RCP211 – Réseaux génératifs antagonistes

Principe – Optimisation – Conditionnement

Nicolas Audebert `nicolas.audebert@lecnam.net`

Conservatoire national des arts & métiers

17 novembre 2021

Plan du cours

Définitions

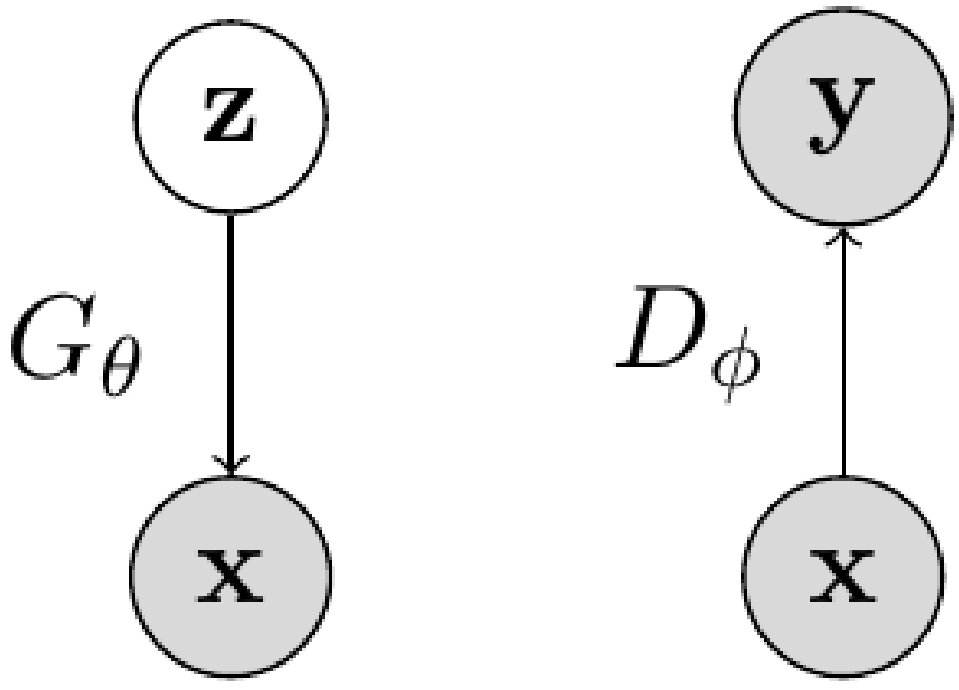
Generative Adversarial Networks

On parle de réseaux génératifs antagonistes pour décrire un type de modèle génératif profond introduits par Goodfellow et al. en 2014.
Les GAN possèdent deux composants :

- un générateur G,
- un discriminateur D.

Goodfellow et al., 2014, *Generative Adversarial Nets*

Structure des GAN



- Générateur G_θ : génère de façon **déterministe** une observation $\mathbf{x}$ à partir d'un bruit $\mathbf{z}$,
- Discriminateur D_ϕ : distingue les exemples réels des exemples synthétiques.

Minimax

Apprentissage du GAN

Le générateur et le discriminateur sont appris l'un contre l'autre et jouent à un jeu minimax à deux joueurs :

$$\min_{\theta} \max_{\phi} V(G_\theta, D_\phi) = \mathbb{E}_{\mathbf{x}\sim\mathbf{p}_{\text{data}}}[\log D_\phi(\mathbf{x})] + \mathbb{E}_{\mathbf{z}\sim p(\mathbf{z})}[\log(1 - D_\phi(G_\theta(\mathbf{z})))]$$

Antagonisme

En décomposant, il y a donc deux tâches :

- $\max_\phi \mathbb{E}_{\mathbf{x}\sim\mathbf{p}_{\text{data}}}[\log D_\phi(\mathbf{x})] + \mathbb{E}_{\hat{\mathbf{x}}\sim p(\hat{\mathbf{x}}}[\log(1 - \hat{\mathbf{x}})]$: trouver les paramètres de D qui associent le score 1 aux données réelles et 0 aux données produites par G.
- $\min_\theta \mathbb{E}_{\mathbf{z}\sim p(\mathbf{z})}[\log(1 - D_\phi(G_\theta(\mathbf{z})))]$: trouver les paramètres de G qui produisent un $\hat{\mathbf{x}} = G_\theta(\mathbf{z})$ tel que D lui associe le score 1 ("réel")

Minimax

Apprentissage du GAN

Le générateur et le discriminateur sont appris l'un contre l'autre et jouent à un jeu minimax à deux joueurs :

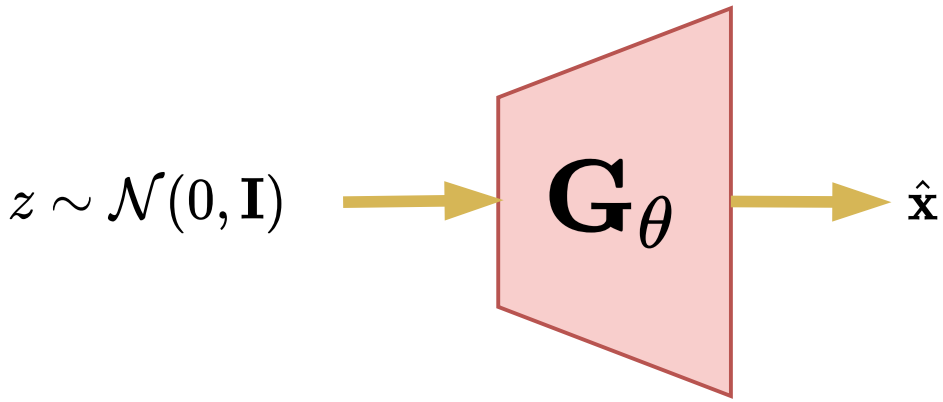
$$\min_{\theta} \max_{\phi} V(G_\theta, D_\phi) = \mathbb{E}_{\mathbf{x}\sim\mathbf{p}_{\text{data}}}[\log D_\phi(\mathbf{x})] + \mathbb{E}_{\mathbf{z}\sim p(\mathbf{z})}[\log(1 - D_\phi(G_\theta(\mathbf{z})))]$$

Antagonisme

En décomposant, il y a donc deux tâches :

- $\max_\phi \mathbb{E}_{\mathbf{x}\sim\mathbf{p}_{\text{data}}}[\log D_\phi(\mathbf{x})] + \mathbb{E}_{\hat{\mathbf{x}}\sim p(\hat{\mathbf{x}}}[\log(1 - \hat{\mathbf{x}})]$: trouver les paramètres de D qui associent le score 1 aux données réelles et 0 aux données produites par G.
- $\min_\theta \mathbb{E}_{\mathbf{z}\sim p(\mathbf{z})}[\log(1 - D_\phi(G_\theta(\mathbf{z})))]$: trouver les paramètres de G qui produisent un $\hat{\mathbf{x}} = G_\theta(\mathbf{z})$ tel que D lui associe le score 1 ("réel")

Générateur



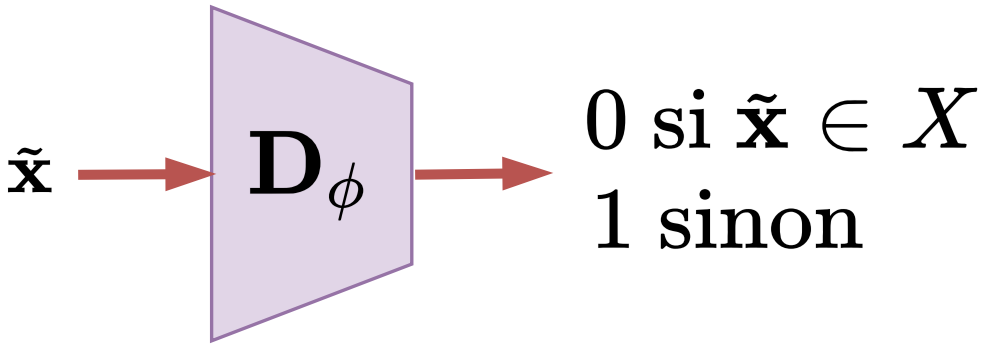
Génération

Le générateur transforme un bruit $\mathbf{z} \in \mathcal{N}(0,1)^n$ en une observation synthétique $\hat{\mathbf{x}}$.
$\mathbf{z}$ est un *code* de l'espace latent $\mathcal{Z} = \mathbb{R}^n$.

L'analogie du faussaire

L'objectif de G est d'apprendre à tromper le discriminateur, c'est-à-dire à produire des observations $\hat{\mathbf{x}}$ telles que $p(\hat{\mathbf{x}}) = p(G(\mathbf{z}))$ est indiscriminable de $p(\mathbf{x})$.

Discriminateur



Discrimination

Le discriminateur classe les observations $\mathbf{x}$ en deux catégories : réelle ou fausse. Sa sortie est une unique activation passée dans une sigmoïde :

$$f(x) = \frac{1}{1 + e^{-x}}$$

à valeurs dans $[0, 1]$.

Par convention, les données réelles ont un score de 1 et les données “fausses” ont un score de 0.

Algorithme

Apprentissage

Pour *N epochs* :

1. Échantillonner m de données réelles $\mathbf{x}_1, \ldots, \mathbf{x}_m \sim\in \mathcal{D}$
2. Échantillonner m bruits $\mathbf{z}_1, \ldots, \mathbf{z}_m \sim p_{\mathbf{z}}$
3. Faire une étape du descente de gradient sur les paramètres θ du *générateur* :

$$\nabla_\theta V(G_\theta, D_\phi) = \frac{1}{m} \nabla_\theta \sum_{i=1}^{m} \log\left(1 - D_\phi(G_\theta(\mathbf{z}_i))\right)$$

4. Faire une étape de **montée** de gradient sur les paramètres ϕ du *discriminateur* :

$$\nabla_\phi V(G_\theta, D_\phi) = \frac{1}{m} \nabla_\phi \sum_{i=1}^{m} \left[\log D_\phi(\mathbf{x}_i) + \log(1 - D_\phi(G_\theta(\mathbf{z}_i)))\right]$$

Algorithme

Apprentissage

Pour *N epochs* :

1. Échantillonner m de données réelles $\mathbf{x}_1, \ldots, \mathbf{x}_m \sim\in \mathcal{D}$
2. Échantillonner m bruits $\mathbf{z}_1, \ldots, \mathbf{z}_m \sim p_{\mathbf{z}}$
3. Faire une étape du descente de gradient sur les paramètres θ du *générateur* :

$$\nabla_\theta V(G_\theta, D_\phi) = \frac{1}{m} \nabla_\theta \sum_{i=1}^{m} \log\left(1 - D_\phi(G_\theta(\mathbf{z}_i))\right)$$

4. Faire une étape de **montée** de gradient sur les paramètres ϕ du *discriminateur* :

$$\nabla_\phi V(G_\theta, D_\phi) = \frac{1}{m} \nabla_\phi \sum_{i=1}^{m} \left[\log D_\phi(\mathbf{x}_i) + \log(1 - D_\phi(G_\theta(\mathbf{z}_i)))\right]$$

Algorithme

Apprentissage

Pour *N epochs* :

1. Échantillonner m de données réelles $\mathbf{x}_1, \ldots, \mathbf{x}_m \sim\in \mathcal{D}$
2. Échantillonner m bruits $\mathbf{z}_1, \ldots, \mathbf{z}_m \sim p_{\mathbf{z}}$
3. Faire une étape du descente de gradient sur les paramètres θ du *générateur* :

$$\nabla_\theta V(G_\theta, D_\phi) = \frac{1}{m} \nabla_\theta \sum_{i=1}^{m} \log\left(1 - D_\phi(G_\theta(\mathbf{z}_i))\right)$$

4. Faire une étape de **montée** de gradient sur les paramètres ϕ du *discriminateur* :

$$\nabla_\phi V(G_\theta, D_\phi) = \frac{1}{m} \nabla_\phi \sum_{i=1}^{m} \left[\log D_\phi(\mathbf{x}_i) + \log(1 - D_\phi(G_\theta(\mathbf{z}_i)))\right]$$

Algorithme

Apprentissage

Pour *N epochs* :

1. Échantillonner m de données réelles $\mathbf{x}_1, \ldots, \mathbf{x}_m \sim\in \mathcal{D}$
2. Échantillonner m bruits $\mathbf{z}_1, \ldots, \mathbf{z}_m \sim p_{\mathbf{z}}$
3. Faire une étape du descente de gradient sur les paramètres θ du *générateur* :

$$\nabla_\theta V(G_\theta, D_\phi) = \frac{1}{m} \nabla_\theta \sum_{i=1}^{m} \log\left(1 - D_\phi(G_\theta(\mathbf{z}_i))\right)$$

4. Faire une étape de **montée** de gradient sur les paramètres ϕ du *discriminateur* :

$$\nabla_\phi V(G_\theta, D_\phi) = \frac{1}{m} \nabla_\phi \sum_{i=1}^{m} \left[\log D_\phi(\mathbf{x}_i) + \log(1 - D_\phi(G_\theta(\mathbf{z}_i)))\right]$$

Pourquoi le GAN fonctionne ? (1/2)

Équation du GAN :

$$\min_{\theta} \max_{\phi} V(G_\theta, D_\phi) = \mathbb{E}_{\mathbf{x}\sim \mathbf{p}_{\text{data}}}[\log D_\phi(\mathbf{x})] + \mathbb{E}_{\mathbf{z}\sim p(\mathbf{z})}[\log(1 - D_\phi(G_\theta(\mathbf{z})))]$$

Justification de la convergence

Pour un générateur G_θ fixé, le discriminateur D_ϕ est entraîné pour réaliser une classification binaire. On optimise :

$$\max_{\phi} \int_x (p_{\text{réelles}}(x) \log D(x) + p_{\text{fausses}}(x) \log(1 - D(x)))\, dx$$

qui admet pour maximum :

$$D_{\phi^*} : x \to \frac{p_{\text{réelles}}(x)}{p_{\text{réelles}}(x) + p_{\text{fausses}}(x)}$$

Pourquoi le GAN fonctionne ? (2/2)

Convergence des distributions

Pour G fixé $D^* = D_{\phi^*} : x \to \frac{p_{\text{réelles}}(x)}{p_{\text{réelles}}(x)+p_{\text{fausses}}(x)}$
La valeur optimale de V est donc :

$$\min_\theta V(G, D^*) = \int_x \left(p_r(x) \log \frac{p_r(x)}{p_r(x) + p_f(x)} + p_f(x) \log \frac{p_f(x)}{p_r(x) + p_f(x)} \right) dx$$

Et on peut montrer que :

$$\min_\theta V(G, D^*) = 2D_{JS}(p_r||p_f) - 2\log 2$$

où D_{JS} est la divergence de Shannon-Jensen.
Optimiser le générateur revient donc à minimiser la divergence de Jensen-Shannon, c'est-à-dire à faire tendre vers $p_r = p_f$.

Comparaison avec les autres modèles génératifs

Modèles explicites ou implicites

On considère généralement que les GAN sont des modèles génératifs **implicites**.
Contrairement aux modèles de mélange gaussiens ou aux auto-encodeurs variationnels, l'apprentissage ne se fait pas par une maximisation de la vraisemblance.

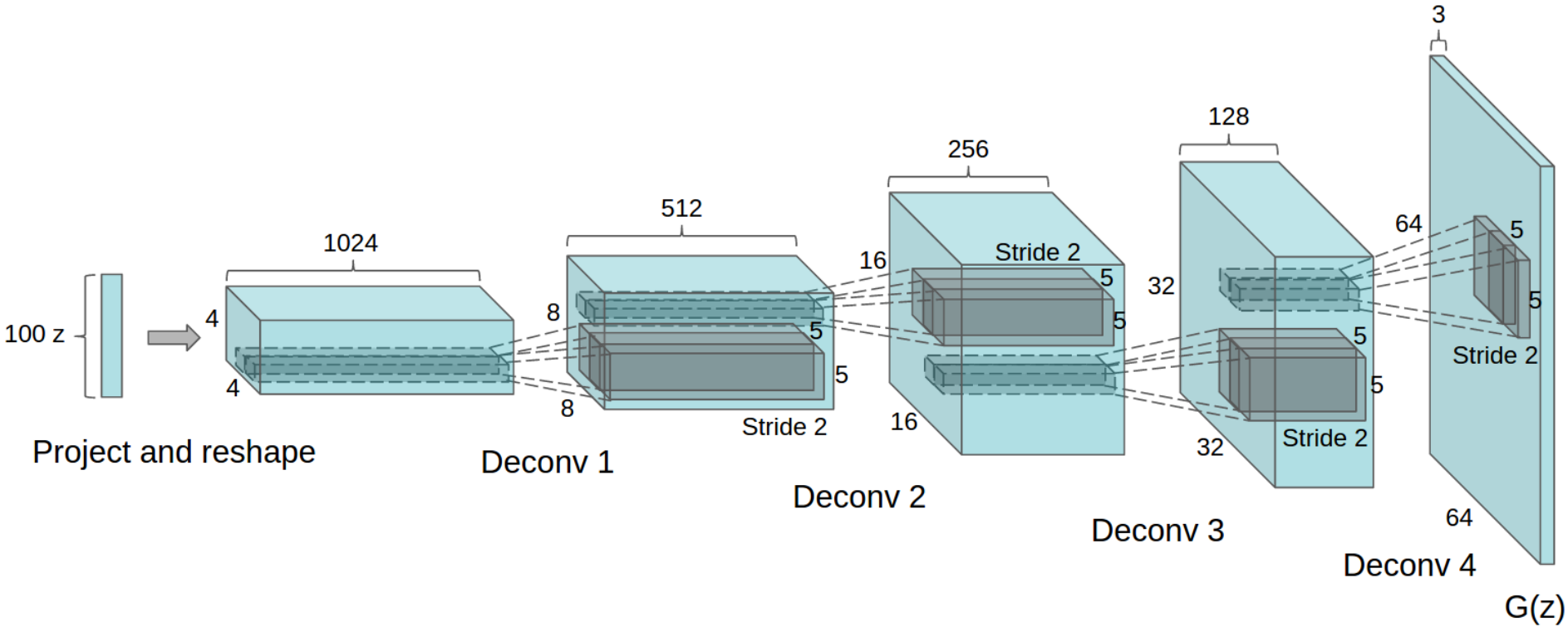
Le discriminateur comme mesure de distance

On utilise le discriminateur D comme test permettant de juger si les deux distributions (réelle et générée) sont statistiquement différentes.

$\rightarrow$ D définit une mesure de distance *implicite* entre les deux distributions (qu'elle tente de maximiser tandis que G tente de la réduire).

DCGAN : *Deep Convolutional GAN*

DCGAN est une extension des GAN qui utilise une architecture convolutive pour le discriminateur et une architecture convolutive transposée pour le générateur.



Radford et al., 2015

Plan du cours

Difficultés de l'optimisation des GAN

Constat

L'optimisation minimax n'est généralement pas stable.

On observe en général trois types de problèmes :

- **Non-convergence** : les paramètres oscillent fortement sans se stabiliser.
- **Mode collapse** : le générateur produit des observations avec très peu de variété.
- **Rupture de l'équilibre** : le discriminateur devient "plus fort" que le générateur qui reçoit des gradients très faibles en retour.

Cette instabilité introduit une haute sensibilité des GAN au choix des hyperparamètres.

Difficultés de l'optimisation des GAN

Constat

L'optimisation minimax n'est généralement pas stable.

On observe en général trois types de problèmes :

- **Non-convergence** : les paramètres oscillent fortement sans se stabiliser.
- **Mode collapse** : le générateur produit des observations avec très peu de variété.
- **Rupture de l'équilibre** : le discriminateur devient "plus fort" que le générateur qui reçoit des gradients très faibles en retour.

Cette instabilité introduit une haute sensibilité des GAN au choix des hyperparamètres.

Difficultés de l'optimisation des GAN

Constat

L'optimisation minimax n'est généralement pas stable.

On observe en général trois types de problèmes :

- **Non-convergence** : les paramètres oscillent fortement sans se stabiliser.
- **Mode collapse** : le générateur produit des observations avec très peu de variété.
- **Rupture de l'équilibre** : le discriminateur devient "plus fort" que le générateur qui reçoit des gradients très faibles en retour.

Cette instabilité introduit une haute sensibilité des GAN au choix des hyperparamètres.

Stabilité de l'optimisation

Équation du GAN

$$\min_{\theta} \max_{\phi} V(G_\theta, D_\phi) = \mathbb{E}_{\mathbf{x}\sim\mathbf{p}_{\text{data}}}[\log D_\phi(\mathbf{x})] + \mathbb{E}_{\mathbf{z}\sim p(\mathbf{z})}[\log(1 - D_\phi(G_\theta(\mathbf{z})))]$$

$\rightarrow$ jeu à somme nulle (*zero-sum game*)

$\rightarrow$ solution : équilibre de Nash

L'équilibre de Nash n'est pas forcément atteignable par descente de gradient (surtout pour une fonction de coût non-convexe).

Mode collapse

Les distributions réelles sont généralement **multimodales** (e.g. différents chiffres pour de MNIST).
Le *mode collapse* intervient quand le générateur ne produit plus que des échantillons d'un seul mode (par exemple, des images d'une seule classe).

Origine du *mode collapse*

Considérons le cas limite où l'on optimise uniquement G. Alors les observations générées convergent vers $\mathbf{x}^*$ qui trompe le mieux D. Dans le cas extrême :

$$\mathbf{x}^* = \arg\max_x D(x)$$

qui ne dépend pas de $\mathbf{z}$! La distribution $G(\mathbf{z})$ s'est effondrée en un seul point et le gradient est nul.

Gradients évanescents

Fonction de coût du GAN

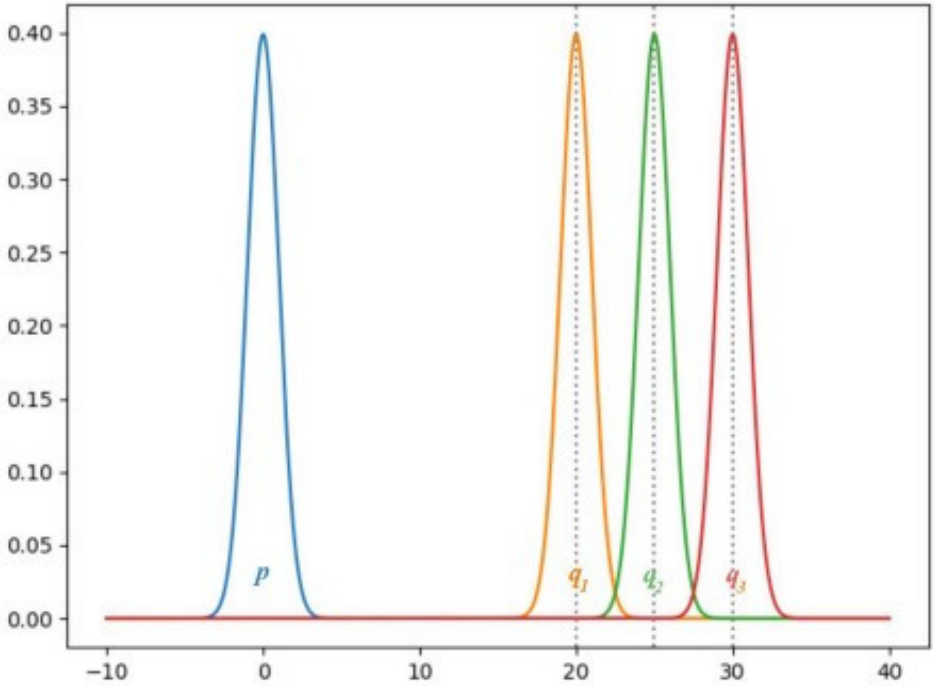
L'utilisation implicite de la divergence JS pour entraîner le générateur provoque des gradients évanescents. On rappelle que si le discriminateur est optimal, alors l'optimisation de G se fait sur :

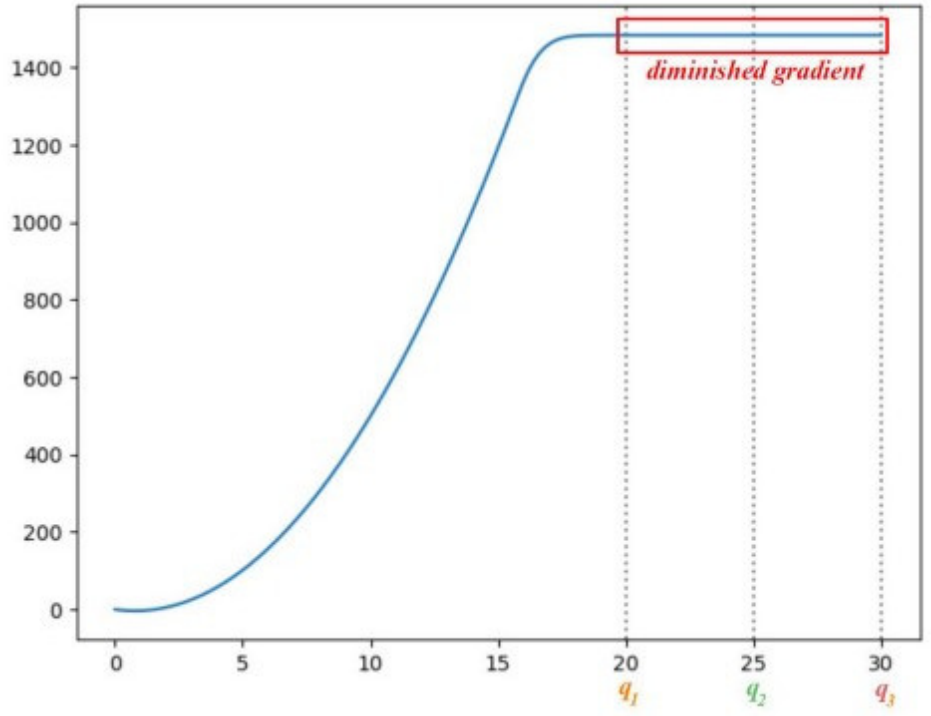
$$\min_G(G, D^*) = 2D_{JS}(p_r \| p_f) - 2\log 2$$

Problème

Les gradients de la divergence JS diminuent très rapidement lorsque p_f s'approche de p_r.
$\rightarrow$ la convergence est de plus en plus lente !

Illustration de l'évanescence des gradients de D_{JS}





À gauche : quatre distributions gausiennes unidimensionnelles de moyennes différentes.
À droite : la valeur du gradient de $D_JS(p\|q_2)$ lorsque la moyenne p varie entre 0 et 30.

Fonction de coût alternative

Optimisation du générateur

$$\nabla_\theta J(G) = \nabla_\theta \log\left(1 - D_\phi(G_\theta(z))\right)$$

Si $G_\theta(z)$ est peu plausible, $D_\phi(G_\theta(z)) \to 0$ et $J(G) \simeq \log(1-\varepsilon)$.
L'erreur sature et les gradients deviennent évanescents.

Solution

On utilise :

$$\nabla_\theta - \log\left(D_\phi(G_\theta(z))\right)$$

Astuces d'optimisation

Sur les données

- Normaliser les observations entre -1 et $+1$ (et utiliser $\tanh$ pour la dernière couche de G)

Sur le générateur

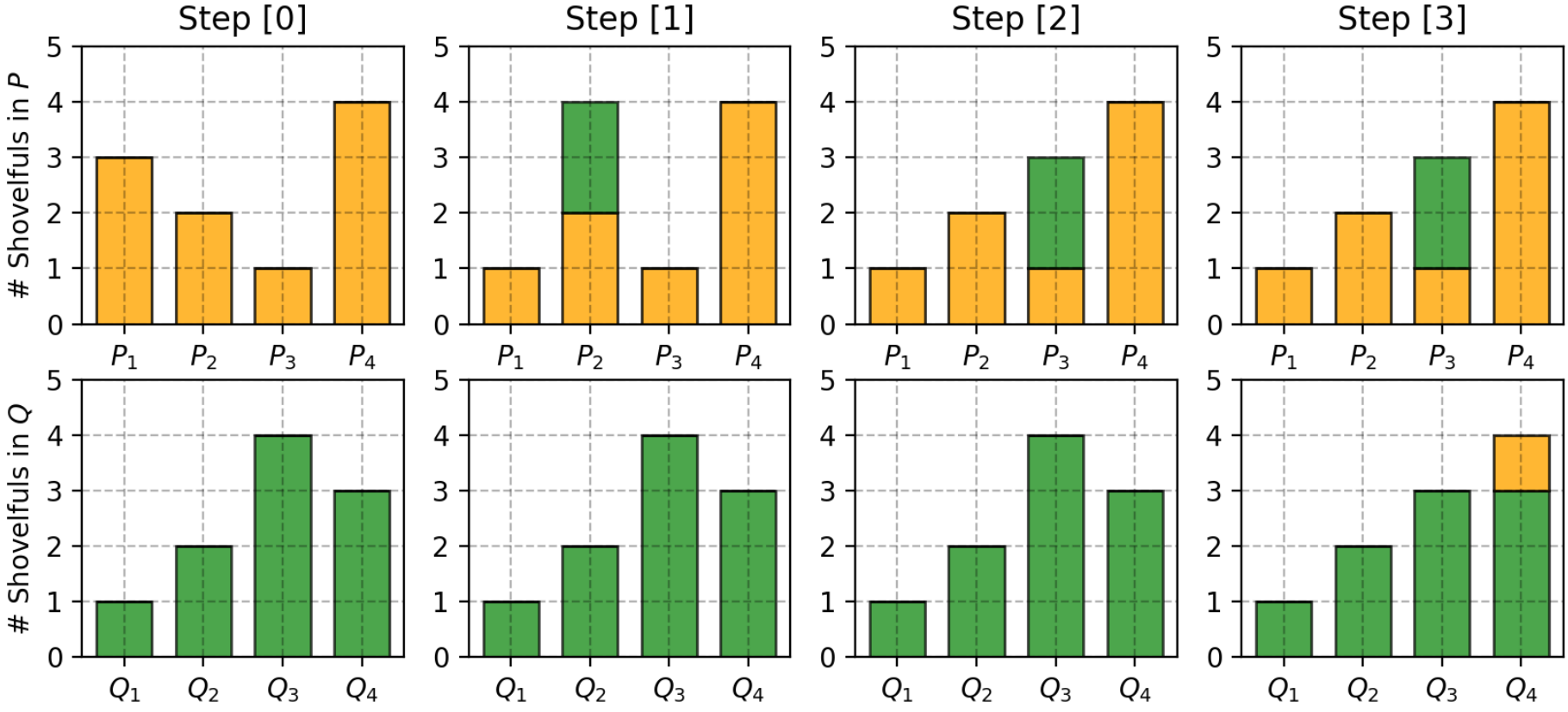
- Échantillonner $\mathbf{z}$ dans une gaussienne
- Interpoler sur les grands cercles plutôt que sur les lignes
- Éviter les gradients *sparse* : préférer *LeakyReLU* à ReLU, *average pooling* plutôt que *max pooling*, etc.

Sur l'optimiseur

- Utiliser Adam plutôt que SGD
- Ne pas mixer vraies et fausses données dans un *batch*
- *Label smoothing*

Distance de Wasserstein

L'utilisation de la divergence JS produit des gradients évanescents lorsque les distributions sont disjointes. Arjovsky et al. (2017) définit une nouvelle fonction de coût utilisant la **distance de Wasserstein**.
La distance de Wasserstein (ou *Earth Mover's* distance) correspond au transport optimal entre deux distributions :

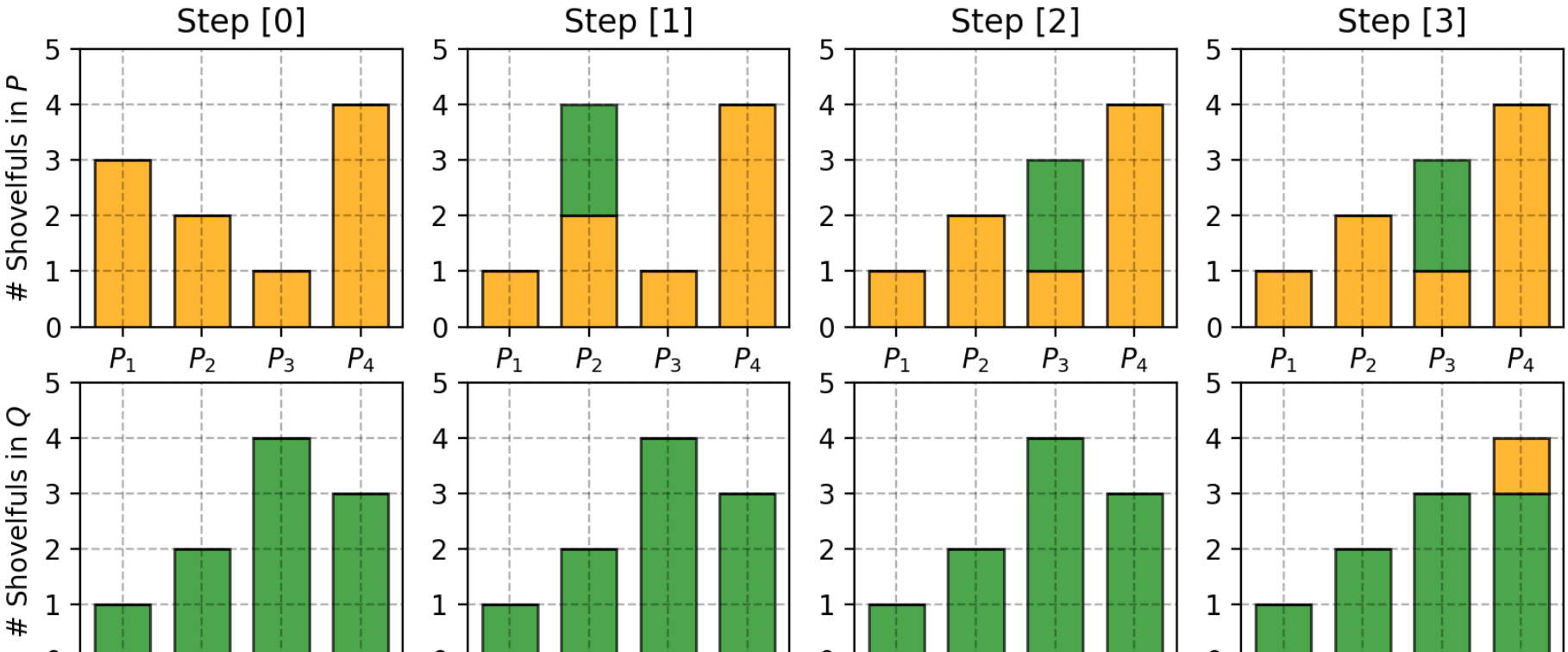


Distance de Wasserstein

- Étape 1 : déplace 2 unités de P_1 vers P_2
- Étape 2 : déplace 2 unités de P_2 vers P_3
- Étape 3 : déplace 1 unité de Q_3 vers Q_4

Distance de Wasserstein

nombre d'unités déplacées $\times$ distance de déplacement



Wasserstein GAN

Cas des probabilités continues

$$W(p_r, p_f) = \inf_{\gamma \sim \Pi(p_r, p_f)} \mathbb{E}_{(x,y)\sim\gamma}[\|x - y\|]$$

W croît linéairement avec la distance entre les moyennes des distributions, même si les distributions sont disjointes (ce qui n'est pas le cas de D_{JS}).

Inconvénient

On ne peut pas tester tous les probabilités conjointes $\Pi(p_r, p_f)$.
La dualité de Kantorovich-Rubinstein nous donne :

$$W(p_r, p_f) = \frac{1}{K} \sup_{\|f\|_L \leq K} \mathbb{E}_{x\sim p_r}[f(x)] - \mathbb{E}_{x\sim p_f}[f(x)]$$

pour f l'ensemble des fonctions K-lipschitziennes (i.e. $|f(x_1) - f(x_2) \leq K|x_1 - x_2|$).

Wasserstein GAN

Cas des probabilités continues

$$W(p_r, p_f) = \inf_{\gamma \sim \Pi(p_r, p_f)} \mathbb{E}_{(x,y)\sim\gamma}[\|x - y\|]$$

W croît linéairement avec la distance entre les moyennes des distributions, même si les distributions sont disjointes (ce qui n'est pas le cas de D_{JS}).

Inconvénient

On ne peut pas tester tous les probabilités conjointes $\Pi(p_r, p_f)$.
La dualité de Kantorovich-Rubinstein nous donne :

$$W(p_r, p_f) = \frac{1}{K} \sup_{\|f\|_L \leq K} \mathbb{E}_{x\sim p_r}[f(x)] - \mathbb{E}_{x\sim p_f}[f(x)]$$

pour f l'ensemble des fonctions K-lipschitziennes (i.e. $|f(x_1) - f(x_2) \leq K|x_1 - x_2|$).

Implémentation du Wasserstein GAN

W-GAN en pratique

On impose que le discriminateur soit $K-$lipschitzien. Alors la fonction de coût devient :

$$L(p_r, p_f) = W(p_r, p_f) = \max_{\phi} \mathbb{E}_{x \sim p_r}[D_\phi(x)] - \mathbb{E}_{z \sim p(z)}[D_\phi(G_\theta(z))]$$

Autrement dit la fonction de coût revient à maximiser (pour le discriminateur) sur un *batch* m :

$$L(p_r, p_f) = \max_{\phi} \frac{1}{m}[D_\phi(x) - D_\phi(G_\theta(z))]$$

Comment rendre D $K-$Lipschitz ?

- restreindre les poids ϕ à une norme $[-c, c]$,
- utiliser la pénalité du gradient de Gulrajani et al., 2017

Implémentation du Wasserstein GAN

W-GAN en pratique

On impose que le discriminateur soit $K-$lipschitzien. Alors la fonction de coût devient :

$$L(p_r, p_f) = W(p_r, p_f) = \max_{\phi} \mathbb{E}_{x \sim p_r}[D_\phi(x)] - \mathbb{E}_{z \sim p(z)}[D_\phi(G_\theta(z))]$$

Autrement dit la fonction de coût revient à maximiser (pour le discriminateur) sur un *batch* m :

$$L(p_r, p_f) = \max_{\phi} \frac{1}{m}[D_\phi(x) - D_\phi(G_\theta(z))]$$

Comment rendre D $K-$Lipschitz ?

- restreindre les poids ϕ à une norme $[-c, c]$,
- utiliser la pénalité du gradient de Gulrajani et al., 2017

Évaluation des GAN

Évaluer des modèles génératifs est difficile : comment quantifier la qualité des observations synthétiques produites ?

Fréchet Inception Distance

Pour des images, on considère les *features* des images réelles et générées calculées par le modèle Inception v3 préentraîné sur Imagenet. On calcule alors :

$$\mathrm{FID} = |\mu - \mu_w|^2 + \mathrm{tr}\left(\Sigma + \Sigma_w - 2(\Sigma\Sigma_w)^{1/2}\right)$$

avec μ, Σ la moyenne et la matrice de variance-covariance empirique des distributions des *features*.
Intuitivement, FID faible $\implies$ distributions proches $\implies$ images visuellement similaires.

Plan du cours

Limitation du GAN standard

Le modèle de GAN vu précédemment reproduit une distribution $p(\mathbf{x})$.

Contrôle de la génération

Comment traiter le cas à n classes où l'on voudrait reproduire $p(\mathbf{x}|c)$?

- Option 1 : n modèles $\rightarrow$ lourd, pas forcément possible si peu d'exemples par classe.
- Option 2 : conditionner les distributions.

$$\min_G \max_D V(D,G) = \mathbb{E}_{\mathbf{x}\sim p_{\text{data}}(\mathbf{x})}[\log D(\mathbf{x}|\mathbf{y})] + \mathbb{E}_{\mathbf{z}\sim p_z(\mathbf{z})}[\log(1 - D(G(\mathbf{z}|\mathbf{y})))].$$

GAN conditionnel

Deux changements principaux :

Générateur

On conditionne le générateur sur le vecteur de conditionnement c :

$$G(z, c) \rightarrow \hat{\mathbf{x}}$$

Souvent on concatène simplement c au bruit z.

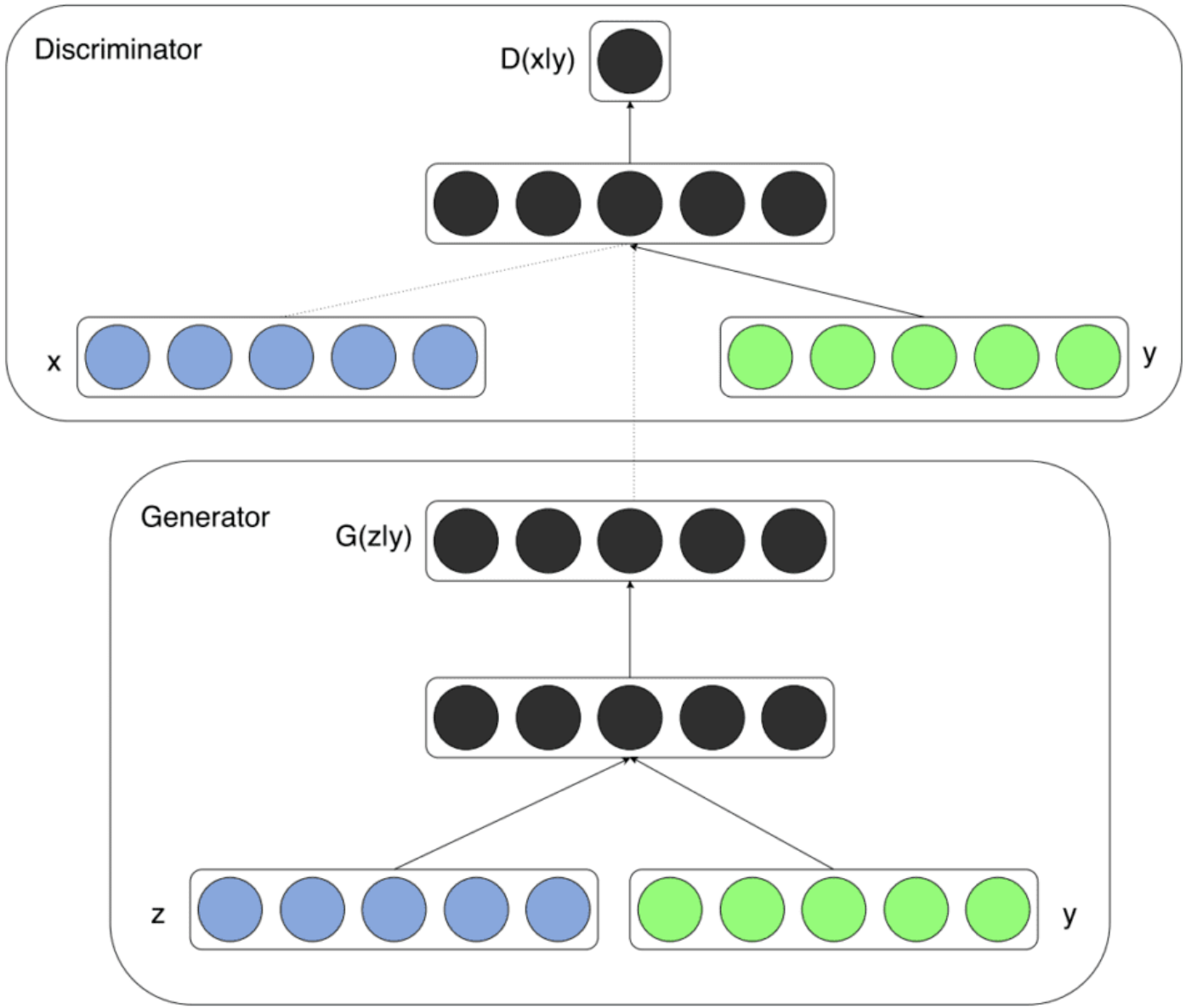
Discriminateur

On conditionne le discriminateur sur le vecteur de conditionnement c :

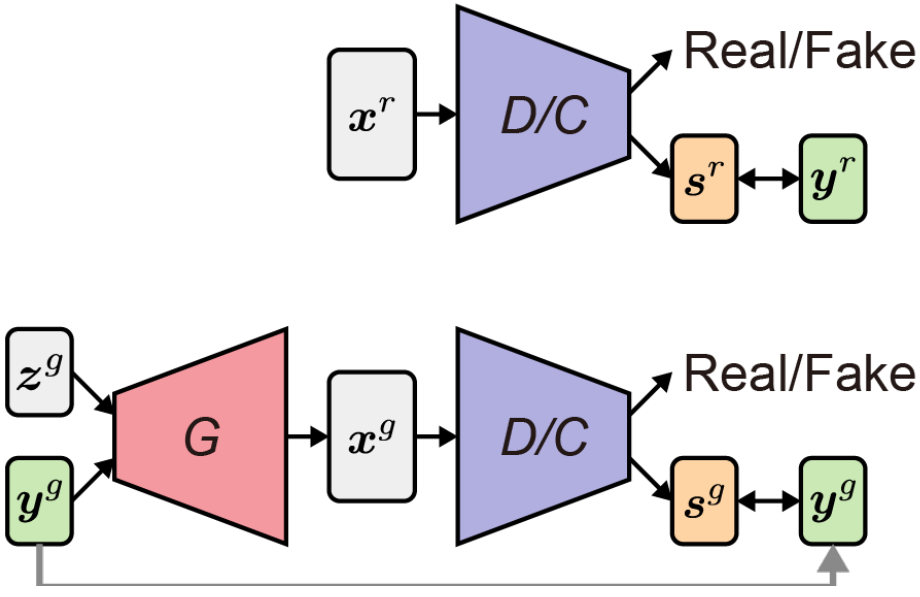
$$D(x, c) \rightarrow \text{score}$$

La plupart du temps, on introduit c dans une branche séparée.

Schéma du cGAN



AC-GAN : *Auxiliary Classifier GAN*



Cas d'application

Soit $\mathcal{D} = (\mathbf{X}, \mathbf{y})$ un jeu de données annoté. On ajoute une branche de sortie au discriminateur : un classifieur auxiliaire.
On définit deux fonctions de coût, la log-vraisemblance pour la source S et celle pour la classe C :

$$L_S = \mathbb{E}[\log \mathbb{P}(S = \text{réelle}|X_{\text{réelle}})] + \mathbb{E}[\log \mathbb{P}(S = \text{fausse}|X_{\text{fausse}}]$$

$$L_C = \mathbb{E}[\log \mathbb{P}(C = c|X_{\text{réelle}})] + \mathbb{E}[\log \mathbb{P}(C = c|X_{\text{fausse}}]$$

Le discriminateur maximise $L_S + L_C$ tandis que le générateur maxmimise $L_C - L_S$.