به نام خدا

درس یادگیری عمیق

تمرین سری ششم

استاد درس : دکتر محمدرضا محمدی

دستیاران : مهدی خورشا، سید محمد موسوی،
امیرحسین نمازی

دانشگاه علم و صنعت ایران، دانشکده مهندسی کامپیوتر

نیمسال دوم تحصیلی ۱۴۰۳ - ۱۴۰۴

مهلت تحویل : ۱۴۰۴/۰۳/۲۰

لطفا به نکات موجود در سند قوانین انجام و تحویل تمرین ها دقت فرمایید.

سوالات تئوری

۱.  در این درس با مدل های انتشار نویز زدایی[1] آشنا شدید.
اکنون مدل های‌امتیازی شرطی‌شده با نویز[2] را مطالعه کرده و به پرسش‌های زیر پاسخ دهید(۱۵ نمره):

(آ) روش را کوتاه توضیح داده و بگویید Langevin dynamics چیست و چه کارکردی در آن دارد؟
Langevin dynamics یک روش تکراری الهام گرفته شده از فیزیک است که می‌تواند برای نمونه‌برداری از داده‌ها استفاده شود. درواقع می‌تواند نمونه‌هایی را از توزیع p(x) تنها با استفاده از تابع امتیاز تولید کند. برای هر توزیع احتمالی p(x) ما گرادیان آن یعنی $\nabla_x \log p(x)$ را خواهیم داشت (لگاریتم برای سهولت در محاسبات است) که ما آن را score function می‌نامیم. علت اصلی این کار این است که در بسیاری از موارد، مدل کردن و تخمین score function بسیار ساده‌تر از محاسبه توزیع احتمالی اصلی خواهد بود. در این روش با استفاده از یک اندازه گام $\alpha > 0$ و تعداد تکرار مشخص T و یک نمونه اولیه x_0 از فرمول زیر به دست می‌آید (دقت

[1] DDPM
[2] NCSN

شود که x_0 می‌تواند یک نویز با توزیع نرمال باشد یا توزیع‌های پیشین در هر مرحله‌ای).

$$x_t \leftarrow x_{t-1} + \alpha \nabla_x \log p(x_{t-1}) + \sqrt{2\alpha}\, z_t, \quad 1 \le t \le T$$

نویز $z_t \sim \mathcal{N}(0, I)$ به منظور جلوگیری از حداقل‌های محلی اضافه شده است. بنابراین، یک مدل مولد می‌تواند پس از تخمین امتیاز با استفاده از یک شبکه عصبی $s_\theta(x) \approx \nabla_x \log p(x)$ از روش فوق برای نمونه‌برداری از $p(x)$ استفاده کند.

روش مقاله

این مقاله ۵ تکنیک مهم را بیان می‌کند که در ادامه به توضیح هر یک از آن‌ها می‌پردازیم.
مقیاس نویز اولیه که آن را σ_1 می‌نامیم، تا حد زیادی تنوع نمونه‌های نهایی را کنترل می‌کند. برای افزایش تنوع نمونه، ممکن است بخواهیم σ_1 را تا حد امکان بزرگ انتخاب کنیم. با این حال، اگر σ_1 بیش از حد بزرگ باشد به مقیاس‌های نویز بیشتری نیاز دارد (که در ادامه مورد بحث قرار خواهد گرفت) و این امر هزینه و زمان زیادی خواهد گرفت. برای همین ما به دنبال مقیاس نویز اولیه‌ای هستیم که این مورد را به خوبی کنترل کند. توزیع داده‌های دنیای واقعی پیچیده و تحلیل آنها دشوار است، بنابراین ما تلاش می‌کنیم تقریبی از آن به دست آوریم. فرض کنید یک دیتاست به صورت $\{x^{(1)}, x^{(2)}, \ldots, x^{(N)}\}$ داریم که هر داده از آن از توزیع $p_{\text{data}}(x)$ می‌آید. با فرض این که N به مقدار کافی بزرگ باشد، توزیع دیتاست تقریبا برابر میانگین توزیع نمونه‌ها خواهد بود. یعنی:

$$p_{\text{data}}(x) \approx \hat{p}_{\text{data}}(x) \triangleq \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} \delta\big(x = x^{(i)}\big)$$

حال اگر داده‌ها توسط یک توزیع نرمال با میانگین صفر و واریانس $\sigma_1^2 I$ یعنی $\mathcal{N}(0, \sigma_1^2 I)$ نویزی شود، توزیع تقریبی ما برابر خواهد بود با:

$$p_{\sigma_1}(x) \triangleq \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} p^{(i)}(x)$$

که در آن مقدار x تحت یک توزیع نرمال با میانگین $x^{(i)}$ و واریانس $\sigma_1^2 I$ خواهد بود. یعنی:

$$p^{(i)}(x) \triangleq \mathcal{N}(x \mid x^{(i)}, \sigma_1^2 I)$$

ما انتظار داریم که Langevin dynamics هر توزیع $p^{(i)}(x)$ را با شروع از هر $p^{(j)}(x)$ در حالی که $i \neq j$ تخمین بزند. حال با فرمول‌های گفته شده، یک $r^{(i)}(x)$ داریم که برابر است با احتمال این که نقطه x از توزیع iام آمده باشد. یعنی:

$$r^{(i)}(x) \triangleq \frac{p^{(i)}(x)}{\sum_{k=1}^{N} p^{(k)}(x)}$$

پس طبق فرمول بالا، تابع امتیاز برابر خواهد بود با:

$$\hat{p}_{\sigma_1}(x) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} p^{(i)}(x)$$

$$\nabla_x \log \hat{p}_{\sigma_1}(x) = \frac{\nabla_x \hat{p}_{\sigma_1}(x)}{\hat{p}_{\sigma_1}(x)} = \frac{1}{\hat{p}_{\sigma_1}(x)} \cdot \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} \nabla_x p^{(i)}(x)$$

$$\nabla_x \log p^{(i)}(x) = \frac{\nabla_x p^{(i)}(x)}{p^{(i)}(x)} \qquad \Rightarrow \qquad \nabla_x p^{(i)}(x) = \nabla_x \log p^{(i)}(x) \cdot p^{(i)}(x)$$

$$\nabla_x \log \hat{p}_{\sigma_1}(x) = \frac{1}{\frac{1}{N}\sum_{k=1}^{N} p^{(k)}(x)} \cdot \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} \nabla_x \log p^{(i)}(x)\, p^{(i)}(x)$$

$$= \sum_{i=1}^{N} \nabla_x \log p^{(i)}(x) \cdot \frac{p^{(i)}(x)}{\sum_{k=1}^{N} p^{(k)}(x)} = \sum_{i=1}^{N} r^{(i)}(x)\, \nabla_x \log p^{(i)}(x)$$

با فرض این که $x \in \mathbb{R}^D$ باشد، خواهیم داشت:

$$\mathbb{E}_{p^{(i)}(x)}[r^{(j)}(x)] = \int \frac{p^{(i)}(x)\, p^{(j)}(x)}{\sum_{k=1}^{N} p^{(k)}(x)}\, dx \quad \leq \quad \int \frac{p^{(i)}(x)\, p^{(j)}(x)}{p^{(i)}(x) + p^{(j)}(x)}\, dx$$

که با ساده‌سازی آن (صفحه ۱۲ مقاله) به فرمول زیر دست خواهیم یافت:

$$\mathbb{E}_{p^{(i)}(x)}[r^{(j)}(x)] \leq \tfrac{1}{2} \exp\left(-\frac{\|x^{(i)} - x^{(j)}\|_2^2}{8\sigma_1^2} \right)$$

برای این که از توزیع $p^{(j)}(x)$ به $p^{(i)}(x)$ برسیم ($i \neq j$)، باید $\mathbb{E}_{p^{(i)}(x)}[r^{(j)}(x)]$ بزرگ باشد، زیرا در غیر این صورت، گرادیان یعنی $\nabla_x \log \hat{p}_{\sigma_1}(x) = \sum_{i=1}^{N} r^{(i)}(x)\, \nabla_x \log p^{(i)}(x)$ مقدار $p^{(j)}(x)$ را نادیده می‌گیرد (در بخش ب بیشتر توضیح داده خواهد شد). فرمول بالا به ما این را می‌گوید که $\mathbb{E}_{p^{(i)}(x)}[r^{(j)}(x)]$ زمانی که $\|x^{(i)} - x^{(j)}\|_2$ نسبت به σ_1 کوچک باشد، می‌تواند به

صورت تصاعدی کاهش یابد. در نتیجه، لازم است که σ_1 از نظر عددی با حداکثر فواصل جفت به جفت داده‌ها قابل مقایسه باشد.

تکنیک شماره ۱

σ_1 را به اندازه حداکثر فاصله اقلیدسی بین همه جفت داده آموزشی انتخاب کنید. حال ما به انتخاب تعداد مقیاس نویز و میزان سطح نویز می‌پردازیم. زیرا همان‌گونه که بیان شد، ما نیاز به گرادیان‌های قابل اعتماد برای رسیدن به توزیع احتمالی مطلوب داریم. برای سادگی فرض می‌کنیم که در دیتاست تنها یک داده داریم. ما توزیع داده نویزی را یک ابر کروی گوسی در نظر می‌گیریم که در آن r و φ به ترتیب مختصات شعاعی و زاویه‌ای x را نشان می‌دهند. پس خواهیم داشت: این فرمول در واقع pdf مربع کای (Chi-squared) است که با اثبات (صفحه ۱۲ مقاله) خواهیم داشت:

$$r - \sqrt{D}\,\sigma \quad \xrightarrow{d} \quad \mathcal{N}(0, \tfrac{\sigma^2}{2}) \qquad \text{when D} \to \infty$$

پس خواهیم داشت:

$$p(r) \approx \mathcal{N}\big(r \mid \sqrt{D}\,\sigma, \tfrac{\sigma^2}{2}\big)$$

همچنین برای ساده‌سازی، یک تغییر متغیر خواهیم داشت که در آن:

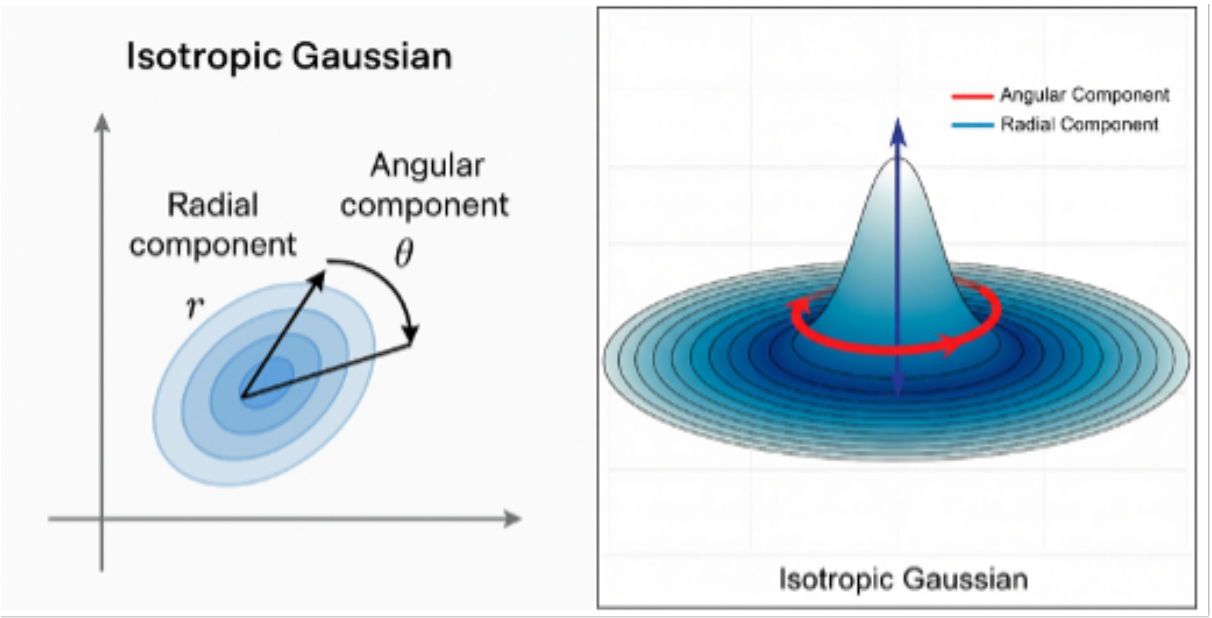
$$m_i \triangleq \sqrt{D}\,\sigma, \qquad s_i^2 \triangleq \tfrac{\sigma^2}{2}$$

پس:

$$p_{\sigma_i}(r) = \mathcal{N}(r \mid m_i, s_i^2)$$

هدف اصلی ما این است که $p_{\sigma_i}(x)$ به اندازه کافی با مناطق $p_{\sigma_{i-1}}(x)$ همپوشانی داشته باشد، زیرا به گرادیان آن نیاز داریم که به $p_{\sigma_i}(x)$ برسیم. همچنین، همان‌گونه که گفته شد، جز زاویه‌ای (angular component) یعنی $p(\varphi)$ بین تمام مقیاس‌های نویز مشترک است چون $p_{\sigma_i}(x)$ یک isotropic Gaussian است. بنابراین تنها نیاز داریم تا جز شعاعی (radial component) دارای همپوشانی باشد. حال بر اساس قانون سه سیگما (Three-sigma rule) که در تصویر ۲ مشاهده می‌کنید، $p_{\sigma_{i-1}}(x)$ دارای تراکم بالایی در بازه زیر خواهد بود:

$$[m_{i-1} - 3s_{i-1},\ m_{i-1} + 3s_{i-1}]$$



شکل ۱: جز شعاعی و زاویه‌ای در توزیع گوسی

اکنون یک مرور از چیزهایی که گفتیم و سپس نتیجه‌گیری نهایی:

(۱

$$p_{\sigma_i}(r) = \mathcal{N}(r \mid m_i, s_i^2), \quad m_i \triangleq \sqrt{D}\,\sigma, \quad s_i^2 \triangleq \frac{\sigma^2}{2}$$

(۲

$$m_{i-1} = \sqrt{D}\,\sigma_{i-1} = \sqrt{D}\,\gamma\sigma_i = \gamma m_i, \quad \gamma = \frac{\sigma_{i-1}}{\sigma_i}$$

(۳

$$s_{i-1}^2 = \frac{\sigma_{i-1}^2}{2} \quad \Rightarrow \quad s_{i-1} = \frac{\sigma_{i-1}}{\sqrt{2}} = \frac{\gamma\sigma_i}{\sqrt{2}} = \gamma s_i$$

(۴

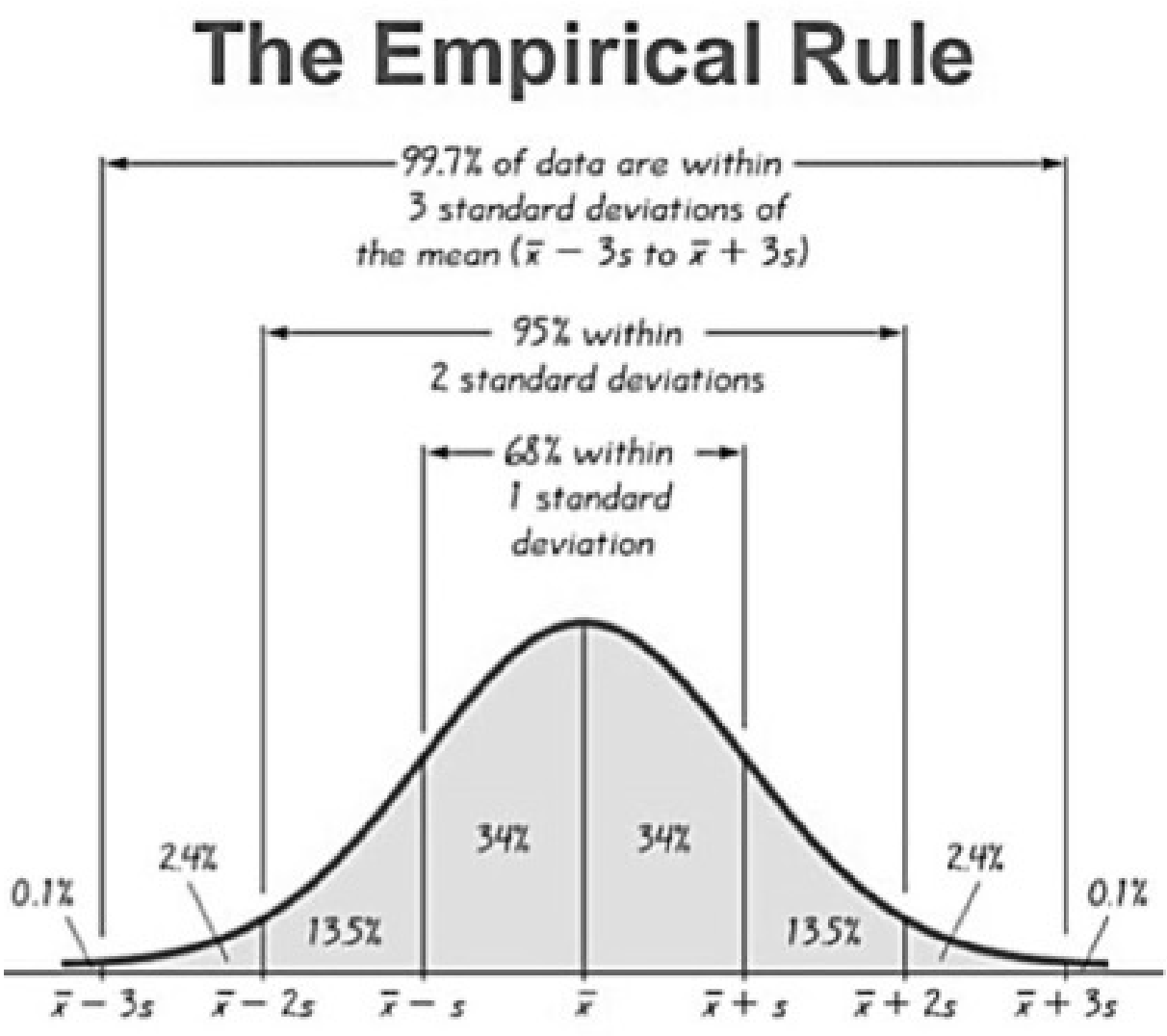
$$I_{i-1} = [\, m_{i-1} - 3s_{i-1},\ m_{i-1} + 3s_{i-1}\,]$$

۵)از معادله (۱):

$$z = \frac{r - m_i}{s_i} \quad \Rightarrow \quad r = z s_i + m_i$$

۶)با استفاده از معادلات (۲)، (۳)، (۴)، (۵) خواهیم داشت:

$$z \in \left[\frac{\gamma m_i - 3\gamma s_i - m_i}{s_i},\ \frac{\gamma m_i + 3\gamma s_i - m_i}{s_i}\right]$$



شکل ۲: Three-sigma rule

Lower Bound

$$\frac{\gamma m_i - 3\gamma s_i - m_i}{s_i} = \frac{m_i(\gamma - 1)}{s_i} - 3\gamma = \frac{\sqrt{D}\,\sigma_i(\gamma - 1)}{\sigma_i/\sqrt{2}} - 3\gamma = \sqrt{2D}(\gamma - 1) - 3\gamma$$

Upper Bound

$$\frac{\gamma m_i + 3\gamma s_i - m_i}{s_i} = \sqrt{2D}(\gamma - 1) + 3\gamma$$

پس در نتیجه خواهیم داشت:

$$p_{\sigma_i}\big(r \in I_{i-1}\big) = \Phi\big(\sqrt{2D}(\gamma - 1) + 3\gamma\big) - \Phi\big(\sqrt{2D}(\gamma - 1) - 3\gamma\big) = C$$

در فرمول بالا Φ به معنای CDF توزیع نرمال استاندارد است. این فرمول بیان می‌کند که چه مقدار از جرم توزیع $p_{\sigma_i}(x)$ داخل بازه‌ای قرار می‌گیرد که برای $p_{\sigma_{i-1}}(x)$ پرتراکم‌ترین ناحیه است (در واقع همان $99/7$ درصد در تصویر ۲). نکته مهم در فرمول بالا γ است که تنها به نسبت بین دو نویز وابسته است (نه به خود نویزها). این امر به ما اجازه می‌دهد که به‌صورت عددی مقدار بهینه‌ی γ را پیدا کنیم تا مقدار همپوشانی برابر C باشد. در حالت ایده‌آل باید $C = 1$ باشد، اما تعداد زیاد L هزینه نمونه‌برداری را بسیار افزایش می‌دهد. برای همین مقاله پیشنهاد می‌کند که $C = 0.5$ در نظر گرفته شود.

تکنیک شماره ۲: $\{\sigma_i\}_{i=1}^{L}$ را بر اساس معادله گفته شده و با $C \approx 0.5$ محاسبه کنید.

طبق تکنیک ۱ و ۲، برای تصاویر با وضوح بالا، نیاز به نویز اولیه بزرگ و تعداد زیادی مقیاس نویز داریم. در روش اصلی مدل NCSN، برای هر مقدار نویز σ، یک مجموعه پارامتر جدید در لایه‌های نرمال‌سازی شبکه تعریف می‌شود. این روش دو مشکل دارد: مصرف زیاد حافظه و وابستگی به لایه نرمال‌سازی (اگر معماری شبکه نرمال‌سازی نداشته باشد، این روش قابل استفاده نیست). پس به‌جای شبکه‌ای که به σ وابسته باشد، از یک شبکه ساده استفاده می‌کنیم که به σ وابسته نیست. از نظر تئوری، تابع امتیاز واقعی توزیع $N(x \mid 0, \sigma^2/2)$ دارای نرم متوسطی متناسب با $\sqrt{D}/\sigma$ است. مشاهدات تجربی هم نشان داده‌اند که نرم شبکه آموزش‌دیده تقریباً با $1/\sigma$ متناسب است. بنابراین، به‌جای شبکه‌ای که به σ وابسته باشد، از یک شبکه ساده استفاده می‌کنیم که به σ وابسته نیست و فقط خروجی آن در $1/\sigma$ ضرب می‌شود.

تکنیک ۳: تابع امتیاز وابسته به نویز به‌صورت زیر تعریف می‌شود:

$$\frac{s_\theta(x)}{\sigma} = s_\theta(x, \sigma)$$

در این تکنیک ما به تعداد مراحل نمونه‌برداری به ازای هر مقیاس نویز (T) و اندازه گام (ε) را مشخص خواهیم کرد. توجه کنید که در الگوریتم ۱، ما الگوریتم Langevin dynamics را به ازای مقیاس نویزهای مختلف، T بار اجرا می‌کنیم و در هر بار تکرار این حلقه، گرادیان را ضرب در $\frac{\varepsilon\,\sigma_i^2}{\sigma_L^2}$ می‌کنیم. باتوجه به اثبات صفحه ۱۳ خواهیم داشت:

$$\frac{s_T^2}{\sigma_i^2} = \left(1 - \frac{\epsilon}{\sigma_L^2}\right)^{2T} \left(\gamma^2 - \frac{2\epsilon}{\sigma_L^2 - \sigma_L^2\left(1 - \frac{\epsilon}{\sigma_L^2}\right)^2}\right) + \frac{2\epsilon}{\sigma_L^2 - \sigma_L^2\left(1 - \frac{\epsilon}{\sigma_L^2}\right)^2}.$$

در فرمول بالا، s_T^2 در واقع واریانس داده‌های ما پس از T بار اجرای حلقه دوم در الگوریتم ۱

Algorithm 1 Annealed Langevin dynamics [1]

Require: $\{\sigma_i\}_{i=1}^{L}, \epsilon, T$.

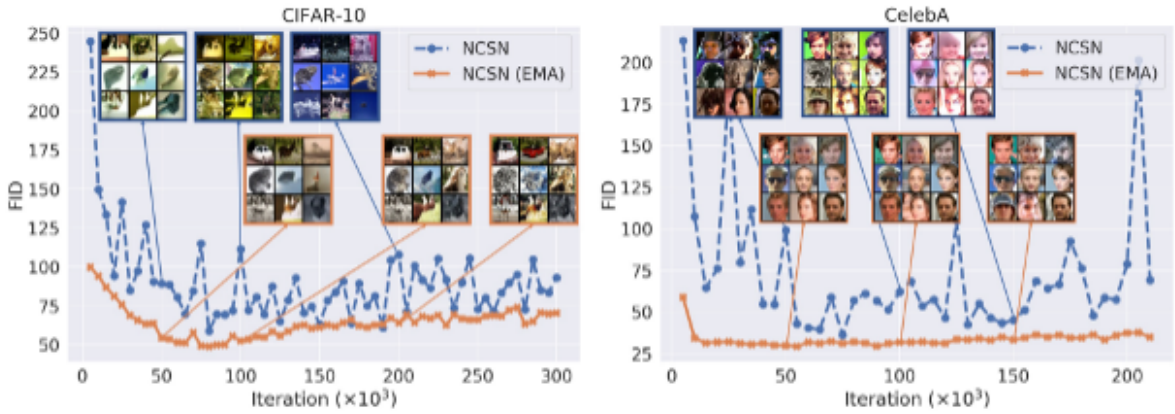
Initialize $\mathbf{x}_0$
for $i \leftarrow 1$ to L **do**
  $\alpha_i \leftarrow \epsilon \cdot \sigma_i^2/\sigma_L^2$ ▷ α_i is the step size.
  for $t \leftarrow 1$ to T **do**
    Draw $\mathbf{z}_t \sim \mathcal{N}(0, I)$
    $\mathbf{x}_t \leftarrow \mathbf{x}_{t-1} + \alpha_i\, \mathbf{s}_{\boldsymbol{\theta}}(\mathbf{x}_{t-1}, \sigma_i) + \sqrt{2\alpha_i}\, \mathbf{z}_t$
  $\mathbf{x}_0 \leftarrow \mathbf{x}_T$
if denoise $\mathbf{x}_T$ **then**
  return $\mathbf{x}_T + \sigma_T^2 \mathbf{s}_{\boldsymbol{\theta}}(\mathbf{x}_T, \sigma_T)$
else
  return $\mathbf{x}_T$

است. طبیعی است که ما دوست داریم این مقدار در هر مقیاس نویز، به طور تقریبی از توزیع $N(x \mid 0, \sigma_i^2 I)$ پیروی کند. یعنی مقدار فرمول بالا برای تمام مقیاس‌های نویز برابر ۱ باشد؛ ولی شوربختانه این کار نیاز به یک T بسیار بزرگ دارد که هزینه زیادی خواهد داشت. برای همین، مقاله پیشنهاد می‌کند که ابتدا T را براساس بودجه محاسباتی خود مشخص کنیم و سپس با فرمول بالا ε را بر مبنای T پیدا کنیم.

تکنیک ۴: T را تا جایی که بودجه محاسباتی اجازه می‌دهد بزرگ انتخاب کنید و سپس مقداری را انتخاب کنید که معادله بالا را به ۱ نزدیک کند.

اگرچه در NCSN ها، مقدار loss در طول آموزش کاهش پیدا می‌کند، ولی گاهی مشاهده می‌کنیم که نمونه‌های تصویر تولید شده، کیفیت بصری خوبی ندارند. به تصویر زیر توجه کنید: مشاهده می‌شود که NCSN اغلب در طول آموزش، نوسانات زیادی دارد و همچنین تصاویر مصنوعی تولید می‌کند. این مشکل را می‌توان به راحتی با میانگین متحرک نمایی (EMA) حل کرد. یعنی:

$$\theta' \leftarrow m\,\theta' + (1-m)\,\theta_i$$



شکل ۳: FIDs and color artifacts over the course of training

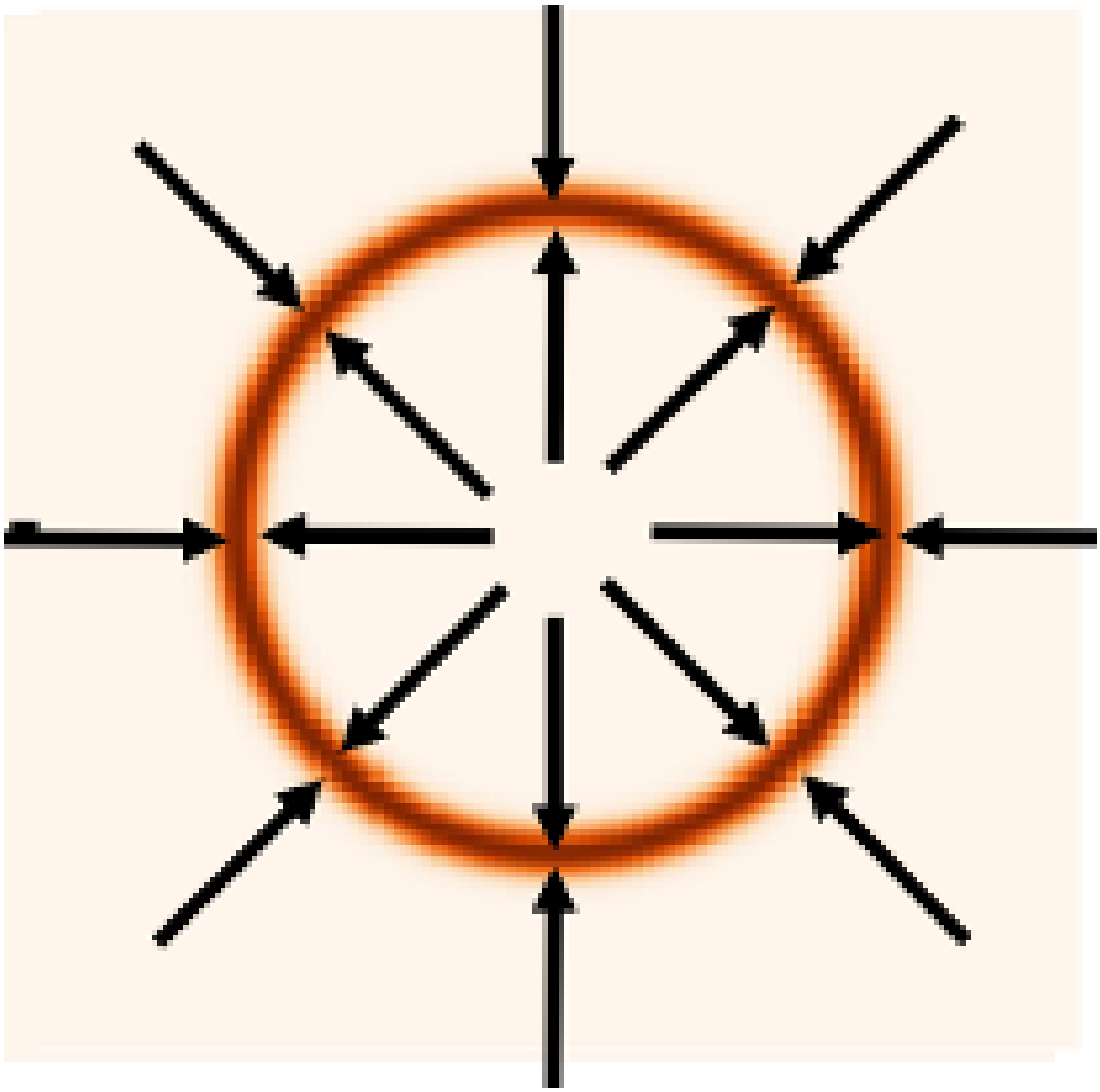
در فرمول بالا، m پارامتر momentum است و معمولاً برابر 0.999 می‌باشد. این روش تضمین می‌کند که تخمین‌ها پایدارتر باشند. ما به جای $s_{\theta_i}(x,\sigma)$ از $s_{\theta'}(x,\sigma)$ استفاده می‌کنیم.

تکنیک ۵:EMA را برای پارامترها اعمال کنید.

(ب) چگونه مدل‌های انتشار چالش فرض چندگانه و چگالی داده کم را برطرف می‌کنند؟ اولین مشکل این روش، فرض چندگانه است. فرضیه چندگانه بیان می‌کند که داده‌های با ابعاد بالا در دنیای واقعی بر روی فضا با بعد کمتر می‌توانند قرار گیرند. این فرضیه به طور تجربی برای بسیاری از مجموعه‌داده‌ها صادق است. تحت فرضیه چندگانه، مدل‌های مولد مبتنی بر امتیاز با مشکل کلیدی مواجه خواهند شد. ازآنجایی‌که تابع امتیاز یک گرادیان است که در فضای محیطی گرفته شده است، زمانی که x به ابعاد کم محدود شود، این گرادیان تعریف نشده است (تصویر۴).

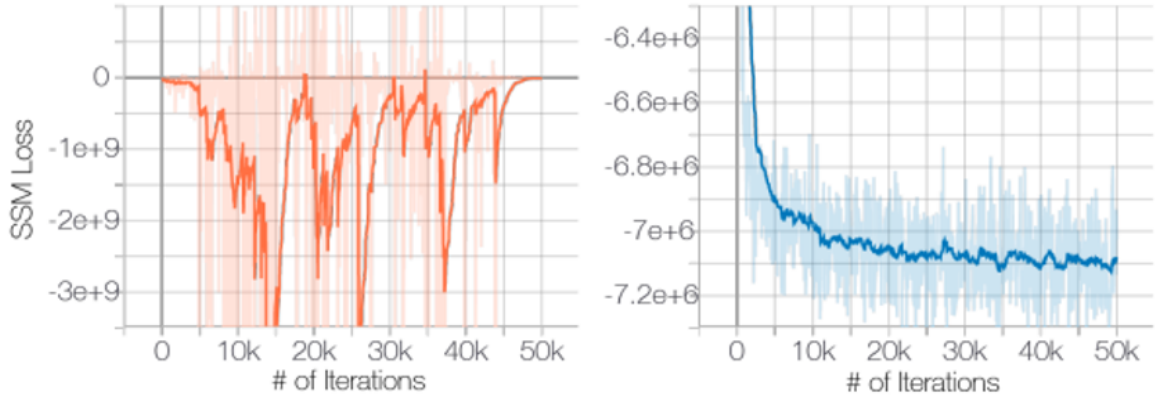
برای برطرف‌کردن این مشکل باید مقداری نویز به داده‌ها اضافه کنیم. تأثیر منفی فرض چندگانه بر تخمین امتیاز را می‌توان به‌وضوح در تصویر (۵) مشاهده کرد. جایی که یک شبکه ResNet برای تخمین امتیاز داده ها در CIFAR-10 آموزش داده‌شده‌است. همان‌طور که سمت چپ تصویر (۵) نشان می دهد، هنگامی که این شبکه بر روی تصاویر اصلی CIFAR-10 آموزش داده می شود، خطا ابتدا کاهش می یابد و سپس به طور نامنظم در نوسان است. در مقابل، اگر به داده‌ها مقدار اندکی نویز گاوسی اضافه کنیم منحنی خطا همگرا می‌شود (سمت راست تصویر ۴). مشکل دوم مناطق با تراکم داده کم است. در مناطق با تراکم داده کم[۳]، تطبیق امتیاز ممکن است به دلیل فقدان نمونه داده، شواهد کافی برای تخمین دقیق

[3] low data density regions

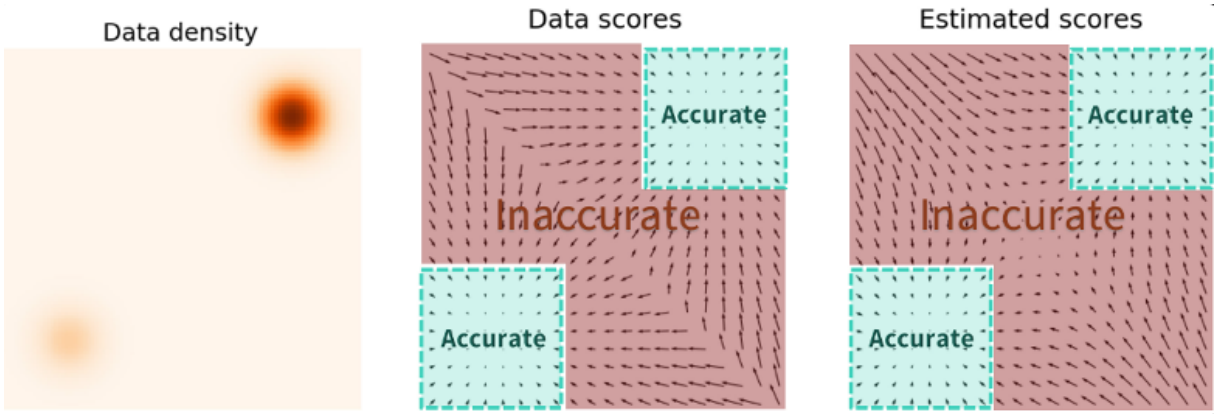


شکل ۴: فرض چندگانه

عملکردهای امتیاز نداشته باشد. هنگام نمونه‌گیری با Langevin dynamics و زمانی که داده‌ها در فضای با ابعاد بالا قرار دارند، نمونه اولیه ما در مناطق با تراکم پایین بسیار محتمل است؛ بنابراین، داشتن یک مدل مبتنی بر امتیاز نادرست، Langevin dynamics را از همان ابتدای روش از مسیر خارج می‌کند و از تولید نمونه‌های باکیفیت بالا که نماینده داده‌ها هستند، جلوگیری می‌کند. اما چگونه می‌توانیم از دشواری تخمین امتیاز دقیق در مناطق با تراکم داده کم عبور کنیم؟ راه‌حل این است که همانند مشکل اول، نقاط داده را نویزی کنیم و مدل‌های مبتنی بر امتیاز را روی نقاط داده پر نویز آموزش دهیم. هنگامی که بزرگی نویز به‌اندازه کافی بزرگ باشد، می‌تواند مناطق کم‌تراکم داده را پر کند تا دقت امتیازهای تخمینی را بهبود بخشد.



شکل ۵: مقایسه مقدار ضرر در دو حالت داده بدون نویز و با نویز گوسی اندک

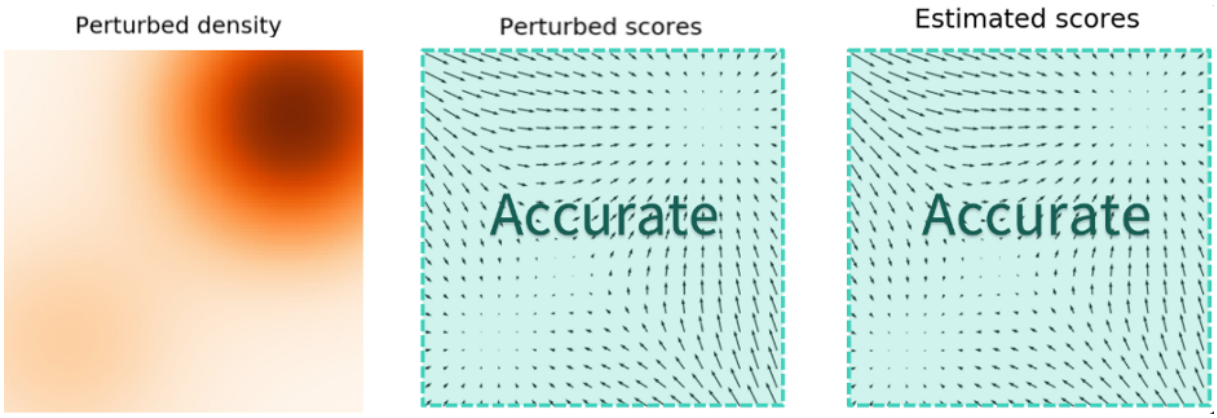


شکل ۶: امتیازات تقریبی تنها در مناطق پرتراکم دقیق هستند

اما این تراکم داده کم سبب ایجاد مشکلی دیگر نیز می‌شود. هنگامی که دو حالت توزیع داده توسط مناطق با چگالی کم از هم جدا می‌شوند، Langevin dynamics نمی‌تواند وزن‌های مرتبط به این دو حالت را به‌درستی کشف کند و بنابراین ممکن است به توزیع واقعی همگرا نشوند. به‌عنوان‌مثال توزیع $p_{\text{data}}(x)$ را در نظر بگیرید که در آن $p_1(x)$ و $p_2(x)$ توزیع‌های ازهم‌گسسته هستند و $\pi \in (0,1)$. آنگاه خواهیم داشت:

$$p_{\square\square\square\square}(x) = \pi p_1(x) + (1-\pi)p_2(x)$$

$$p_{\square\square\square\square}(x) = \begin{cases} \pi p_1(x), & x \in A \\ (1-\pi)p_2(x), & x \in B \end{cases}, \quad A \cap B = \emptyset$$



شکل ۷: امتیازات تخمینی دقیق در همه جا به دلیل افزودن نویز

در این صورت تابع امتیاز به شکل زیر خواهد بود:

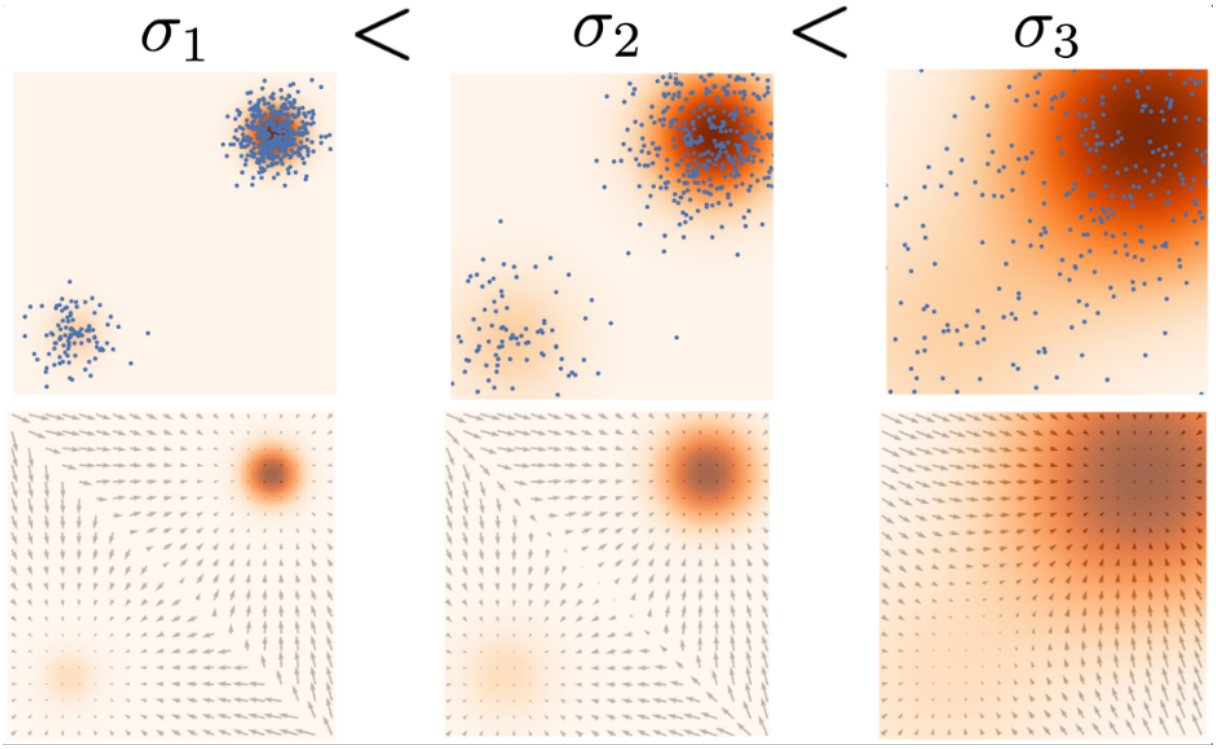
$$\nabla_x \log p(x) = \begin{cases} \nabla_x[\log \pi + \log p_1(x)], & x \in A \\ \nabla_x[\log(1-\pi) + \log p_2(x)], & x \in B \end{cases} = \begin{cases} \nabla_x \log p_1(x), & x \in A \\ \nabla_x \log p_2(x), & x \in B \end{cases}$$

که مشاهده می‌شود تابع امتیاز اصلاً به π وابستگی ندارد و ازآنجایی‌که Langevin dynamics برای نمونه‌برداری از تابع امتیاز استفاده می‌کند، نمونه‌های به‌دست‌آمده به π بستگی ندارند.
برای حل این مسئله، ابتدا به رویکردی که برای دو مشکل قبلی ارائه شده بود، نگاهی بیندازیم. در موارد پیشین، با افزودن نویز به داده‌ها مسئله را بهبود بخشیدیم، اما سؤال اساسی اینجا این است که چگونه می‌توانیم به طور معقول میزان و مقیاس نویز را انتخاب کنیم تا بهترین نتایج را بگیریم.
نویز بزرگ‌تر بدیهی است که می‌تواند مناطق کم‌تراکم بیشتری را برای تخمین امتیاز بهتر پوشش دهد، اما داده‌ها را بیش از حد خراب می‌کند و آن را به طور قابل‌توجهی نسبت به توزیع اصلی تغییر می‌دهد. نویز کوچک‌تر، از سوی دیگر، باعث خرابی کمتری در توزیع داده‌های اصلی می‌شود، اما مناطق با چگالی کم را آن‌طور که می‌خواهیم پوشش نمی‌دهد. به همین منظور ما از روشی به نام annealed Langevin dynamics استفاده می‌کنیم. ایده annealed Langevin dynamics این است که نویز را به‌صورت مرحله‌به‌مرحله اضافه کنیم. فرض کنید که ما از نویز گوسی و L مقدار مختلف انحراف معیار استفاده می‌کنیم (توجه شود که میزان این نویزها در مقاله دوم و در تکنیک ۱ و ۲ مورد بحث قرار گرفت)، به‌طوری که:

$$\sigma_1 < \sigma_2 < \cdots < \sigma_L$$

در ابتدا، ما با وضعیتی که داده‌ها به آن وارد می‌شوند و تحت تأثیر تمامی نویزهای گوسی قرار دارند، سعی داریم تا حالت اولیه داده‌ها را با این نویزها تخریب کنیم. سپس، تلاش می‌کنیم تا توزیع داده‌ها را تخمین بزنیم. این توزیع تا حدی به شکل یک توزیع نرمال نزدیک است و به دلیل این شباهت، ما بسیار سریع می‌توانیم به جواب موردنظرمان نزدیک شویم.

بعد از آن، باتوجه‌به همگرایی سریعی که در مرحله پیشین به دست آورده‌ایم، از آن نقطه به بعد به ادامه کار می‌پردازیم. در واقع، با تحلیل داده‌ها به‌صورت تدریجی و مرحله‌به‌مرحله، ما به نقاط بهینه‌ای همگرا می‌شویم که این امر به ما کمک می‌کند که تخمین‌های ما از توزیع داده‌ها به‌دقت بهتری برسد. در نهایت، این رویکرد باعث می‌شود که تولید تصاویر برای ما آسان‌تر شود و به ما امکان می‌دهد تا بادقت بیشتری به تخمین توزیع داده‌ها برسیم (تصویر ۸).



شکل ۸: annealed Langevin dynamics

(ج) اندازه نویز افزوده شده و گام زمانی چه تاثیری در مدل‌های انتشار دارد؟برای مثال اگر به جای ۴۰ مرحله نویز تنها ۳ گام نویز ولی با اندازه بیشتری افزوده شود یا برعکس ۸۰ گام نویز با اندازه کمتری افزوده شود، هر کدام چه برتری و کاستی‌هایی دارد؟

مقیاس‌های نویز برای موفقیت NCSN ها بسیار مهم هستند. شبکه‌های score base که با یک نویز واحد آموزش دیده‌اند، هرگز نمی‌توانند نمونه‌های قانع‌کننده‌ای برای تصاویر بزرگ تولید کنند. به طور شهودی، نویز بالا تخمین توابع امتیاز را تسهیل می‌کند، اما منجر به نمونه‌های

خراب نیز می‌شود؛ در حالی که نویز کمتر نمونه‌های تمیزی ارائه می‌دهد اما تخمین توابع امتیاز را دشوارتر می‌کند. بنابراین باید مقیاس‌های نویز مختلف را با هم به کار برد تا از هر دو حالت بهترین استفاده را برد. همچنین درباره تعداد گام زمانی، در تکنیک ۲ گفته شد که اید به تعدادی باشد که مقیاس‌های نویز همپوشانی داشته باشند و اگر هم خیلی زیاد باشد، هزینه نمونه‌برداری را افزایش می‌دهد.

۲.

WGAN، که در این مقاله معرفی شد، یکی از اولین گام‌های بزرگ به سوی پایدارسازی آموزش GAN بود. با چند تغییر، نویسندگان توانستند نشان دهند چگونه می‌توان GAN هایی را آموزش داد که دارای دو ویژگی زیر باشند:

- یک معیار ضرر معنادار که با همگرایی generator و کیفیت نمونه‌ها همبستگی دارد.
- بهبود پایداری فرآیند بهینه‌سازی. به طور خاص، این مقاله تابع ضرر واسرشتاین را برای هر دو discriminator و generator معرفی می‌کند. استفاده از این تابع ضرر به جای binary cross-entropy منجر به همگرایی پایدارتر GAN می‌شود.

در بسیاری از موارد، الگوریتم GAN می‌تواند به عنوان کمینه‌سازی انحراف بین توزیع داده‌ها p_{data} و توزیع مدل p_g در نظر گرفته شود. در این مسئله، ما یک مشکل با انحراف‌های مختلف (مثلاً انحراف Jensen-Shannon و انحراف KL) و یک راه‌حل بالقوه برای رفع آن (Wasserstein Distance) را بررسی خواهیم کرد(۲۰ نمره).

الف) فرض کنید $p_{\text{data}} \sim \mathcal{N}(\theta_0, \epsilon^2)$ و $p_g \sim \mathcal{N}(\theta, \epsilon^2)$ توزیع‌های نرمال با انحراف معیار ϵ باشند که به ترتیب حول $\theta_0 \in \mathbb{R}$ و $\theta \in \mathbb{R}$ مرکزیت دارند. نشان دهید که:

$$D_{\text{KL}}(p_g \,\|\, p_{\text{data}}) = \frac{(\theta - \theta_0)^2}{2\epsilon^2}$$

$$
\begin{aligned}
\mathrm{KL}\left(p_\theta(x) \| p_{\square\square\square\square}(x)\right) &= \mathbb{E}_{x\sim\mathcal{N}(\theta,\epsilon^2)}\left[\log \frac{\exp\left(-\frac{1}{2\epsilon^2}(x-\theta)^2\right)}{\exp\left(-\frac{1}{2\epsilon^2}(x-\theta_0)^2\right)}\right] \\
&= \mathbb{E}_{x\sim\mathcal{N}(\theta,\epsilon^2)}\left[\frac{1}{2\epsilon^2}\left(-(x-\theta)^2+(x-\theta_0)^2\right)\right] \\
&= \mathbb{E}_{x\sim\mathcal{N}(\theta,\epsilon^2)}\left[\frac{1}{2\epsilon^2}\left(2x\theta-2x\theta_0-\theta^2+\theta_0^2\right)\right] \\
&= \frac{1}{2\epsilon^2}\left(2\theta^2-2\theta\theta_0-\theta^2+\theta_0^2\right) \\
&= \frac{(\theta-\theta_0)^2}{2\epsilon^2}.
\end{aligned}
$$

ب) فرض کنید p_{data} و p_g هر دو جرم احتمال را فقط در یک بخش بسیار کوچک از دامنه داشته باشند؛ یعنی، حد $\epsilon \to 0$. چه اتفاقی برای $D_{\mathrm{KL}}(p_g \,\|\, p_{\text{data}})$ و مشتق آن نسبت به θ، با فرض اینکه $\theta \neq \theta_0$، می‌افتد؟

مگر اینکه $\theta = \theta_0$ باشد، هم $\mathrm{KL}(p_\theta(x) \,\|\, p_{\text{data}}(x))$ و هم مشتق آن به سمت بی‌نهایت میل می‌کنند. اگر دیسکریمناتور به صورت بهینه آموزش داده شود، ژنراتور گرادیان‌های بسیار بزرگی دریافت خواهد کرد و در نتیجه آموزش ناپایدار خواهد بود.

ج) آیا این امر مشکلی برای یک GAN که با تابع ضرر تعریف‌شده‌ی زیر آموزش داده شده باشد، ایجاد می‌کند؟ چرا؟

$$
L_G(\theta;\phi) = \mathbb{E}_{x\sim p_\theta(x)}[\log(1-D_\phi(x))] - \mathbb{E}_{x\sim p_\theta(x)}[\log D_\phi(x)]
$$

مگر اینکه $\theta = \theta_0$ باشد، L_G می‌تواند با میل دادن $D_\phi(\theta)$ به $-\infty$ یا $D_\phi(\theta_0)$ به ∞ به سمت $-\infty$ میل کند. بنابراین، هیچ دیسکریمناتوری وجود ندارد که L_D را کمینه کند.

د) تحت همان شرایط (ب)، انحراف KL، انحراف JS و فاصله واسرشتاین را مقایسه کنید.

در حالت $\epsilon \to 0$ برای هر حالت داریم: انحراف KL به سمت ∞ و انحراف JS به سمت $\log(2)$ میل می‌کنند، که در اولی گرادیان به شدت ناپایدار است و در دومی صفر است. ولی حتی اگر توزیع‌ها همپوشانی نداشته باشند، فاصله Wasserstein مقدار محدودی دارد و گرادیان آن معنادار باقی می‌ماند. بنابراین پایدار و قابل یادگیری است. به همین دلیل، مقاله WGAN تابع ضرر واسرشتاین را پیشنهاد می‌دهد تا این ناپایداری‌ها را رفع کند.

۳.  در ارتباط با DDPM به سوالات زیر پاسخ دهید(۲۰ نمره):

(آ) فرض کنید x_t متغیر تصادفی(یک نمونه داده مثلا یک تصویر)ای است که در فرایند Forward Diffusion Process با اضافه شدن مقداری نویز به x_{t-1} بدست می‌آید. بر این اساس عبارت زیر را توضیح دهید:

$$x_t = \sqrt{1-\beta_t}\, x_{t-1} + \sqrt{\beta_t}\, \epsilon$$

این رابطه نشان‌دهنده‌ی مرحله‌ای از فرایند انتشار رو به جلو است. در این فرآیند، با شروع از تصویر اصلی x_0، به‌تدریج نویز گاوسی اضافه می‌شود تا داده به یک نویز کامل تبدیل شود.

تفسیر هر جزء از فرمول:

- x_t : این متغیر تصادفی، نشان‌دهنده داده (مثلاً تصویر) در گام فعلی (t) است. این تصویر ترکیبی از تصویر گام قبلی و نویز جدید اضافه شده است.
- x_{t-1} : این متغیر تصادفی، داده در گام قبلی ($t-1$) را نشان می‌دهد. این همان تصویری است که قرار است در این گام به آن نویز اضافه شود.
- β_t : این پارامتر یک مقدار کوچک و مثبت است که میزان نویزی را که در گام t به تصویر اضافه می‌شود، تعیین می‌کند. این مقدار معمولاً در طول زمان از یک عدد کوچک (مانند 0.0001) تا یک عدد بزرگتر (مانند 0.02) به صورت خطی یا کوسینی افزایش می‌یابد. افزایش β_t باعث می‌شود در گام‌های اولیه نویز کم و در گام‌های انتهایی نویز بیشتری اضافه شود.
- $\sqrt{1-\beta_t}\, x_{t-1}$: این بخش، سهمی از تصویر اصلی گام قبلی x_{t-1} است که حفظ شده و به گام جدید منتقل می‌شود. ضریب $\sqrt{1-\beta_t}$ نشان می‌دهد که چه مقدار از اطلاعات تصویر اصلی باقی می‌ماند و به گام بعدی منتقل می‌شود. هرچه β_t بزرگ‌تر باشد، این ضریب کوچکتر شده و اطلاعات کمتری از تصویر قبلی حفظ می‌شود.
- $\sqrt{\beta_t}\, \epsilon$: این بخش، همان نویزی است که در این مرحله به تصویر اضافه می‌شود. ضریب $\sqrt{\beta_t}$ میزان نویز اضافه شده را کنترل می‌کند. هرچه $\sqrt{\beta_t}$ بزرگ‌تر باشد، نویز بیشتری به تصویر اضافه می‌شود.
- $\epsilon \sim N(0, I)$: این متغیر تصادفی، نویز جدیدی است که از یک توزیع نرمال (گوسی) استاندارد نمونه‌برداری می‌شود. این نویز دارای میانگین صفر و واریانس واحد است.

(ب) با استفاده از ترفند تغییر پارامتر[۴] نشان دهید عبارت قسمت (آ) را می‌توان بصورت زیر نوشت:

[4] Reparameterization trick

$$x_t = \sqrt{\bar{\alpha}_t}\, x_0 + \sqrt{1 - \bar{\alpha}_t}\, \epsilon$$

$$
\begin{aligned}
x_t &= \sqrt{1-\beta_t}\, x_{t-1} + \sqrt{\beta_t}\, \varepsilon_{t-1} \\
&= \sqrt{\alpha_t}\, x_{t-1} + \sqrt{1-\alpha_t}\, \varepsilon_{t-1} \\
&= \sqrt{\alpha_t}\, \left(\sqrt{\alpha_{t-1}}\, x_{t-2} + \sqrt{1-\alpha_{t-1}}\, \varepsilon_{t-2}\right) + \sqrt{1-\alpha_t}\, \varepsilon_{t-1} \\
&= \sqrt{\alpha_t\, \alpha_{t-1}}\, x_{t-2} + \sqrt{\alpha_t(1-\alpha_{t-1})}\, \varepsilon_{t-2} + \sqrt{1-\alpha_t}\, \varepsilon_{t-1} \\
&= \sqrt{\alpha_t\, \alpha_{t-1}}\, x_{t-2} + \sqrt{1-\alpha_t\, \alpha_{t-1}}\, \bar{\varepsilon}_{t-2} \\
&\vdots \\
&= \sqrt{\alpha_t\, \alpha_{t-1} \cdots \alpha_1}\, x_0 + \sqrt{1-\alpha_t\, \alpha_{t-1} \cdots \alpha_1}\, \varepsilon \\
&= \sqrt{\bar{\alpha}_t}\, x_0 + \sqrt{1-\bar{\alpha}_t}\, \varepsilon
\end{aligned}
$$

How?

$$\varepsilon_0, \ldots, \varepsilon_{t-2}, \varepsilon_{t-1} \sim \mathcal{N}(0, I)$$
$$\bar{\varepsilon}_0, \ldots, \bar{\varepsilon}_{t-2}, \bar{\varepsilon}_{t-1} \sim \mathcal{N}(0, I)$$
$$\varepsilon \sim \mathcal{N}(0, I)$$
$$\alpha_t = 1 - \beta_t$$
$$\bar{\alpha}_t = \prod_{i=1}^{t} \alpha_i$$

شکل ۹: قسمت اول پاسخ بخش ب

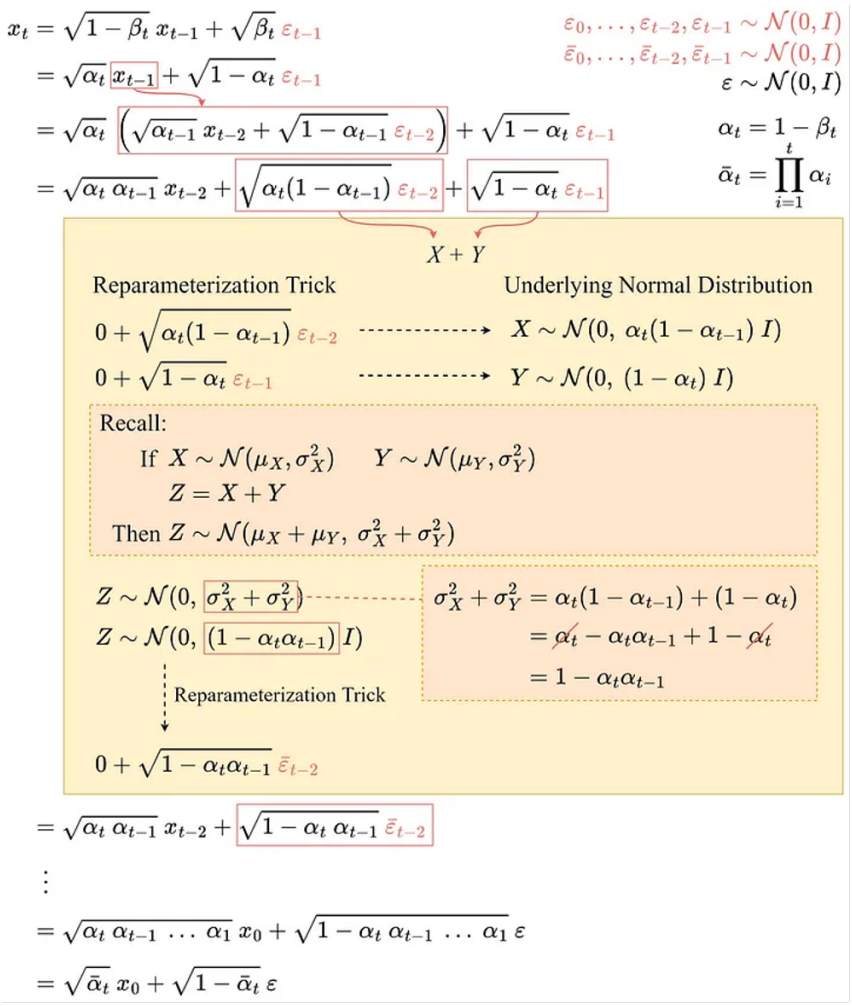
برای پریدن از خط ۴ به ۵ در فرمول‌های شکل۹ دقت شود که نویزها باید دارای توزیع گوسی باشند زیرا از این ویژگی که حاصل ترکیب (جمع) دو متغیر گوسی، نیز گوسی می‌شود به صورت زیر در شکل ۱۰ استفاده می‌کنیم: (همان راه حل بالا با جزییات بیشتر)

(ج) با توجه به شکل ۱۱ توضیح دهید که چرا به هنگام حذف نویز از داده در فرایند Reverse Diffusion Process در هر مرحله نمی‌توانیم به طور مستقیم نویز را حذف کنیم(از x_t به x_{t-1} برسیم) و چرا این عمل برایمان غیرقابل حل[5]می‌باشد؟ (با توجه به شکل ۱۱ این امر موجب می‌شود تا از روش‌های تخمین تابع مانند شبکه‌های عصبی استفاده کنیم.)

دلیل اینکه این عمل به طور مستقیم غیرقابل حل (Intractable) است، به ماهیت توزیع‌های احتمالی برمی‌گردد. به عبارتی:

- **ناشناخته بودن توزیع معکوس:** توزیع واقعی فرایند معکوس یک توزیع ساده و مشخص مانند توزیع‌های گوسی نیست. این توزیع به تمام داده‌های آموزشی و مسیر انتشار رو به جلو بستگی دارد و محاسبه آن از نظر محاسباتی غیرممکن است. این یعنی ما نمی‌توانیم فرمولی مستقیم برای حذف نویز بنویسیم.
- **پیچیدگی فرایند:** برای محاسبه دقیق $q(x_{t-1} \mid x_t)$ باید از تمام مسیرهای ممکن به x_t از x_{t-1} نمونه‌برداری کنیم و آن‌ها را به طور کامل در نظر بگیریم، که این کار از نظر

[5] intractable



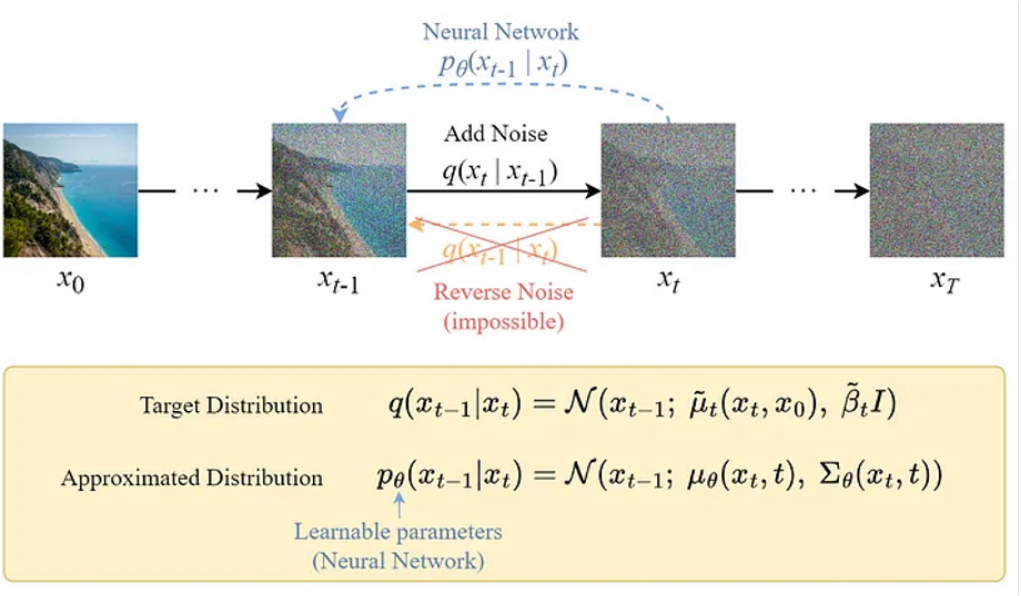
شکل ۱۰: قسمت دوم پاسخ بخش ب

محاسباتی بسیار پیچیده است.

(د) تحقیق کنید که چه ویژگی‌هایی از مدل U-Net موجب شد که نویسندگان مقاله DDPM از آن برای معماری کار خود استفاده کنند؟

نویسندگان مقاله DDPM از معماری U-Net به دلیل ویژگی‌های کلیدی آن که کاملاً با وظیفه حذف نویز در این مدل همخوانی دارد، استفاده کردند. مهم‌ترین ویژگی‌های U-Net که آن را برای DDPM مناسب می‌سازند عبارتند از:

- **ساختار Encoder-Decoder**: مدل U-Net از یک مسیر انکودر (Encoder) برای فشرده‌سازی تصویر و استخراج ویژگی‌های سطح بالا (مانند شکل‌ها و محتوای کلی) و یک مسیر دیکودر (Decoder) برای بازسازی تصویر با جزئیات دقیق استفاده می‌کند. در DDPM، انکودر به شبکه عصبی کمک می‌کند تا محتوای کلی تصویر نویزدار (x_t) را درک کند و دیکودر با



شکل ۱۱: تابع توزیع تخمین‌زده‌شده توسط شبکه‌ی عصبی

استفاده از این اطلاعات، نویز دقیقاً در هر پیکسل را تخمین بزند.

- **اتصالات میان‌بر (Skip Connections):** این ویژگی حیاتی‌ترین جزء U-Net برای DDPM است. اتصالات میان‌بر، ویژگی‌های سطح پایین (با جزئیات فضایی بالا) را مستقیماً از انکودر به دیکودر در سطوح مشابه وصل می‌کنند. وظیفه اصلی در فرایند معکوس، تخمین نویز در هر پیکسل است. این کار نیاز به حفظ دقیق جزئیات فضایی تصویر دارد. اتصالات میان‌بر باعث می‌شوند که اطلاعات دقیق مکانی که ممکن است در مراحل فشرده‌سازی انکودر از دست برود، به دیکودر منتقل شده و در نتیجه، تخمین نویز با دقت بسیار بالایی انجام شود و تصویر نهایی کیفیت بهتری داشته باشد.

به طور خلاصه، U-Net با ترکیب اطلاعات کلی (معنایی) از طریق انکودر و اطلاعات دقیق مکانی از طریق اتصالات میان‌بر، به بهترین شکل برای وظیفه پیش‌بینی نویز پیکسلی مناسب است، و این دقیقاً همان کاری است که ژنراتور در مدل DDPM باید انجام دهد.

سوالات عملی

۴. به این لینک گیت‌هاب رفته و به پرسش‌های زیر پاسخ دهید(۲۵ نمره).

(آ) درباره هدایت بدون دسته‌بند مطالعه کرده و بگویید در کجای کد از آن استفاده شده است؟

(ب) شرط در مدل انتشار شرطی به چه شکل اعمال شده است؟ آیا تنها به همین روش می‌توان شرط را اعمال کرد؟ اگر خیر، روش‌های دیگر چیست؟

(ج) فرض کنید شرط ما متن باشد و راهنمای بدون طبقه‌بندی را به شکل زیر استفاده کنیم:

$$text\_embeddings = text\_encoder([\text{""}, prompt])$$

کد را بر این اساس تغییر بدهید و بگویید کدام ماژول‌ها تغییر می‌کنند.

(د) stable diffusion چیست؟ کد را براساس آن تغییر دهید و بگویید کدام ماژول‌ها تغییر می‌کنند.

برای پاسخ این سوال به پوشه DL_HW6_Q4 که از پاسخ آقای پولایی استفاده شده است، مراجعه کنید.

۵. در این تمرین، شما قرار است دو مدل مولد مهم در یادگیری ماشین را روی مجموعه داده‌ی MNIST پیاده‌سازی کنید: خودرمزگذار متغیر (VAE) و شبکه مولد تخاصمی (GAN)(۲۰ نمره).
مدل‌های VAE یک متغیر پنهان احتمالاتی را از داده‌های ورودی یاد می‌گیرند، سپس از روی این توزیع نمونه‌برداری کرده و داده‌های جدیدی تولید می‌کنند.
مدل‌های GAN از یک شبکه مولد برای تولید تصاویر استفاده می‌کنند که توزیع آن‌ها به توزیع داده‌های واقعی نزدیک است.
نوتبوک GAN-VAE.ipynb حاوی کدهایی است که برخی بخش‌های آن با برچسب TODO مشخص شده‌اند. شما باید این بخش‌ها را با دقت تکمیل کنید تا مدل‌ها به درستی پیاده‌سازی شوند.
پیشنهاد می‌شود پیش از نوشتن کد، تمامی توضیحات و سلول‌ها را به‌دقت مطالعه کنید تا درک کاملی از ساختار مدل‌ها و نحوه پیاده‌سازی آن‌ها داشته باشید.

برای پاسخ این سوال به نوتبوک GAN-VAE_ans.ipynb مراجعه کنید.

۶. در این تمرین، هدف شما پیاده‌سازی یک مدل احتمالی انتشار نویز است. برای درک بهتر مفاهیم، توصیه می‌شود مقاله اصلی مربوط به DDPM را مطالعه کنید(۲۰ نمره).

شما باید نوتبوک DDPM.ipynb را تکمیل کرده و تمام سلول‌های آن را اجرا کنید. بخش‌هایی که نیاز به تکمیل دارند، با برچسب TODO در داخل بلوک‌های کد مشخص شده‌اند.
پیش از شروع به نوشتن کد، تمام توضیحات متنی و کدهای داده‌شده را با دقت بخوانید.

این نوت‌بوک با استفاده از محیط‌های رایگان Google Colab و Kaggle آزمایش شده است؛ می‌توانید از این پلتفرم‌ها برای اجرای کدهای خود استفاده کنید.
اطمینان حاصل کنید که تمامی سلول‌ها بدون خطا اجرا می‌شوند و عملکرد مورد انتظار را ارائه می‌دهند.

برای پاسخ این سوال به نوتبوک DDPM_ans.ipynb مراجعه کنید.