

Global Report

최적의 운송 및 생성 모델의 기하학적 관점

1. 개요
2. 최적의 대량운송 이론
3. 볼록 geometry_Alexandrov 정리
4. W-GAN의 실험적 비교
5. 검토 및 결론

1. 개요

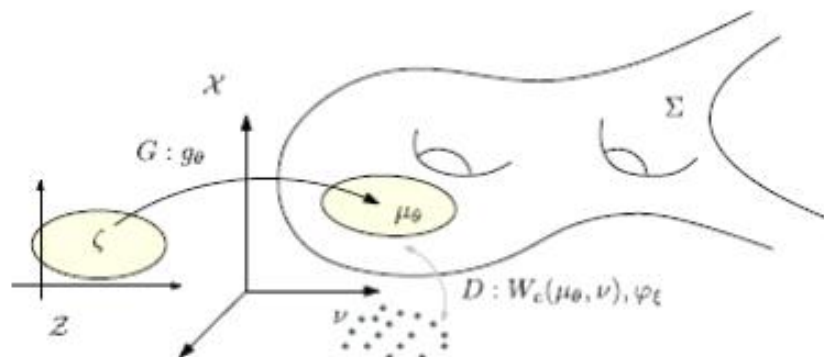
2014년 Goodfellow 등이 제안한 GAN(Generative Adversarial Networks : 생성적 적대 네트워크) 모델은 간단한 분산이론을 통해 주어진 매핑을 학습하는 것을 목표로 한다[1]. GAN 모델은 생성기(G)와 판별기(D)로 구성되며, 모두 DNNs(Deep Neural Networks : 심층 신경망)으로 표현된다. G는 데이터 분산을 캡처하고 샘플을 생성하며, D는 샘플이 아닌 학습 데이터의 확률을 추정한다. 이 연구에서는 생성된 샘플의 성능을 향상시키기 위해 정품 데이터 샘플과 구별될 때까지 측정을 반복한다. 2016년 Zhao 등이 제시한 내쉬 균형(Nash equilibrium) 이론을 기반으로 한 Gequals에 의해 생성된 실제 데이터 분산은 명시적으로 표현할 필요가 없이 샘플을 자동으로 생성하고 실제 데이터 샘플의 양을 줄일 수 있는 많은 장점이 있다[2]. 최근 들어, GAN 모델은 다음과 같은 컴퓨터비전 영역에 널리 적용되면서 폭발적인 관심을 받고 있다.

- 그림의 이미지(Pathak et al., 2016; Yeh et al., 2017; Li et al., 2017b)
- 이미지 슈퍼 해상도(Ledig et al., 2016; Iizuka et al., 2017)
- 의미 분할(Zhu and Xie, 2016; Luc et al., 2016)
- 물체 검출(Radford et al., 2015; Li et al., 2017a; Wang et al., 2017)
- 비디오 예측(Mathieu et al., 2015; Vondrick et al., 2016)
- 이미지 번역(Isola et al., 2016; Zhu et al., 2017; Dong et al., 2017; Liu et al., 2017)
- 3D 비전(Wu et al., 2016; Park et al., 2017)
- 얼굴 편집(Wu et al., 2016; Park et al., 2017) 등

아울러 기계학습(machine learning) 분야에서도 다음과 같이 GAN이 적용되고 있다.

- semi-supervised 학습(Odena, 2016; Kumar et al., 2017; Salimans et al., 2016)
- 클러스터링(Odena, 2016; Kumar et al., 2017; Salimans et al., 2016)
- 앙상블 학습(Odena, 2016; Kumar et al., 2017; Salimans et al., 2016) 등

요약하자면, GAN 모델은 OMT(Optimal Mass Transportation : 최적 대량운송) 이론과 자연스럽게 연결되면서 W-GAN의 대체 교육과정은 최소/최대치에 최적화되어 생성기(G)에서 GAN의 생성 맵(g_θ)은 OMT의 최적 운송 맵과 동일하게 이용되고 있다. $\langle \min_{\theta} \max_{\xi} E_{z \sim \zeta}(\phi_{\xi}(g_{\theta}(z))) + E_{y \sim \nu}(\phi_{\xi}^c(y)) \rangle$ D의 심층 신경망(deep neural network)은 Kantorovich potentials(ϕ_{ξ})의 근사값으로 최대화되는 과정에서 Wasserstein 거리를 계산하고, 매개변수화하여 네트워크(G)는 θ 파라미터를 이용하여 최소화 프로세스에 의해 최적의 운송 맵(g_{θ})을 계산한다. (그림 1 참조)



* 자료 : NaLei, KehuaSu, LiCui, Shing-TungYau, Xianfeng DavidGu, "A geometric view of optimal transportation and generative model", Computer Aided Geometric Design 68 (2019) 1–21, p.2.

[그림 1] W-GAN(Wasserstein-생성적 적대 네트워크) 프레임워크

이 연구의 주요 작업내용을 간단히 요약하면 다음과 같다.

- 볼록한 기하학과 최적의 교통 연결을 기반으로 GAN(생성적 적대 네트워크) 모델링을 위해 최적의 교통지도를 명시적 기하학적 구조를 개발하는 것이다.
- **Theorem3.7**에서 입증된 비용함수 $c(x,y)=h(x-y)$, 볼록함수에서 최적의 판별기를 생성하여 수식으로 기록할 수 있도록 하는 것이다. 이에 판별자와 생성기 간 경쟁이 불필요하며, 계산 아키텍처를 단순화할 수 있다.

※ 정리 3.7 (생성기-판별기 등가) : 주어진 μ 및 컴팩트 도메인 $(\Omega \subset \mathbb{R}^d)$ 은 볼록한 비용 $c(x,y)=h(x-y)$ 에 대한 최적의 전송계획을 생성한다. 이는 고유한 값 $(id, T_{\#})\mu$ 을 연속적으로 제공한다. 더 이상 Kantorovich potential(ϕ)가 존재하지 않을 때 $T(x)=x-(\infty h)-1(\infty \phi(x))$ 로 표현될 수 있다.

- 최적의 대중교통 지도의 기하학적 구조를 사용하는 생성모델에 대한 새로운 프레임워크를 제안하고자 하는 것이다. 이를 위해 개념 증명을 위한 예비실험을 시행한다.

2. 최적의 대량운송 이론

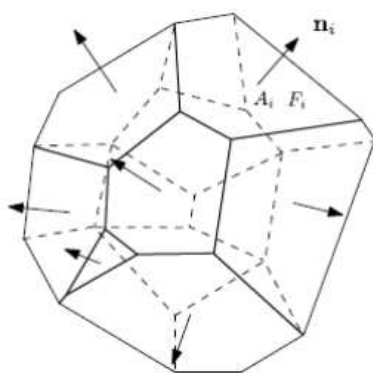
이 연구에서는 실행 가능한 계획의 전제조건, 최적의 Kantorovich potentials의 규칙, 이론의 기술성숙도를 지향하는 엔지니어링 목적을 위한 최적의 대중교통 이론에 대한 간략한 검토를 제공한다. (보다 엄격하고 철저한 수행 관련 내용은 2003년과 2008년 Villani의 제안내용 참조) Theorem3.7은 Wasserstein distance(Kantorovich potential과 동등한)와 최적의 교통지도(Brenier potential과 동등한)의 본질적인 관계를 보여주고 있다. 이는 최적의 판별기가 알려지면 생성기가 자동으로 얻어진다는 것을 입증하고 있어 생성기(G)와 판별기(D) 간 경쟁은 불필요하다. 측정수량을 보존하면서 도메인 간 운송비용을 최소화하는 지도를 찾는 문제는 2012년에 Bonnotte에 의해 처음 연구되었다. 여기서 X와 Y의 확률측정값은 두 개의 미터법 공간을 μ 와 ν 로 제공하며, X와 Y가 동일한 측정값이라고 가정할 때 $\int d\mu = \int d\nu$ 로 계산할 수 있다. 여기서, Definition 3.1(Push-forward measure)은 맵 $T:X \rightarrow Y$ 로 주어지며, 측정 가능한 세트의 경우 $B \subset Y$ 가 되어 (식 1)과 같이 계산할 수 있다.

$$\mu(T^{-1}(B)) = \nu(B) \dots\dots\dots (1)$$

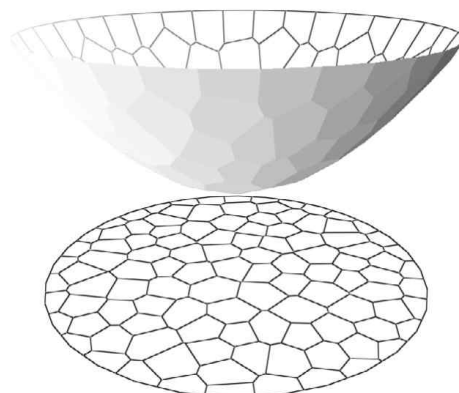
(식1)에서, ν 는 T에 의한 μ 의 푸시 포워드로서 $\nu=T_{\#}\mu$ 로 계산할 수 있다.

3. 볼록 geometry_Alexandrov 정리

Minkowski는 사용자영역에 대한 정의와 convex polytope에 대한 고유성을 증명한다. (그림 2의 왼쪽 프레임 참조)



(a) Minkowski 정리



(b) Alexandrov 정리

- * 자료 : NaLei, KehuaSu, LiCui, Shing-TungYau, Xianfeng DavidGu, “A geometric view of optimal transportation and generative model”, Computer Aided Geometric Design 68 (2019) 1–21, p.8.

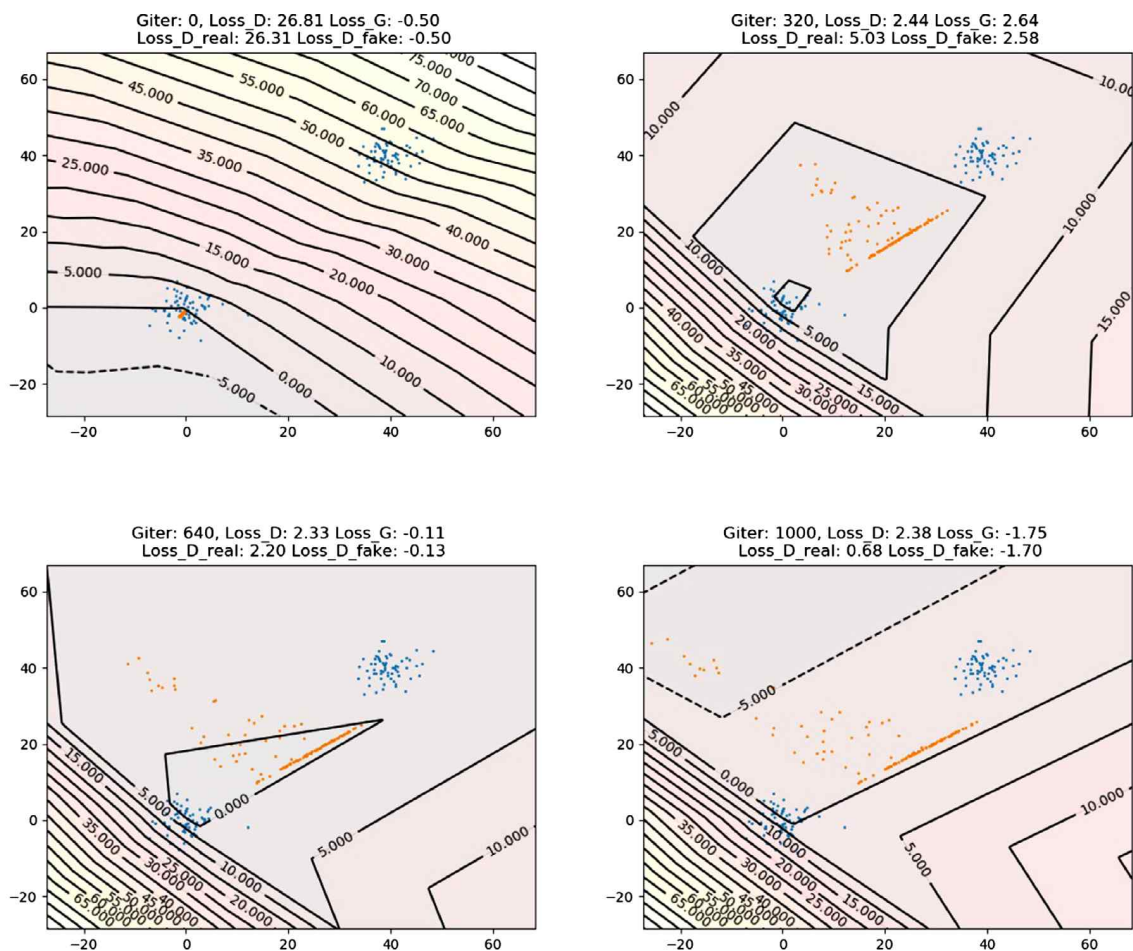
[그림 2] 정규화된 정상영역을 갖는 볼록한 polytopes를 위한 Minkowski 및 Alexandrov 정리

※ 정리 4.1(Minkowski) : $n_1, \dots, n_k$ 는 R^n 및 θ_i 에 걸쳐 있는 단위벡터이며, k 차원-1면(F_i)을 가진 컴팩트한 볼록 폴리토프 P_θ R^n 이 존재한다. F_k 와 n_i 는 F_i 에 대한 바깥쪽 법선벡터이고 F_i 의 부피는 i 이다. 이 값(P)은 병렬변환까지 고유하다.

변형된 Minkowski's proof를 갖는 폴리토프 검색 알고리즘은 무한 볼록 폴리토프에 대한 Minkowski 정리(A.D. Alexandrov 연구팀 제안)를 이용하여 해결하였다[3].

4. W-GAN의 실험적 비교

첫 번째 실험에서는 2017년 Arjovsky 등이 제안한 W-GANs를 사용하여 혼합 가우시안 분포를 학습하였다[4]. (그림 3 참조)



- * 자료 : NaLei, KehuaSu, LiCui, Shing-TungYau, Xianfeng DavidGu, “A geometric view of optimal transportation and generative model”, Computer Aided Geometric Design 68 (2019) 1–21, p.16.

[그림 3] 가우시안 혼합분산(Gaussian mixture distribution)을 이용한 WGAN 학습

■ 데이터 집합

- 데이터(θ)의 분포는 2d 평면의 포인트 클라우드로 설명할 수 있음

- 128개의 데이터 포인트를 2개의 가우시안 분포($N(\mu_k, \sigma_k^2)$, $k=1, 2$)의 실제 데이터로 샘플링하였음
- 잠재공간(Z)은 2d 평면 $[1k, 3k] \times [1k, 3k]$ 에 직각이며, 입력분포는 Z에 균일한 분포(θ)를 가짐
- 데이터 분포(θ)를 근사화하기 위해 θ 에서 128개의 샘플을 생성하였음

■ 네트워크 구조

- 판별자 구조는 FC가 완전히 연결된 층을 나타내는 2층(2×10 FC)-ReLU-(10×1 FC) 네트워크임
- 입출력 변수는 모두 2이며, 숨겨진 레이어의 노드 수는 10개임
- 생성기의 구조는 6층
 - (2×10 FC)-ReLU
 - (10×10 FC)-ReLU
 - (10×10 FC)-ReLU
 - (10×10 FC)-ReLU
 - (10×10 FC)-ReLU
 - (10×2 FC) 네트워크

■ 딥 러닝 프레임워크 및 하드웨어

- 딥 러닝 도구로 PyTorch를 사용
- 데이터셋이 작기 때문에 CPU에서 실험 수행
- 48코어와 193 GBRAM 클러스터에서 실험을 수행
- 실행 중인 데이터코드는 500 MBRAM 미만의 1코어만 소비하므로 PC에서 실행할 수 있음

5. 검토 및 결론

이 연구에서는 불록한 형상을 운송경로로 연결하여 최적의 운송경로 생성 모델을 분석하였다. 기본적으로 판별자가 Wasserstein distance 또는 이에 상응하는 Kantorovich potential(ϕ_k)을 계산하는 것이다. 생성기는 운송 맵(g_θ)을 계산한다. L_2 거리, ϕ_θ 및 g_θ 와 같은 운송비용을 선택하여 폐쇄된 형태로 최적의 운송경로를 학습하였다. 이로써 최적화 요구사항을 반영한 교통지도를 계산하는 다양한 유형의 생성 모델을 설계할 수 있었다. 최적의 교통지도를 계산하는 방법으로는 2003년의 Knothe-Rosenblatt 맵이 제시된바 있다. 2018년 Peyré/Cuturi inPeyré/Cuturi 등이 제시한 sink-horn 방식은 컴퓨팅 효율을 크게 향상시켰다. 향후에는 이러한 방향을 탐색하고 제안된 모델을 대규모로 구현할 필요가 있다.

이 연구에서는 OMT(Optimal Mass Transportation) 이론과 기하학 사이의 본질적인 관계를 기반으로 한 GAN(Generative Adversarial Networks) 모델의 기하학적 해석을 제시하였다. 이를 위해 GAN 모델의 최적 운송 뷰를 사용하여 운송거리 등을 계산할 수 있는 운송 맵(transportation map)을 제시하였다. 이 연구결과는 국내 대도시의 도심, 고속도로 및 자동차 전용 도로에서의 원활한 교통흐름을 위한 정책에 벤치마킹 자료로 활용할 수 있을 것이다.

[참고문헌]

- [1] Goodfellow, Ian, Pouget-Abadie, Jean, Mirza, Mehdi, Xu, Bing, Warde-Farley, David, Ozair, Sherjil, Courville, Aaron, Bengio, Yoshua, 2014. Generative adversarial nets. In: Advances in Neural Information Processing Systems, pp.2672-2680.
- [2] Zhao, Junbo, Mathieu, Michael, LeCun, Yann, 2016. Energy-based generative adversarial network. arXiv preprint arXiv:1609.03126.
- [3] Alexandrov, A.D., 2005. Convex Polyhedra. Translated from the 1950 Russian edition by N.S.

Dairbekov, S.S. Kutateladze and A.B. Sossinsky. Springer Mono-graphs in Mathematics. Springer-Verlag, Berlin.

- [4] Arjovsky, Martin, Chintala, Soumith, Bottou, Léon, 2017. Wasserstein generative adversarial networks. In: International Conference on Machine Learning, pp.214-223.

<원문제목> A geometric view of optimal transportation and generative model

<원문출처> Computer Aided Geometric Design 68 (2019) 1-21