. Um mehr Variation in der Augmentation zu erhalten, wurden hier unterschiedliche Prompts definiert, wie "a photo of a rusty {}" und "a photo of a dirty {}". Mit dem Argument `num_synthetic` kann die Anzahl der generierten Bilder pro Klasse festgelegt werden. Das `strength`-Argument entscheidet, wie viel Rauschen hinzugefügt wird und an welchen Zeitschritt t das Bild integriert werden soll, wodurch mehr oder weniger stark veränderte Bilder entstehen. Schließlich kann mit dem `guidance_scale`-Argument die Stärke der Text-Konditionierung festgelegt werden.

3.2.2 Supervised Contrastive Learning

Die Implementierung von Supervised Contrastive Learning verwendet zwei Trainings-Skripte; eins für das Contrastive Pre-Training der latenten Repräsentationen und eins für die lineare Klassifikation der Repräsentationen.

Zunächst wurde die Klasse für den MVIP-Teildatensatz, die für die Implementierung von DA-Fusion verwendet wurde, größtenteils kopiert und in die Trainingsskripte integriert. Sie musste nun allerdings um einige Parameter und Funktionen erweitert werden, um die Verwendung der synthetischen Augmentationen aus DA-Fusion zu konfigurieren. So steuert der Parameter `aug_mode`, ob keine Augmentationen, ausschließlich ID-Augmentationen oder auch die Near OOD-Augmentationen verwendet werden sollen. Je nachdem, welche Einstellung gewählt wird, werden die entsprechenden Augmentationen direkt in die Trainingsdaten gemischt.

Entscheidend ist, dass die Klassenlabels der Near OOD-Augmentation auf den negativen Wert der ursprünglichen Klasse (vor Augmentation) gesetzt werden, sodass diese Augmentationen später als Hard Negatives identifiziert werden können. Außerdem wurde mit den Parametern `aug_ex_id` und `aug_ex_ood` eine Einstellung für die Anzahl der verwendeten ID- und OOD-Augmentationen pro Klasse implementiert. Über `aug_dir_id` und `aug_dir_ood` werden die Pfade zu den entsprechenden Augmentationen angegeben. Die Funktion zum Laden der Augmentationen ist in Anhang .1, Codeblock 2 aufgeführt.

Das Pre-Training der latenten Repräsentationen erfolgt mit dem Skript `main_supcon.py`. Das Modell wird mit einem ResNet-Backbone (CNN) und einem Projection Head initialisiert. Im Training generiert es die latenten Repräsentationen der Bilder, die dann zusammen mit den Labels in die kontrastive Verlustfunktion gegeben werden, welche im Skript `losses.py` implementiert ist (siehe Anhang .1, Codeblock 3). Diese berechnet zunächst eine kontrastive Maske, die die

positiven und negativen Paare definiert. Anschließend werden die Kosinus-Ähnlichkeiten der Paare berechnet und die durchschnittliche negative Log-Wahrscheinlichkeit der positiven Paare als Verlust zurückgegeben.

Für die Verwendung von Near OOD-Daten als negativ-Beispiele war die Anpassung dieser Verlustfunktion entscheidend: Zunächst wird die kontrastive Maske so gefiltert, dass keine positiven Paare mit OOD-Daten entstehen, indem diese durch ihre negativen Klassenlabels identifiziert werden. Nachdem dann die Ähnlichkeitswerte berechnet wurden, werden diese nochmals maskiert, sodass aus den negativen Paaren mit OOD-Daten nur solche übrig bleiben, bei denen die OOD-Augmentation aus der selben Klasse generiert wurde, wie das ID-Bild. Die Verlustfunktion wird dann nur auf diese Paare angewendet.

Das trainierte Modell, welches im Verlauf des Pre-Trainings gespeichert wird, kann anschließend mit dem Skript `main_linear.py` für die lineare Klassifikation verwendet werden. Dabei wird das Modell mit einem neuen Head initialisiert, der die latenten Repräsentationen in die Klassenlabels überführt. Das Training erfolgt dann mit einer klassischen Cross Entropy-Verlustfunktion, die die Repräsentationen auf die Klassen abbildet.

Als Metriken wurden ursprünglich nur der Loss und die Accuracy ausgegeben, welche jeweils über eine Epoche gemittelt werden. Zusätzlich wurden im Rahmen dieser Arbeit die ID- und OOD-Confidence als Metriken implementiert (siehe Unterabschnitt 3.3.3). Dazu wird eine zusätzliche Validierungsepoche durchlaufen, welche ausschließlich die OOD-Augmentationen verwendet. Die Softmax-Wahrscheinlichkeiten der Vorhersagen werden dann getrennt für die ID- und OOD-Daten gemittelt und ausgegeben.

3.3 Versuchsaufbau

Die Untersuchung der Forschungsfragen erfolgte in zwei Schritten: Zunächst wurden synthetische Daten mit DA-Fusion generiert. Anschließend wurden die synthetischen Daten in den Trainings- und Testdurchläufen mit Supervised Contrastive Learning verwendet, um die Auswirkungen der Augmentationen auf die Klassifikation zu evaluieren. Der allgemeine Versuchsaufbau ist in Abbildung 3.2 dargestellt. In den folgenden Abschnitten werden die durchgeführten Versuche im Detail beschrieben.

3.3.1 Synthetische Datengenerierung

Es wurden mit DA-Fusion zwei unterschiedliche Sätze von Augmentationen generiert: die In-Distribution-Augmentationen und die Near Out-of-Distribution-Augmentationen.

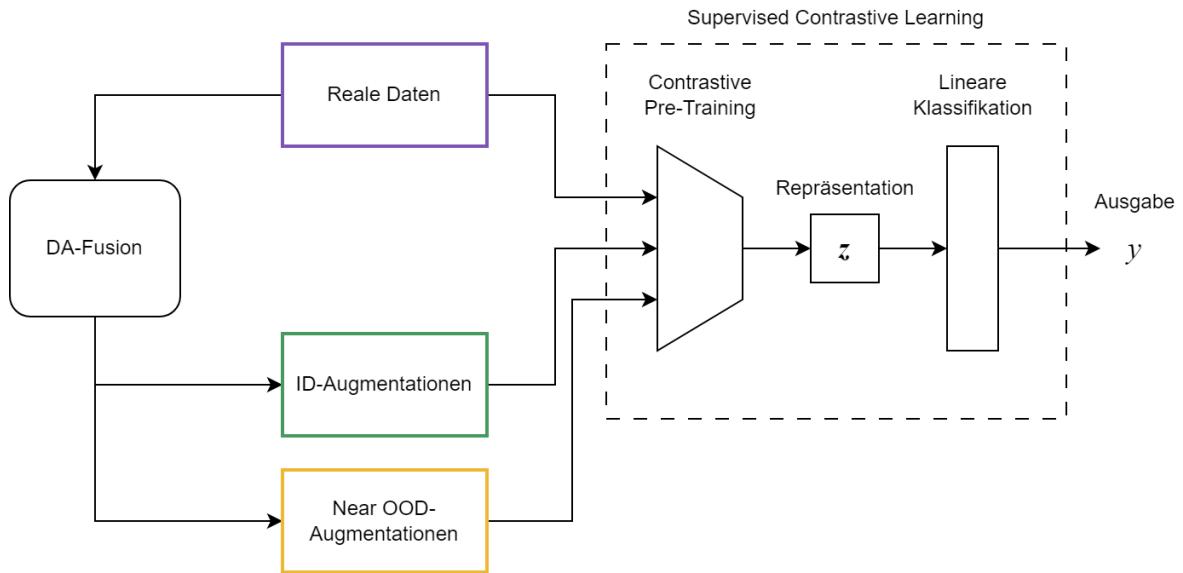


Abbildung 3.2: Übersicht des Versuchsaufbaus für die Generierung der synthetischen Daten mit DA-Fusion und die Trainings- und Testdurchläufe mit Supervised Contrastive Learning.

Für beide Sätze wurde als vortrainiertes Modell `CompVis/stable-diffusion-v1-4`² ausgewählt. Es wurden 32 Beispielbilder pro Klasse für das Training ausgewählt. Die Klassen wurden alle mit dem Token `<motor>` initialisiert. Dabei wurden über das Argument `num_vectors` 16 Textual Inversion Vektoren pro Text-Embedding verwendet. Das Finetuning erfolgte mit einer Bildgröße von 512x512 Pixeln, einer Batch Size von 16, einer Lernrate von 0.0005 und einer konstanten Lernrate mit Warmup über 150 Schritte. Es wurde Mixed Precision mit FP16 verwendet und das Training wurde nach 1000 Schritten beendet. Die erlernten Text-Embeddings wurden für beide Sätze verwendet, um die Augmentationen zu generieren.

Die Generierung erfolgte mit einer Guidance Scale von 15. Es wurden 16 Beispiele pro Klasse zur Augmentation herangezogen und für jedes Beispiel vier synthetische Bilder generiert. Die Segmentierungsmasken wurden verwendet, um die Augmentation nur auf den Bereich des Objekts zu begrenzen. Die ID- und Near OOD-Augmentationen unterscheiden sich nur durch den strength-Parameter, wobei für die ID-Augmentationen ein Wert von **0.2** und für die Near OOD-Augmentationen ein Wert von **0.5** verwendet wurde.

3.3.2 Trainings- und Testdurchläufe

Die Trainings- und Testdurchläufe mit Supervised Contrastive Learning sind in drei Versuchsreihen unterteilt. In jedem Versuch wird zunächst das Pre-Training der latenten Reprä-

²<https://huggingface.co/CompVis/stable-diffusion-v1-4>

sentationen durchgeführt, gefolgt von der linearen Klassifikation der Repräsentationen. Die Versuchsreihen unterscheiden sich in der Verwendung der synthetischen Augmentationen:

- *Versuch 1*: Nur reale Daten werden verwendet, sowohl für das Pre-Training als auch für das Training des Klassifikators.
- *Versuch 2*: Neben den realen Daten werden auch ID-Augmentationen verwendet, sowohl für das Pre-Training als auch für das Training des Klassifikators.
- *Versuch 3*: Wie Versuch 2, aber im Pre-Training werden zusätzlich Near OOD-Augmentationen verwendet, wie in Unterabschnitt 2.4.3 beschrieben.

Für das Pre-Training wurde eine Batch Size von 16, eine Lernrate von 0.001 mit Kosinus-Annealing und einer Dauer von 110 Epochen verwendet. Die Bilddaten wurden im Rahmen der herkömmlichen Augmentation, welche die zwei Ansichten eines Beispiels erzeugt, auf eine Größe von 224x224 Pixeln zugeschnitten und normalisiert.

Bei der linearen Klassifikation sind die Hyperparameter identisch, jedoch mit einer Dauer von nur 25 Epochen. Nach jeder Trainingsepoke werden die Modelle für eine Validierungsepoke auf den (echten) Testdaten evaluiert.

3.3.3 Evaluationsmethoden und Metriken

Die drei Versuchsreihen werden ausgewertet, indem folgende Metriken beim Test der linearen Klassifikation auf den Testdaten gemessen werden:

- *Top-1 Accuracy*: Der Anteil der korrekt klassifizierten Bilder. Top-1 bedeutet, dass das Modell die Klasse mit der höchsten Wahrscheinlichkeit als Vorhersage ausgibt.
- *ID-Confidence*: Die durchschnittliche Konfidenz des Klassifikators auf den ID-Daten. Die Konfidenz ist die Wahrscheinlichkeit, die der Klassifikator für die Vorhersage der korrekten Klasse ausgibt.
- *OOD-Confidence*: Die durchschnittliche Konfidenz des Klassifikators auf den OOD-Daten.

Vor der Auswertung der Versuchsreihen wurde eine menschliche Evaluierung der synthetischen Daten durchgeführt. Dabei wurde bewertet, ob die Objekte in den Bildern in ihrer Form und Struktur unverändert bleiben, während die Farben und Texturen variieren können und sollen. Bei den OOD-Augmentationen wurde darauf geachtet, dass die Objekte so stark verändert werden, dass eine Klassifizierung in die ursprüngliche Objektklasse als fehlerhaft angesehen wird. Gleichzeitig sollten die OOD-Beispiele noch genug Ähnlichkeit aufweisen, um herausfordernde negative Beispiele zu sein.

4 Ergebnisse

Dieses Kapitel präsentiert die Ergebnisse der Arbeit. Es wird auf die generierten synthetischen Daten eingegangen und die Trainings- und Testergebnisse der Modelle beschrieben. Anschließend wird die Klassifikations-Performance der Modelle verglichen und die Out-of-Distribution-Detektion analysiert.

4.1 Die generierten synthetischen Daten

Im Rahmen der Untersuchung wurden sowohl In-Distribution als auch Near Out-of-Distribution-Augmentationen mit DA-Fusion generiert. Dieser Abschnitt bewertet die Qualität dieser Augmentationen und untersucht sowohl positive als auch negative Beispiele. Es wird insbesondere auf die visuelle Überzeugungskraft, die semantische Konsistenz und mögliche Artefakte eingegangen, die während des Generierungsprozesses aufgetreten sind.

4.1.1 In-Distribution-Augmentationen

Die synthetischen In-Distribution-Daten, die durch DA-Fusion generiert wurden, zeigten überwiegend eine hohe Qualität. Einige Beispiele sind in Anhang .2, Abbildung 1 und 2 zu sehen.

Die Bilder wirken zum größten Teil überzeugend und realistisch. Die Unterschiede sind auf den ersten Blick sehr subtil, vor allem, wenn die Bilder Seite an Seite betrachtet werden. Dennoch sind Veränderungen in der Textur der Oberflächen erkennbar, etwa unterschiedliche Verteilungen von Rost und Verschmutzung.

Insgesamt ist durch rein visuelle Inspektion also keine auffällige Veränderung in der Beschaffenheit oder des Gebrauchszustands der Objekte zu erkennen. Trotzdem werden diese Zustände in einer breiteren Palette von Variationen dargestellt.

In einigen Fällen sind die Ergebnisse jedoch weniger überzeugend. In Anhang .2, Abbildung 3 sind Beispiele für mangelhafte In-Distribution-Daten zu sehen. Die synthetischen Objekte sind in diesen Fällen nicht realistisch und weisen deutliche Artefakte auf. Oftmals hängt

die Qualität der Daten mit Größe des Objektes im Originalbild zusammen (was auch die Auflösung des ROI-Crops entscheidet). Bei kleineren Objekten fällt die Augmentation relativ gesehen stärker aus, was zu einer stärkeren Verzerrung führen kann.

Insgesamt lässt sich feststellen, dass die Mehrheit der ID-Augmentationen als realistisch wahrgenommen werden und die Variation erhöhen.

4.1.2 Near Out-of-Distribution-Augmentationen

Die Near Out-of-Distribution-Augmentationen zeigten im Vergleich zu den ID-Daten eine gemischtere Qualität. Beispiele sind in Anhang .2, Abbildung 4 zu sehen.

Die meisten Objekte wirken etwas weniger realistisch, aber dennoch plausibel. Vor allem ist hier der Einfluss der unterschiedlichen Text-Prompts zur Augmentation deutlicher erkennbar, wodurch die Objekte in mit mehr Variation in den Gebrauchszuständen dargestellt werden.

Allerdings gibt es hier deutlich mehr Beispiele, die weniger überzeugend sind (siehe Anhang .2, Abbildung 5). Die synthetischen Objekte weisen in diesen Fällen deutliche Artefakte auf oder sind vollständig vom ursprünglichen Konzept entkoppelt.

Zusammenfassend ist die Qualität der OOD-Augmentationen also weniger konsistent als die der ID-Augmentationen. Die Variationen sind zwar größer, aber auch die Qualitätsschwankungen sind stärker.

4.2 Trainings- und Testergebnisse

Nachfolgend werden die Ergebnisse der Trainings- und Testdurchläufe im Supervised Contrastive Learning beschrieben. Die Betrachtung umfasst die Trainingskurven, den Verlauf des Validierungsfehlers sowie die finale Leistung der Modelle auf den Validierungsdaten. Besondere Aufmerksamkeit liegt auf der Evaluation der Klassifikationsgenauigkeit (Accuracy) und der Fähigkeit, OOD-Daten zu erkennen.

4.2.1 Contrastive Pre-Training

Die Trainingskurven des Contrastive Pre-Trainings sind in Abbildung 4.1 dargestellt. Die Trainings- und Validierungsfehler zeigen insgesamt eine gute Konvergenz, wobei zu erkennen ist, dass der Validierungsfehler im Vergleich zum Trainingsfehler etwas höher und weniger stabil ist, was auf ein gewisses Overfitting des Modells auf die Trainingsdaten hindeuten könnte.

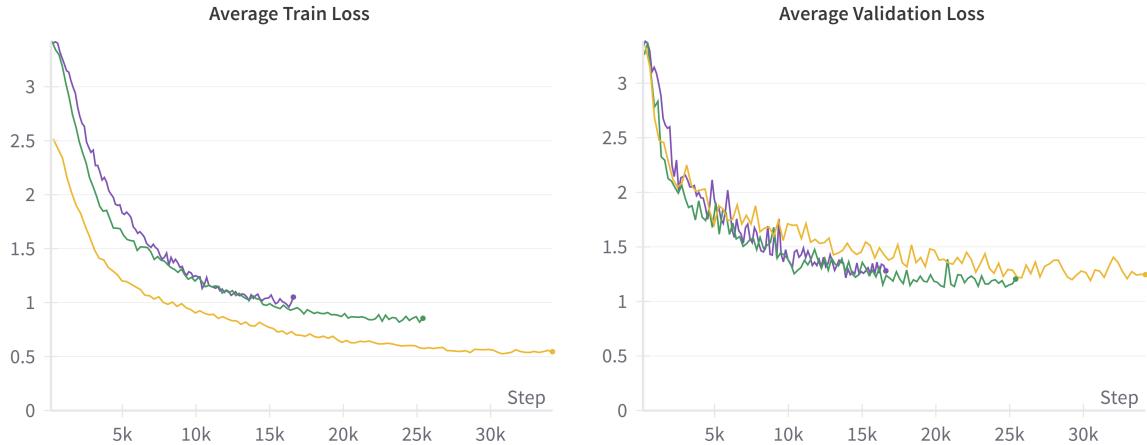


Abbildung 4.1: Trainings- und Validierungsfehler während des Contrastive Pre-Trainings
 (Lila: Versuch 1, Grün: Versuch 2, Gelb: Versuch 3).

Beim Vergleich der Versuche fällt auf, dass die Trainings- und Validierungsfehler in Versuch 2 nahezu identisch mit denen in Versuch 1 verlaufen. Durch die zusätzlichen Augmentationen läuft das Training in Versuch 2 jedoch ein wenig länger, sodass die Performance sich weiter verbessert.

Versuch 3 zeigt auf den Trainingsdaten einen insgesamt signifikant niedrigeren Fehler, während der Fehler auf den Validierungsdaten bis zum Ende des Trainings etwas höher ist als bei den anderen Versuchen, trotz der längsten Trainingsdauer.

4.2.2 Lineare Klassifikation

Die lineare Klassifikation der im vorherigen Schritt erlernten Repräsentationen zeigt ebenfalls interessante Trends. In Tabelle 4.1 sind die finalen Testergebnisse auf den Validierungsdaten zusammengefasst, während die Trainingskurven in Abbildung 4.2 (Fehler), Abbildung 4.3 (Top-1 Accuracy) und Abbildung 4.4 (ID- und OOD-Confidence) zu sehen sind.

Tabelle 4.1: Die finalen Testergebnisse der linearen Klassifikation auf den Validierungsdaten.

Versuch	Top-1 Accuracy	ID-/OOD-Confidence (Δ)
1	71.4%	0.69 / 0.62 (0.07)
2	77.5%	0.76 / 0.65 (0.11)
3	75.3%	0.40 / 0.35 (0.05)

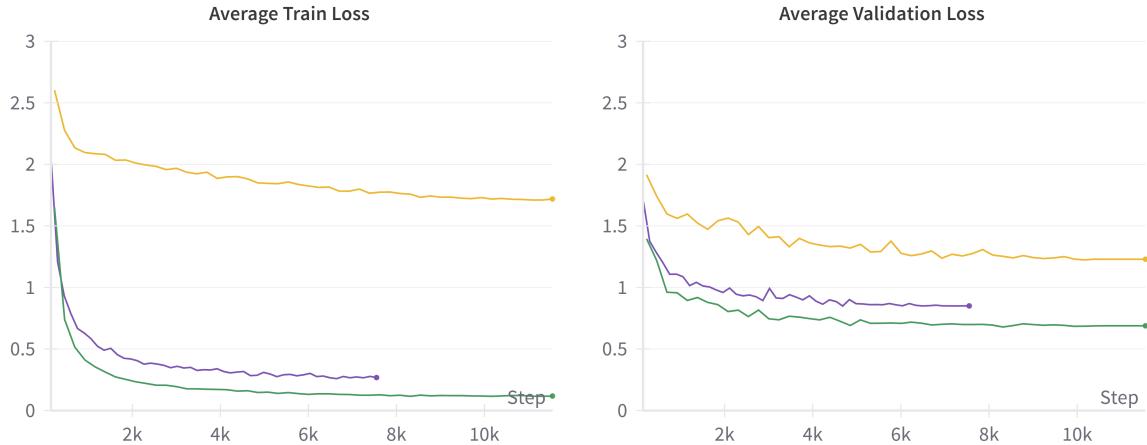


Abbildung 4.2: Trainings- und Validierungsfehler der linearen Klassifikation (**Lila**: Versuch 1, **Grün**: Versuch 2, **Gelb**: Versuch 3).

Die Trainingskurven zeigen sehr geringe Trainingsfehler für Versuche 1 und 2, aber einen viel höheren Fehler bei Versuch 3. Die Validierungsfehler der Versuche nähern sich wieder etwas an, wobei weiterhin ein deutlicher Abstand zwischen Versuch 3 und den anderen Versuchen besteht. Während der Validierungsfehler bei den Versuchen 1 und 2 also höher ist als der Trainingsfehler, ist es bei Versuch 3 umgekehrt.

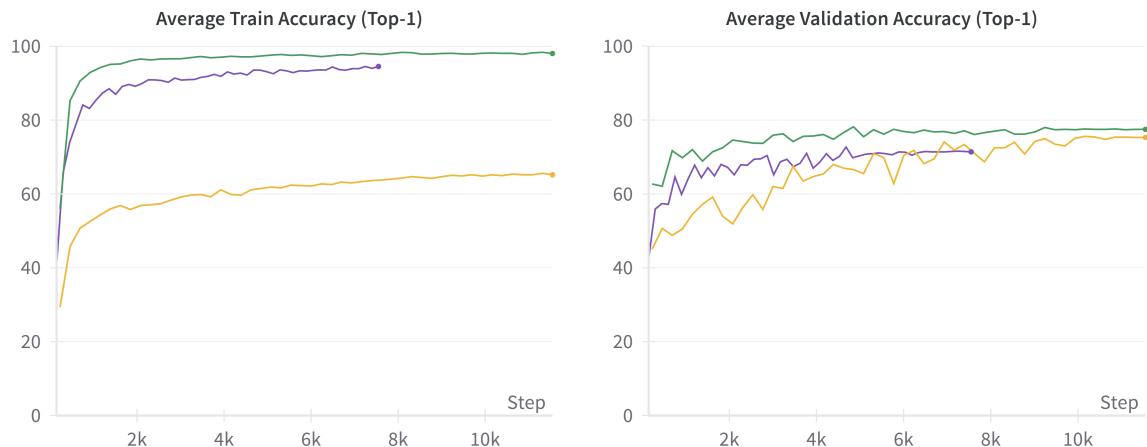


Abbildung 4.3: Trainings- und Validierungs-Accuracy während der linearen Klassifikation (**Lila**: Versuch 1, **Grün**: Versuch 2, **Gelb**: Versuch 3).

Ähnliches kann in Bezug auf die Top-1 Accuracy beobachtet werden. Die Trainings-Accuracy ist bei Versuch 3 deutlich niedriger als bei den anderen Versuchen, während die Validierungs-Accuracy ein ähnlich hohes Niveau erreicht. Interessanterweise zeigt sich, dass die schnelle Konvergenz des Trainingsfehlers bzw. der Trainings-Accuracy in Versuchen 1 und 2 das

Lernen in gewisser Weise ausbremst, wodurch auf den Validierungsdaten wenig Verbesserung erzielt wird. In Versuch 3 hingegen scheint das Modell auf den Trainingsdaten nicht so schnell zu konvergieren, wodurch die Validierungs-Accuracy stetiger steigt.

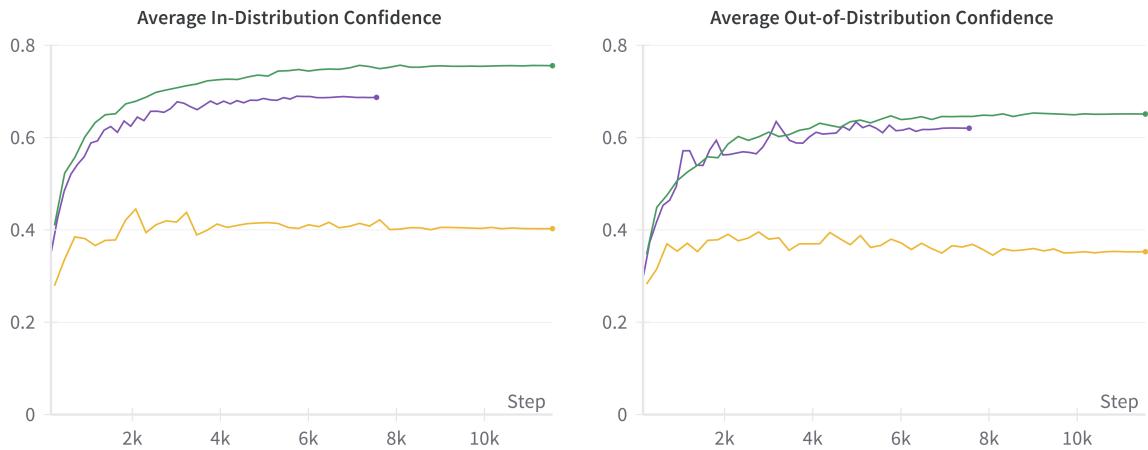


Abbildung 4.4: ID- und OOD-Confidence während der linearen Klassifikation (Lila: Versuch 1, Grün: Versuch 2, Gelb: Versuch 3).

Die ID-Confidence ist bei Versuch 2 deutlich höher als bei Versuch 1, während die OOD-Confidence bei beiden Versuchen vergleichbar bleibt. Versuch 3 zeigt jedoch die niedrigsten Confidence-Werte, sowohl für ID als auch für OOD, und hat auch den niedrigsten Abstand zwischen den beiden Werten. In der Trainingskurve ist dabei kaum Konvergenz zu erkennen.

4.3 Vergleich der Ergebnisse

Als Grundlage für die Diskussion und Beantwortung der Forschungsfragen werden die finalen Ergebnisse nach Durchlaufs des Trainings noch einmal gegenübergestellt. Es werden konkret die Messungen mit und ohne In-Distribution-Augmentationen (im Bezug auf die erste Forschungsfrage) bzw. mit und ohne Near Out-of-Distribution-Augmentationen (im Bezug auf die zweite Forschungsfrage) verglichen. Dabei wird auf die Klassifikations-Performance (Accuracy) und die Out-of-Distribution-Detektion (ID-/OOD-Confidence) eingegangen.

4.3.1 Mit und ohne In-Distribution-Augmentationen

In Bezug auf die erste Forschungsfrage werden Versuche 1 und 2 verglichen. In Versuch 1 wurden sowohl Contrastive Pre-Training als auch lineare Klassifikation ohne jegliche

Augmentationen durchgeführt, während in Versuch 2 in beiden Schritten In-Distribution-Augmentationen verwendet wurden.

Die Einführung der In-Distribution-Augmentationen hatte insgesamt einen positiven Effekt auf die Klassifikations-Performance der Modelle. Die Top-1 Accuracy konnte von 71.4% auf 77.5% gesteigert werden, was eine signifikante Verbesserung darstellt. Die ID-Confidence stieg von 0.69 auf 0.76, während die OOD-Confidence von 0.62 auf 0.65 anstieg. Der Abstand zwischen ID- und OOD-Confidence erhöhte sich von 0.07 auf 0.11, was effektiv eine Verbesserung der OOD-Detektion darstellt.

4.3.2 Mit und ohne Near Out-of-Distribution-Augmentationen

In Bezug auf die zweite Forschungsfrage werden Versuche 2 und 3 verglichen. In Versuch 2 wurde sowohl das Contrastive Pre-Training als auch die lineare Klassifikation mit In-Distribution-Augmentationen durchgeführt. In Versuch 3 wurden im Pre-Training der Repräsentationen zusätzlich Near Out-of-Distribution-Augmentationen verwendet.

Die Klassifikations-Performance der Modelle verschlechterte sich durch die Near Out-of-Distribution-Augmentationen. Die Top-1 Accuracy sank von 77.5% auf 75.3% und die ID-Confidence fiel drastisch von 0.76 auf 0.40. Die OOD-Confidence fiel ebenfalls von 0.65 auf 0.35, dabei wurde der Abstand zwischen ID- und OOD-Confidence aber von 0.11 auf 0.05 verringert, was eine Verschlechterung der OOD-Detektion bedeutet.

5 Diskussion

In diesem Kapitel werden die Ergebnisse dieser Arbeit interpretiert und im Kontext der Forschungsfragen diskutiert. Dabei wird auf die Eignung von DA-Fusion zur Generierung synthetischer Daten sowie auf die Wirksamkeit von Near Out-of-Distribution-Augmentationen im Supervised Contrastive Learning eingegangen.

5.1 Eignung von DA-Fusion für die synthetische Datengenerierung

Die synthetische Datengenerierung mit DA-Fusion zeigt sich als vielversprechender Ansatz. Die erzeugten Augmentationen wiesen überwiegend eine hohe visuelle Qualität auf. DA-Fusion war in der Lage, die Variation innerhalb der Daten zu erhöhen, ohne dabei die akkurate Darstellung der komplexen Gebrauchsstände zu opfern. An dieser Stelle scheitern viele der herkömmlichen Methoden zur synthetischen Datengenerierung, was für vergleichbare Anwendungsfälle in der industriellen Bildverarbeitung ein Hindernis ist, da sie oft durch ähnlich komplexe und spezifische Objektklassen ausgezeichnet sind. Da vortrainierte generative Modelle meist nicht genügend Vorwissen über diese spezifischen Objektklassen besitzen (Fan et al., 2023) und meist auch nur wenige Beispiele zum Fine-tuning dieser Modelle zur Verfügung stehen, ist es schwierig, realistische Daten zu generieren.

Herkömmliche Datenaugmentationsmethoden wie Rotation, Skalierung oder Farbveränderungen bieten hingegen nicht ausreichend Variation auf semantischer Ebene, um die Generalisierungsfähigkeit von Modellen zu verbessern. DA-Fusion zeigte hier die Fähigkeit, den Zustand von Objekten (z. B. Abnutzung, Verschmutzung oder Schäden) auf realistische und semantisch sinnvolle Art und Weise zu augmentieren. Es ist daher anzunehmen, dass sich diese Fähigkeit auch auf andere Anwendungsfälle übertragen lässt, bei denen die Variation auf semantischer Ebene entscheidend ist. Der einstellbare Grad der Variation ermöglicht es außerdem, je nach Komplexität des Anwendungsfalls eine Einstellung zu wählen, die den Anforderungen entspricht.

Eine quantitative Analyse der Ergebnisse zeigt ebenfalls, dass DA-Fusion zu einer signifikanten Verbesserung der Modellleistung beitragen kann. Die Steigerung der Top-1-Accuracy

von 71.4% auf 77.5% verdeutlicht, dass die synthetischen Daten einen positiven Effekt auf die Generalisierungsfähigkeit des Modells haben. Auffällig ist auch die Vergrößerung des Abstands zwischen den Confidence-Werten für In-Distribution (ID) und Out-of-Distribution (OOD) Daten von 0.07 auf 0.11. Diese Verbesserung deutet darauf hin, dass das Modell durch die Verwendung synthetischer Daten in der Lage war, robustere Repräsentationen zu lernen, die eine klarere Trennung zwischen verschiedenen Klassen ermöglichen.

Um den Effekt der synthetischen Daten auf den Repräsentationsraum des Modells tiefer zu verstehen, wäre eine Visualisierung mittels Techniken wie t-SNE (van der Maaten & Hinton, 2008) oder UMAP (McInnes et al., 2020) ein interessanter nächster Schritt. Solche Visualisierungen bieten eine niedrigdimensionale Darstellung des Repräsentationsraums, die es ermöglicht, die Verteilung der Klassen zu analysieren. Insbesondere könnten sie aufzeigen, inwieweit die synthetischen Daten den Abstand zwischen den Klassen im Repräsentationsraum vergrößert haben.

Des Weiteren wäre eine visuelle Auswertung durch Saliency Maps, wie in (Sammani et al., 2023), interessant. So könnte untersucht werden, ob durch die Augmentationen weniger Fokus auf die Textur der Objekte gelegt wird und stattdessen mehr auf die Form und Struktur, was für den vorgestellten Anwendungsfall besonders relevant ist.

Trotz der positiven Ergebnisse muss beachtet werden, dass die verwendeten Validierungsbilder die selben Laborbedingungen abbilden wie die Trainingsbilder. Es bleibt somit die Frage offen, wie gut das Modell auf neue, reale Szenarien generalisieren würde. In realen Anwendungen könnten Faktoren wie Beleuchtungsbedingungen, Kamerawinkel oder andere äußere Einflüsse dazu führen, dass die synthetischen Daten nicht in gleichem Maße zur Generalisierung beitragen wie unter den hier getesteten Bedingungen.

Ein Nachteil von DA-Fusion ist der Rechen- und Zeitaufwand, der sich aus dem Fine-tuning des Stable Diffusion-Modells mit neuen Text-Embeddings für jede Klasse ergibt. Dabei ist auch die Anpassung der Hyperparameter nicht trivial und erfordert eine sorgfältige Abstimmung, was den Einsatz von DA-Fusion in groß angelegten Anwendungsfällen erschwert.

Zusammenfassend lässt sich feststellen, dass DA-Fusion eine vielversprechende Methode zur Generierung synthetischer Daten ist. Es bietet nicht nur eine realistische Darstellung von Gebrauchszuständen, sondern kann auch gezielt auf die Anforderungen des jeweiligen Anwendungsfalls abgestimmt werden. Allerdings ist der Rechenaufwand und die Abstimmung des Fine-Tunings nicht zu unterschätzen, und zukünftige Arbeiten könnten sich darauf konzentrieren, hier effizientere Verfahren anzuwenden.

Eine mögliche Weiterentwicklung für die Datenaugmentaion mit DA-Fusion in Bezug auf den untersuchten Anwendungsfall wäre die Begrenzung der Augmentation auf bestimmte Regionen des Objektes. Während in den durchgeführten Experimenten bereits Segmentierungsmasken verwendet wurden, um die Bilder auf das Objekt zu beschränken, könnten

weitere, kleinere Masken verwendet werden, um nur bestimmte Bereiche des Objektes zu augmentieren. Womöglich könnten so auch stärkere Augmentationen durchgeführt werden, ohne die gesamte Struktur des Objektes zu verändern.

Es eröffnet sich außerdem eine spannende Forschungslücke durch die Anwendung von DA-Fusion im Contrastive Learning. DA-Fusion wurde primär als Methode zur Datenaugmentation entwickelt. Es wäre deshalb interessant zu untersuchen, wie sich das Lernen der Repräsentationen verhält, wenn DA-Fusion direkt zur Generierung der zwei unterschiedlichen Ansichten eines Bildes verwendet wird, anstatt die generierten Augmentationen mit den originalen Trainingsbildern zu mischen.

5.2 Wirksamkeit von Near Out-of-Distribution-Augmentationen im Supervised Contrastive Learning

Während die ID-Augmentationen eine Verbesserung der Klassifikationsleistung bewirkten, zeigte sich ein gegenteiliger Effekt bei den Near OOD-Augmentationen. Die Top-1 Accuracy sank von 77.5% auf 75.3%, und auch die Confidence-Werte (ID und OOD) verschlechterten sich signifikant.

Die Ergebnisse könnten auf mehrere Faktoren zurückzuführen sein: 1) die Qualität der synthetisch erzeugten OOD-Daten, 2) die Komprimierung der Repräsentationen der ID-Daten, und 3) die Sampling-Strategie für die Near OOD-Augmentationen im Supervised Contrastive Learning.

Ein wesentlicher Faktor, der zu den schlechteren Ergebnissen beigetragen haben könnte, ist die Qualität der synthetisch erzeugten Near OOD-Daten. Es zeigte sich, dass viele der erzeugten OOD-Daten Artefakte aufwiesen oder keinerlei Verbindung mehr vom ursprünglichen Konzept der Klasse hatten. In diesen Fällen fielen die synthetischen Daten nicht mehr in die Kategorie „Near OOD“, sondern waren zu weit von den ID-Daten entfernt, um als sinnvolle Hard Negatives zu fungieren. Diese Diskrepanz führte dazu, dass das Modell die Near OOD-Daten möglicherweise als einfach zu unterscheidende OOD-Daten interpretierte, anstatt feinere Unterschiede zwischen ID-Klassen zu lernen.

Die Verwendung dieser ungenauen OOD-Daten könnte außerdem die Repräsentationen der ID-Daten negativ beeinflusst haben. Falls das Modell nur zwischen ID und OOD-Daten unterscheidet, könnte das dazu führen, dass die Repräsentationen der ID-Daten „in die Mitte“ des Repräsentationsraums komprimiert werden. Das würde es für das Modell schwieriger

machen, zwischen den Klassen zu unterscheiden. Auch hier würde eine Visualisierung des Repräsentationsraums helfen, um solche Verzerrungen zu erkennen.

Schließlich könnte auch die Sampling-Strategie für die Near OOD-Augmentationen und dessen Implementierung im Supervised Contrastive Learning eine Rolle gespielt haben. Die richtige Anpassung des Trainingsablaufs und der Verlustfunktion, um Near OOD-Daten als Hard Negatives zu nutzen, erwies sich als komplex. Im gewählten Ansatz wurden sowohl ID- als auch OOD-Augmentationen unter die normalen Trainingsbilder gemischt. Die Maskierung der kontrastiven Paare stellte zwar sicher, dass nur die ID-Augmentationen als positiv-Beispiele und die Near OOD-Augmentationen als negativ-Beispiele verwendet wurden, jedoch unterschied sich somit auch die effektive Anzahl der verwendeten Paare für jedes Batch. Das liegt daran, dass für jedes Ankerbeispiel nur bestimmte OOD-Beispiele als Hard Negatives ausgewählt wurden. Dies könnte zu einer Verzerrung der Loss-Funktion geführt haben und sich auf unerwünschte Weise auf das Training ausgewirkt haben.

Um die Wirksamkeit von Near OOD-Augmentationen zu verbessern, könnten verschiedene Ansätze verfolgt werden. Zunächst sollte die Qualität der synthetisch erzeugten OOD-Daten optimiert werden, indem beispielsweise andere Augmentationsstärken ausprobiert werden. Auch das Fine-tuning der Text-Embeddings, aus denen sowohl die ID- als auch die OOD-Daten generiert werden, könnte mit einer anderen Methode als Textual Inversion durchgeführt werden. Womöglich könnte ein besseres Lernen der Konzepte zu Augmentationen führen, die näher an den ID-Daten liegen und insgesamt realistischer sind.

Zum anderen könnte die Implementierung der Near OOD-Augmentationen im Supervised Contrastive Learning überdacht werden. Eine Möglichkeit wäre eine Sampling-Strategie für Hard Negatives wie in (Jiang et al., 2024), bei der nur negativ-Beispiele aus einer gewissen Nähe im Repräsentationsraum ausgewählt werden. Das könnte allerdings auch dazu führen, dass die OOD-Daten gar nicht mehr ausgewählt werden, wenn sie zu weit von den ID-Daten entfernt sind.

Zusammenfassend lässt sich feststellen, dass die Near OOD-Augmentationen im Supervised Contrastive Learning nicht die erwarteten Verbesserungen gebracht haben. Die Ergebnisse zeigen, dass sowohl die Qualität der synthetischen OOD-Daten als auch die Implementierung der Near OOD-Augmentationen überdacht und optimiert werden müssen. Besonders die Generierung von semantisch näheren OOD-Daten und die Vermeidung von Verzerrungen im Repräsentationsraum der ID-Daten könnten entscheidend sein. Die grundsätzliche Frage, ob auch mangelhafte synthetische Daten dazu beitragen können, dass die Repräsentation von ID-Daten verbessert wird, bleibt vorerst offen.

6 Fazit

Eine Vielzahl von Entwicklungen im Bereich des Maschinellen Lernens, vor allem in Bezug auf generative Modelle, haben zu neuen Möglichkeiten in der synthetischen Datengenerierung geführt. Diese Arbeit untersuchte die Eignung von Diffusionsmodellen, insbesondere DA-Fusion, in Kombination mit Supervised Contrastive Learning zur Verbesserung der Bildklassifikation. Ziel war es, einen Ansatz zu finden, der die Herausforderung der synthetischen Datengenerierung für komplexe Objekte mit feinen Unterschieden adressiert.

6.1 Zusammenfassung der wichtigsten Erkenntnisse

Die durchgeführten Experimente zeigten, dass DA-Fusion bei der Generierung von ID-Augmentationen deutliche Verbesserungen der Modellleistung erzielte. Durch die Erzeugung synthetischer Gebrauchsstände und die Erhöhung der Variabilität innerhalb der Daten konnte die Top-1-Accuracy um etwa 6 Prozentpunkte gesteigert werden, was auf eine bessere Generalisierungsfähigkeit des Modells hindeutet.

Allerdings traten Schwierigkeiten auf, als Near OOD-Augmentationen als negativ-Beispiele genutzt wurden. Statt der erwarteten Leistungssteigerung verschlechterte sich die Top-1-Accuracy, was auf mehrere Faktoren zurückzuführen ist, darunter die Qualität der generierten OOD-Daten und die Komplexität der Implementierung der Sampling-Strategie im Supervised Contrastive Learning. Viele der synthetischen Near OOD-Daten wiesen Artefakte auf oder entfernten sich zu weit von den ID-Daten, sodass sie keine geeigneten negativ-Beispiele mehr darstellten.

6.2 Beantwortung der Forschungsfragen

Die erste Forschungsfrage befasste sich mit der Frage, ob DA-Fusion zur Generierung synthetischer Daten geeignet ist und wie sich diese Daten auf die Generalisierungsfähigkeit des Modells auswirken. Die Experimente zeigten, dass DA-Fusion erfolgreich ID-Augmentationen

generieren kann, die die Generalisierungsfähigkeit verbessern. Diese Augmentationen ermöglichen eine größere Variabilität innerhalb der Daten und stärkten die Robustheit des Modells gegenüber feinen Unterschieden in den Klassen.

Die zweite Forschungsfrage beschäftigte sich damit, ob Near OOD-Augmentationen im Supervised Contrastive Learning als Hard Negatives dienen können. Hier konnte die erwartete Leistungssteigerung nicht bestätigt werden. Stattdessen führte der Einsatz von Near OOD-Daten zu einer Verschlechterung der Modellleistung. Dies lag vermutlich an der geringen Qualität der generierten OOD-Daten, die oft zu weit von den ID-Daten entfernt waren. Sie fungierten nicht mehr als semantisch nahe negative Beispiele, was den Lernprozess im SCL negativ beeinflusste.

6.3 Ausblick und potenzielle Weiterentwicklungen

Die Ergebnisse dieser Arbeit eröffnen mehrere potenzielle Ansätze für zukünftige Forschung. Ein Schwerpunkt sollte auf der Verbesserung der generierten OOD-Daten liegen, um nicht zu weit von den ID-Daten abzuweichen und tatsächlich herausfordernde negativ-Beispiele zu bieten. Hier könnten alternative Techniken zum Fine-tuning des in DA-Fusion verwendeten Stable Diffusion-Modells verwendet werden.

Darüber hinaus könnte die Implementierung von Near OOD-Daten als Hard Negatives im Supervised Contrastive Learning weiter optimiert werden. Dabei könnten fortgeschrittenere Sampling-Strategien entwickelt werden.

Auch die Forschung zur Frage, wie Modelle aus minderwertigen synthetischen Daten lernen können, könnte weiter vertieft werden. Hier könnten neue Ansätze untersucht werden, um die Robustheit von Modellen gegenüber Artefakten oder fehlerhaften Daten zu erhöhen.

Schließlich bietet die Verwendung von DA-Fusion zur Darstellung unterschiedlicher Gebrauchsstände von Objekten viele Möglichkeiten zur Weiterentwicklung, etwa durch Begrenzung der zu augmentierenden Bildregion auf einen Teil der Objekte.

Literatur

- Burgmer, C. (2005, Juli). *Schema eines künstlichen Neurons* [Lizenziert unter der Creative Commons Attribution-Share Alike 3.0 Unported Lizenz: <https://creativecommons.org/licenses/by-sa/3.0/deed.en>. Editierte Beschriftung.]. <https://commons.wikimedia.org/wiki/File:ArtificialNeuronModel.png>
- Chen, T., Kornblith, S., Norouzi, M., & Hinton, G. (2020). A Simple Framework for Contrastive Learning of Visual Representations.
- Cun, Y. L., Boser, B., Denker, J. S., Howard, R. E., Hubbard, W., Jackel, L. D., & Henderson, D. (1989). Handwritten digit recognition with a back-propagation network. In *Advances in Neural Information Processing Systems 2* (S. 396–404). Morgan Kaufmann Publishers Inc.
- Fan, L., Chen, K., Krishnan, D., Katahi, D., Isola, P., & Tian, Y. (2023). Scaling Laws of Synthetic Images for Model Training ... for Now. <https://arxiv.org/abs/2312.04567>
- Foster, D. (2020). *Generatives Deep Learning*. O'Reilly.
- Gal, R., Alaluf, Y., Atzmon, Y., Patashnik, O., Bermano, A. H., Chechik, G., & Cohen-Or, D. (2022). An Image is Worth One Word: Personalizing Text-to-Image Generation using Textual Inversion. <https://arxiv.org/abs/2208.01618>
- Goodfellow, I., Bengio, Y., & Courville, A. (2016). *Deep Learning*. MIT Press. <http://www.deeplearningbook.org>
- Goodfellow, I., Pouget-Abadie, J., Mirza, M., Xu, B., Warde-Farley, D., Ozair, S., Courville, A., & Bengio, Y. (2014). Generative Adversarial Networks. <https://arxiv.org/abs/1406.2661>
- Google for Developers. (2022). *Overview of GAN Structure* [Lizenziert unter der Creative Commons Attribution 4.0 Lizenz: <https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>]. https://developers.google.com/machine-learning/gan/gan_structure
- Hendrycks, D., & Gimpel, K. (2018). A Baseline for Detecting Misclassified and Out-of-Distribution Examples in Neural Networks. <https://arxiv.org/abs/1610.02136>
- Hinton, G. E., & Salakhutdinov, R. R. (2006). Reducing the Dimensionality of Data with Neural Networks. *Science*, 313(5786), 504–507. <https://doi.org/10.1126/science.1127647>
- Jiang, R., Nguyen, T., Ishwar, P., & Aeron, S. (2024). Supervised Contrastive Learning with Hard Negative Samples. <https://arxiv.org/abs/2209.00078>
- Keshtmand, N., Santos-Rodriguez, R., & Lawry, J. (2022). Understanding the properties and limitations of contrastive learning for Out-of-Distribution detection.

- Khosla, P., Teterwak, P., Wang, C., Sarna, A., Tian, Y., Isola, P., Maschinot, A., Liu, C., & Krishnan, D. (2021). Supervised Contrastive Learning.
- Kingma, D. P., & Welling, M. (2013). Auto-Encoding Variational Bayes. <https://arxiv.org/abs/1312.6114>
- Koch, P., Schlüter, M., Briese, C., & Chavan, V. (2023, November). MVIP: A Dataset for Industrial Part Recognition. <https://doi.org/http://dx.doi.org/10.24406/fordatis/300>
- Kraljevski, I., Ju, Y. C., Ivanov, D., Tschöpe, C., & Wolff, M. (2023). How to Do Machine Learning with Small Data? – A Review from an Industrial Perspective. <https://arxiv.org/abs/2311.07126>
- Liu, R. (2021). Understand and Improve Contrastive Learning Methods for Visual Representation: A Review. <https://arxiv.org/abs/2106.03259>
- Lu, Y., Shen, M., Wang, H., Wang, X., van Rechem, C., Fu, T., & Wei, W. (2024). Machine Learning for Synthetic Data Generation: A Review. <https://arxiv.org/abs/2302.04062>
- McCulloch, W. S., & Pitts, W. (1943). A logical calculus of the ideas immanent in nervous activity. *The bulletin of mathematical biophysics*, 5(4), 115–133. <https://doi.org/10.1007/BF02478259>
- McInnes, L., Healy, J., & Melville, J. (2020). UMAP: Uniform Manifold Approximation and Projection for Dimension Reduction. <https://arxiv.org/abs/1802.03426>
- Meng, C., He, Y., Song, Y., Song, J., Wu, J., Zhu, J.-Y., & Ermon, S. (2022). SDEdit: Guided Image Synthesis and Editing with Stochastic Differential Equations. <https://arxiv.org/abs/2108.01073>
- Mitchell, T. M. (1997). *Machine Learning*. McGraw Hill.
- Radford, A., Kim, J. W., Hallacy, C., Ramesh, A., Goh, G., Agarwal, S., Sastry, G., Askell, A., Mishkin, P., Clark, J., Krueger, G., & Sutskever, I. (2021). Learning Transferable Visual Models From Natural Language Supervision. <https://arxiv.org/abs/2103.00020>
- Ramesh, A., Dhariwal, P., Nichol, A., Chu, C., & Chen, M. (2022). Hierarchical Text-Conditional Image Generation with CLIP Latents. <https://arxiv.org/abs/2204.06125>
- Rombach, R., Blattmann, A., Lorenz, D., Esser, P., & Ommer, B. (2022). High-Resolution Image Synthesis with Latent Diffusion Models. <https://arxiv.org/abs/2112.10752>
- Rumelhart, D. E., Hinton, G. E., & Williams, R. J. (1986). Learning representations by back-propagating errors. *Nature*, 323(6088), 533–536. <https://doi.org/10.1038/323533a0>
- Saha, S. (2018). *A Comprehensive Guide to Convolutional Neural Networks - the ELI5 way* [Aufgerufen: 17.09.2024]. <https://towardsdatascience.com/a-comprehensive-guide-to-convolutional-neural-networks-the-eli5-way-3bd2b1164a53>
- Sammani, F., Joukovsky, B., & Deligiannis, N. (2023). Visualizing and Understanding Contrastive Learning. <https://arxiv.org/abs/2206.09753>
- Shen, B. (2021). E-commerce Customer Segmentation via Unsupervised Machine Learning. *The 2nd International Conference on Computing and Data Science*. <https://doi.org/10.1145/3448734.3450775>

- Shorten, C., & Khoshgoftaar, T. (2019). A survey on Image Data Augmentation for Deep Learning. *Journal of Big Data*, 6. <https://doi.org/10.1186/s40537-019-0197-0>
- Sohl-Dickstein, J., Weiss, E. A., Maheswaranathan, N., & Ganguli, S. (2015). Deep Unsupervised Learning using Nonequilibrium Thermodynamics. <https://arxiv.org/abs/1503.03585>
- Tian, Y. (2023). *SupContrast* [GitHub Repository]. <https://github.com/HobbitLong/SupContrast>
- Tian, Y., Sun, C., Poole, B., Krishnan, D., Schmid, C., & Isola, P. (2020). What Makes for Good Views for Contrastive Learning? <https://arxiv.org/abs/2005.10243>
- Trabucco, B. (2024). *DA-Fusion* [GitHub Repository]. <https://github.com/brandontrabucco/da-fusion>
- Trabucco, B., Doherty, K., Gurinas, M., & Salakhutdinov, R. (2023). Effective Data Augmentation With Diffusion Models. <https://arxiv.org/abs/2302.07944>
- van Breugel, B., Qian, Z., & van der Schaar, M. (2023). Synthetic data, real errors: how (not) to publish and use synthetic data. <https://arxiv.org/abs/2305.09235>
- van der Maaten, L., & Hinton, G. (2008). Visualizing Data using t-SNE. *Journal of Machine Learning Research*, 9(86), 2579–2605. <http://jmlr.org/papers/v9/vandermaaten08a.html>
- Vaswani, A., Shazeer, N., Parmar, N., Uszkoreit, J., Jones, L., Gomez, A. N., Kaiser, L., & Polosukhin, I. (2017). Attention Is All You Need. <https://arxiv.org/abs/1706.03762>
- Wagner, M. (2022, Juni). *BMBF-Fördermaßnahme „Ressourceneffiziente Kreislaufwirtschaft - Innovative Produktkreisläufe (ReziProK)“* [ReziProK Transferkonferenz am 23. und 24. Juni 2022 im Tagungswerk, Berlin]. https://innovative-produktkreislaeufe.de/Projekte/EIBA/_/ReziProK_Statuskonferenz_Presentation_EIBA_2022_06_23_final.pdf
- Zhou, Z.-H. (2021). *Machine Learning*. Springer.

Anhang

.1 Implementierung

Codeblock 1: Begrenzung des Datensatzes auf die 20 „CarComponent“ Klassen in der „MVIP-Dataset“-Klasse.

```
1 # Select subset of classes from MVIP dataset
2 class_names = []
3
4 for class_name in [
5     f for f in os.listdir(MVIP_DIR) if os.path.isdir(os.path.join(MVIP_DIR, f))
6 ]:
7     meta_file = open(os.path.join(MVIP_DIR, class_name, "meta.json"))
8     meta_data = json.load(meta_file)
9
10    if SUPER_CLASS in meta_data['super_class']:
11        class_names.append(class_name)
12
13    meta_file.close()
14
15    # Limit the number of classes
16    del class_names[NUM_CLASSES:]
```

Codeblock 2: Funktion zum Laden der Augmentationen in der „MVIPDataset“-Klasse von SupCon.

```
1 def parse_augs(self, aug_type):
2     #Parse the augmentation directory and return all augmented images and labels.
3
4     if aug_type == "id":
5         aug_dir = self.aug_dir_id
6         examples_per_class = self.aug_ex_id
7         label_sign = 1
```

```

8     else: # OODs
9         aug_dir = self.aug_dir_ood
10        examples_per_class = self.aug_ex_ood
11        label_sign = -1 # OOD augmentations receive negative labels
12
13    augs = os.listdir(aug_dir)
14
15    # Shuffle before potentially limiting num of examples per class
16    shuffle_idx = np.random.permutation(len(augs))
17    augs = [os.path.join(aug_dir, augs[i]) for i in shuffle_idx]
18
19    if examples_per_class > 0:
20        del augs[examples_per_class*len(self.class_names)*4:] # num_synthetic=4
21
22    # Get labels from file names
23    labels = []
24    for class_name in self.class_names:
25        for file in augs:
26            if class_name in file:
27                labels.append(self.class_to_label_id[class_name] * label_sign)
28
29    # Return masks as None
30    masks = [None for _ in range(len(augs))]
31
32    return augs, labels, masks

```

Codeblock 3: Vollständige Klasse für die verwendete Verlustfunktion im Supervised Contrastive Learning.

```

1 class SupConLoss(nn.Module):
2     def __init__(self, temperature=0.07, contrast_mode='all',
3                  base_temperature=0.07):
4         super(SupConLoss, self).__init__()
5         self.temperature = temperature
6         self.contrast_mode = contrast_mode
7         self.base_temperature = base_temperature
8
9     def forward(self, features, labels=None, mask=None):
10        device = (torch.device('cuda')
11                  if features.is_cuda
12                  else torch.device('cpu'))

```

```

14     if len(features.shape) < 3:
15         raise ValueError(`features`_needs_to_be_[bsz, n_views, ...], '
16                         `at_least_3_dimensions_are_required')
17     if len(features.shape) > 3:
18         features = features.view(features.shape[0], features.shape[1], -1)
19
20     batch_size = features.shape[0]
21
22     # Get/calculate contrastive mask for this batch (shape=[bsz, bsz])
23     # mask[i][j]=1 if sample j has the same class as sample i, otherwise 0
24     if labels is not None and mask is not None:
25         raise ValueError('Cannot define both `labels` and `mask`')
26     elif labels is None and mask is None:
27         mask = torch.eye(batch_size, dtype=torch.float32).to(device)
28     elif labels is not None:
29         labels = labels.contiguous().view(-1, 1)
30         if labels.shape[0] != batch_size:
31             raise ValueError('Num of labels does not match num of features')
32         mask = torch.eq(labels, labels.T).float().to(device)
33     else:
34         mask = mask.float().to(device)
35     # Update mask, so that self-contrast cases aren't considered as positive pairs
36     self_contrast_mask = 1 - torch.eye(batch_size, dtype=torch.float32).to(device)
37     mask *= self_contrast_mask
38     # Also make sure there are no positive pairs with any OOD samples (negative labels)
39     ood_mask = (labels < 0).float().to(device).detach()
40     mask *= (1 - ood_mask @ ood_mask.T)
41
42     # Determine whether all views or just one of each sample will be used as anchor
43     contrast_count = features.shape[1] # n_views
44     contrast_feature = torch.cat(torch.unbind(features, dim=1), dim=0)
45     if self.contrast_mode == 'one':
46         anchor_feature = features[:, 0]
47         anchor_count = 1
48     elif self.contrast_mode == 'all': # All features used as anchor & contrast
49         anchor_feature = contrast_feature
50         anchor_count = contrast_count
51     else:
52         raise ValueError('Unknown mode: {}'.format(self.contrast_mode))
53
54     # Compute logits (similarity scores for anchor & contrast features)
55     anchor_dot_contrast = torch.div(

```

```

56     torch.matmul(anchor_feature, contrast_feature.T),
57     self.temperature)
58 # For numerical stability
59 logits_max, _ = torch.max(anchor_dot_contrast, dim=1, keepdim=True)
60 logits = anchor_dot_contrast - logits_max.detach()
61
62 # Repeat masks to match the dimensions of the logits
63 mask = mask.repeat(anchor_count, contrast_count)
64 self_contrast_mask = self_contrast_mask.repeat(anchor_count, contrast_count)
65
66 # Ignore logits for OOD samples where OOD label is not the negative anchor label
67 non_ood_mask = 1 - ood_mask
68 valid_ood_mask = (labels == -labels.T).float().to(device).detach()
69 logits *= (non_ood_mask + valid_ood_mask).repeat(anchor_count, contrast_count)
70
71 # Transform the logits into log-probabilities
72 exp_logits = torch.exp(logits) * self_contrast_mask
73 log_prob = logits - torch.log(exp_logits.sum(1, keepdim=True))
74
75 # Looking only at positive pairs, compute the mean log-probabilities for each anchor
76 mask_pos_pairs = mask.sum(1)
77 mask_pos_pairs = torch.where(mask_pos_pairs < 1e-6, 1, mask_pos_pairs)
78 mean_log_prob_pos = (mask * log_prob).sum(1) / mask_pos_pairs
79
80 # Final loss: average negative log-probabilities over all positive pairs
81 loss = - (self.temperature / self.base_temperature) * mean_log_prob_pos
82 loss = loss.view(anchor_count, batch_size).mean()
83
84 del self_contrast_mask, ood_mask, non_ood_mask, valid_ood_mask
85
86 return loss

```

.2 Beispiele für Augmentationen



Abbildung 1: Beispiele der In-Distribution-Augmentationen.

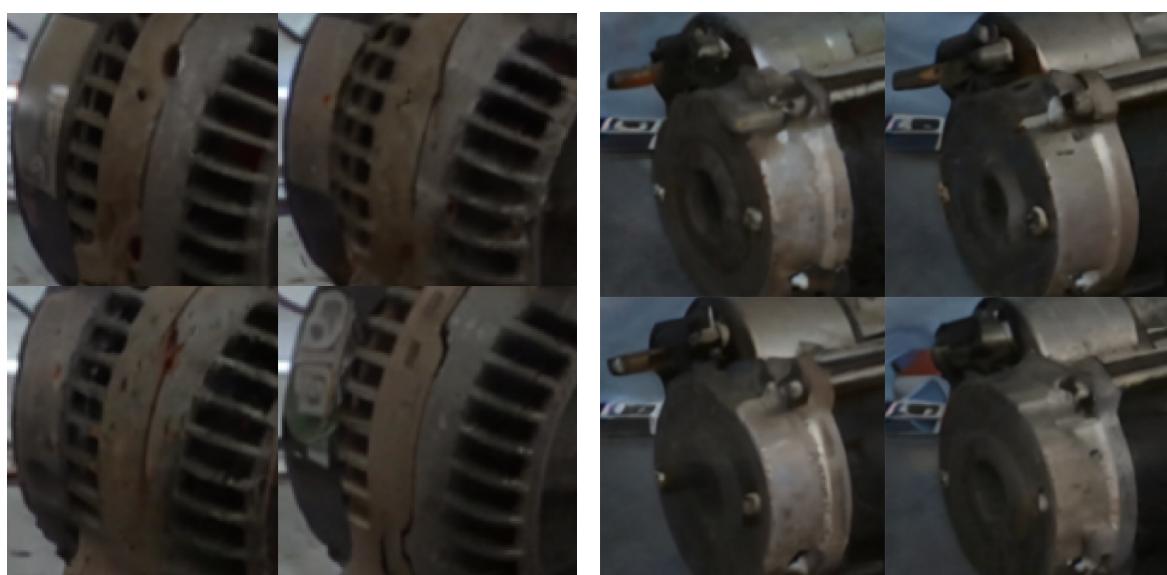


Abbildung 2: Vergrößerte Ausschnitte von einigen der In-Distribution-Augmentationen.

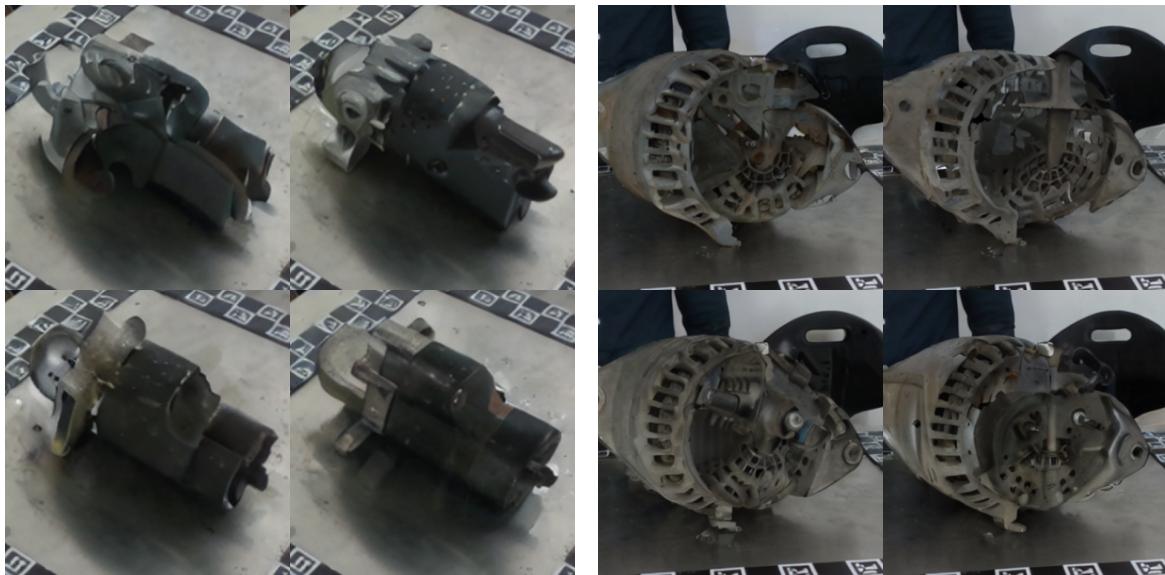


Abbildung 3: Beispiele für mangelhafte In-Distribution-Augmentationen.



Abbildung 4: Beispiele der Near Out-of-Distribution-Augmentationen.



Abbildung 5: Beispiele für mangelhafte Out-of-Distribution-Augmentationen.

Eigenständigkeitserklärung

Hiermit versichere ich, dass ich die vorliegende Bachelorarbeit mit dem Titel

Contrastive Learning mit Stable Diffusion-basierter Datenaugmentation

selbstständig und nur mit den angegebenen Hilfsmitteln verfasst habe. Alle Passagen, die ich wörtlich aus der Literatur oder aus anderen Quellen wie z. B. Internetseiten übernommen habe, habe ich deutlich als Zitat mit Angabe der Quelle kenntlich gemacht.

P. Hofmann

Hamburg, 23. September 2024