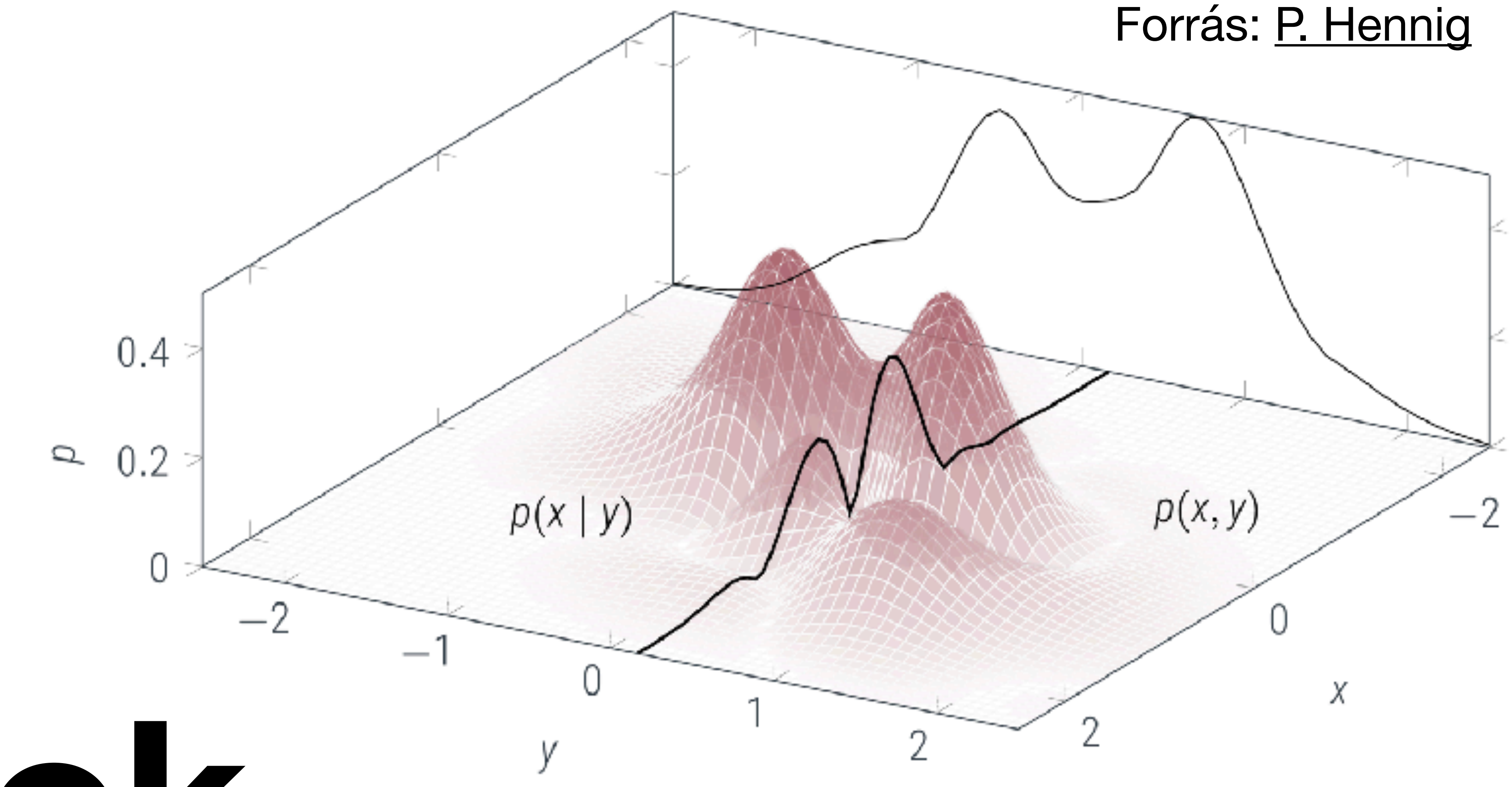
Forrás: P. Hennig



5. Előadás: Matematikai Alapok

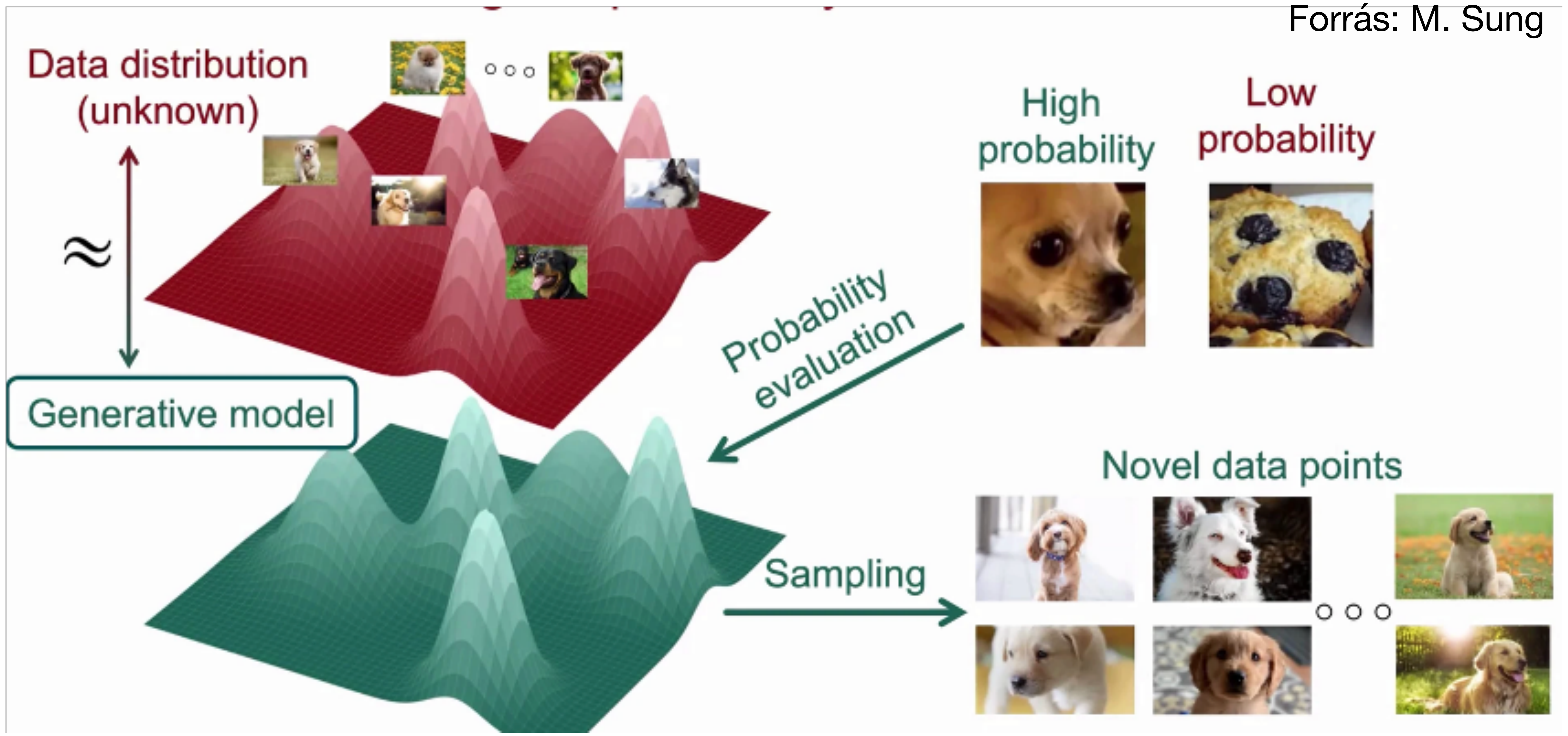
Generatív AI és Inverz Módszerek a Képszintézisben

BME-VIK IIT, 2026

Dr. Vaitkus Márton

A Generatív Modellezés Felé…

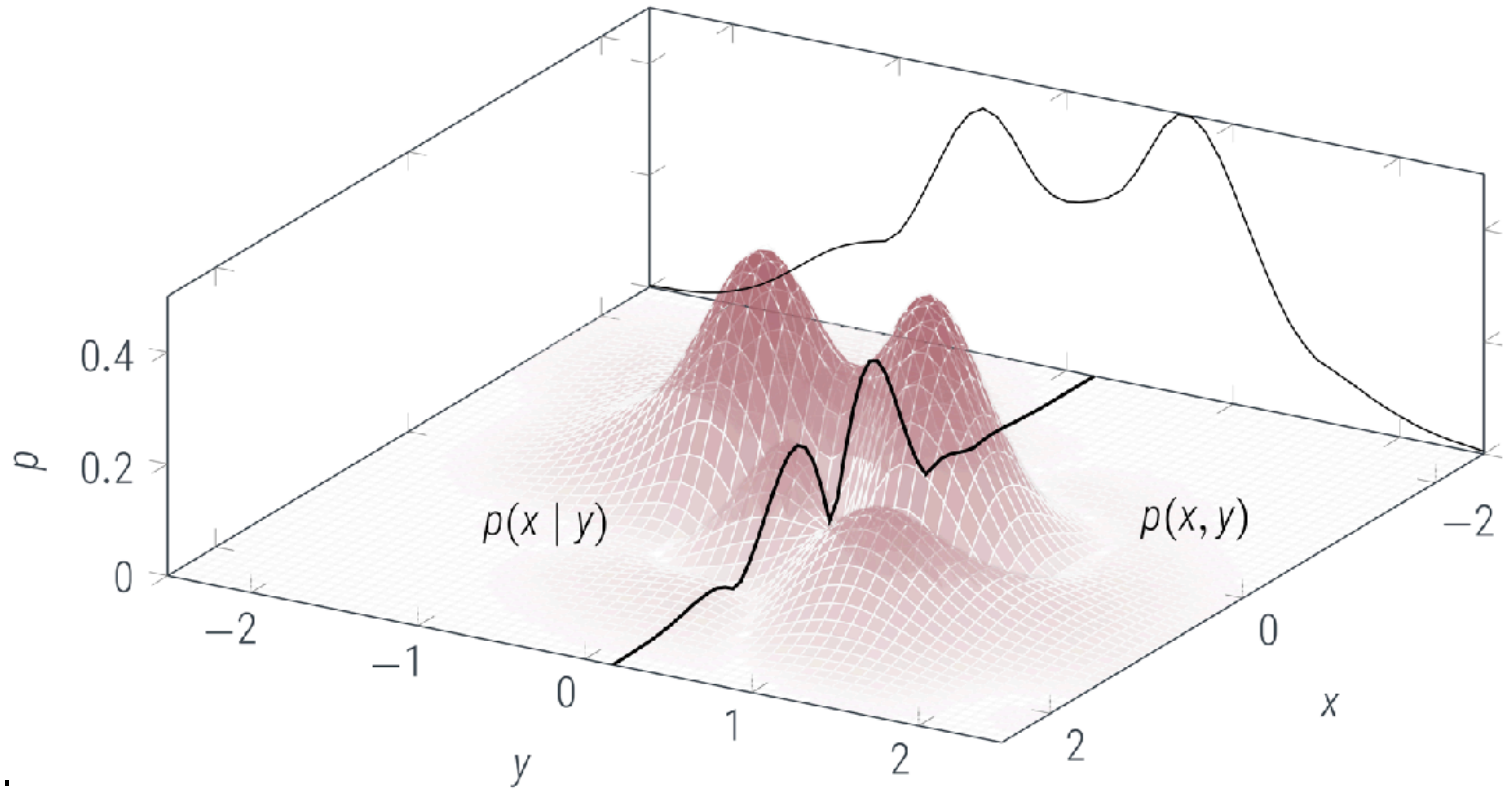
Forrás: M. Sung



Generatív modell: adathalmazok eloszlását modellezi & új mintákat generál
Hogyan modellezünk és mintavételezünk általános eloszlásokat?

Valószínűségi eloszlások
Alapok

- Valószínűségi eloszlás (PDF):
  - $0 \leq p(x) \leq 1, \forall x \in \Omega$
  - $\int_{\Omega} p(x)dx = 1$ ☠
- Marginális valószínűség:
  - $p(x) = \int p(x,y)dy$ ☠
- Feltételes valószínűség (láncszabály):
  - $p(x,y) = p(y \mid x) \cdot p(x) = p(x \mid y) \cdot p(y)$



Forrás: P. Hennig

Valószínűségi eloszlások

Bayes formula

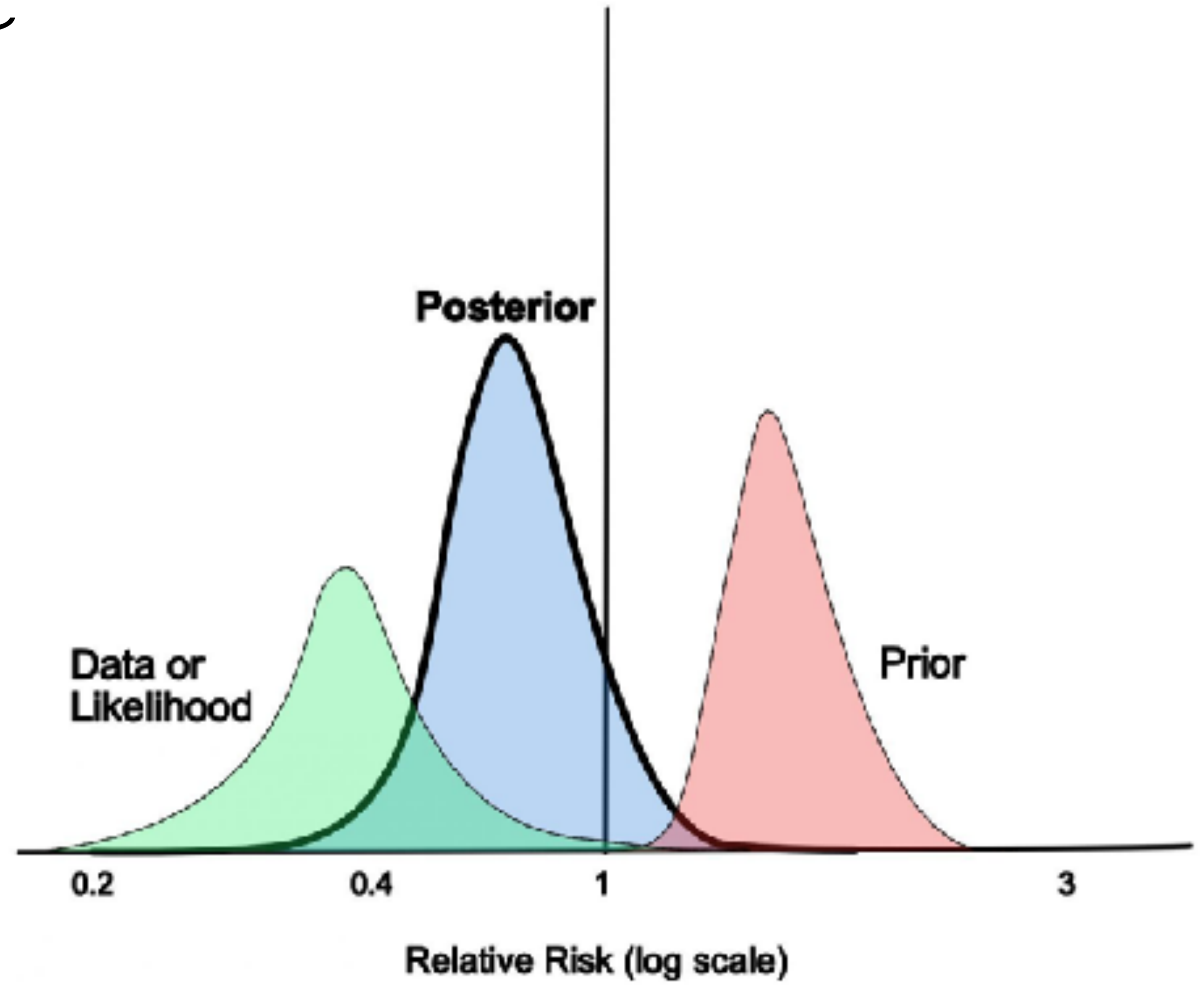
- A feltételes valószínűségek megfordíthatóak — **Bayes formula**:

Bayes következtetés / inferencia

$$\underbrace{p(y \mid x)}_{\text{Posterior}} = \frac{p(x \mid y)\ \overbrace{p(y)}^{\text{Prior}}}{p(x)} = \frac{p(x \mid y)p(y)}{\underbrace{\int p(x \mid Y)p(Y)dY}_{\text{☠}}}$$

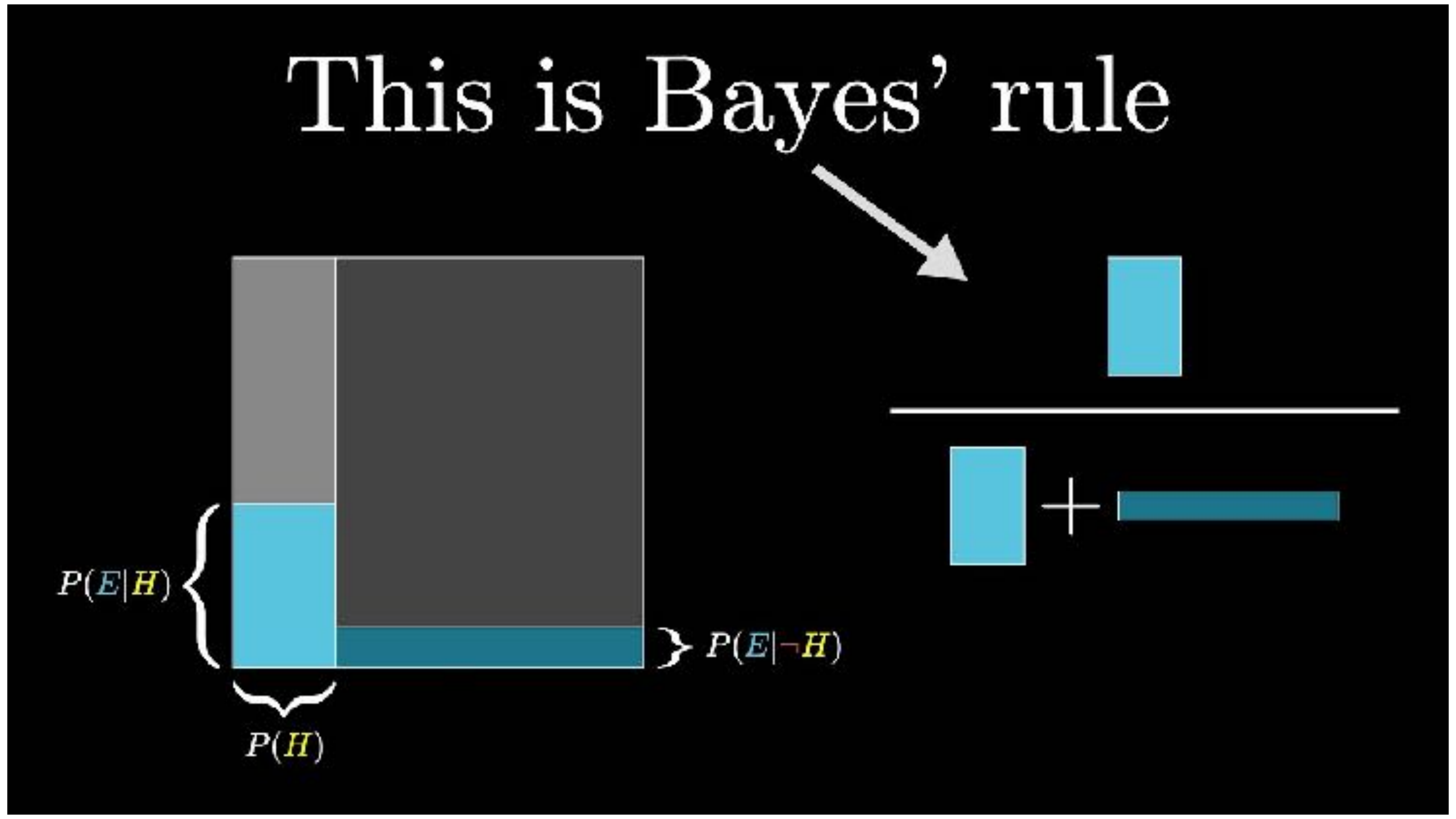
P(A|B) = [P(A)*P(B|A)]/P(B), all the rest is commentary.

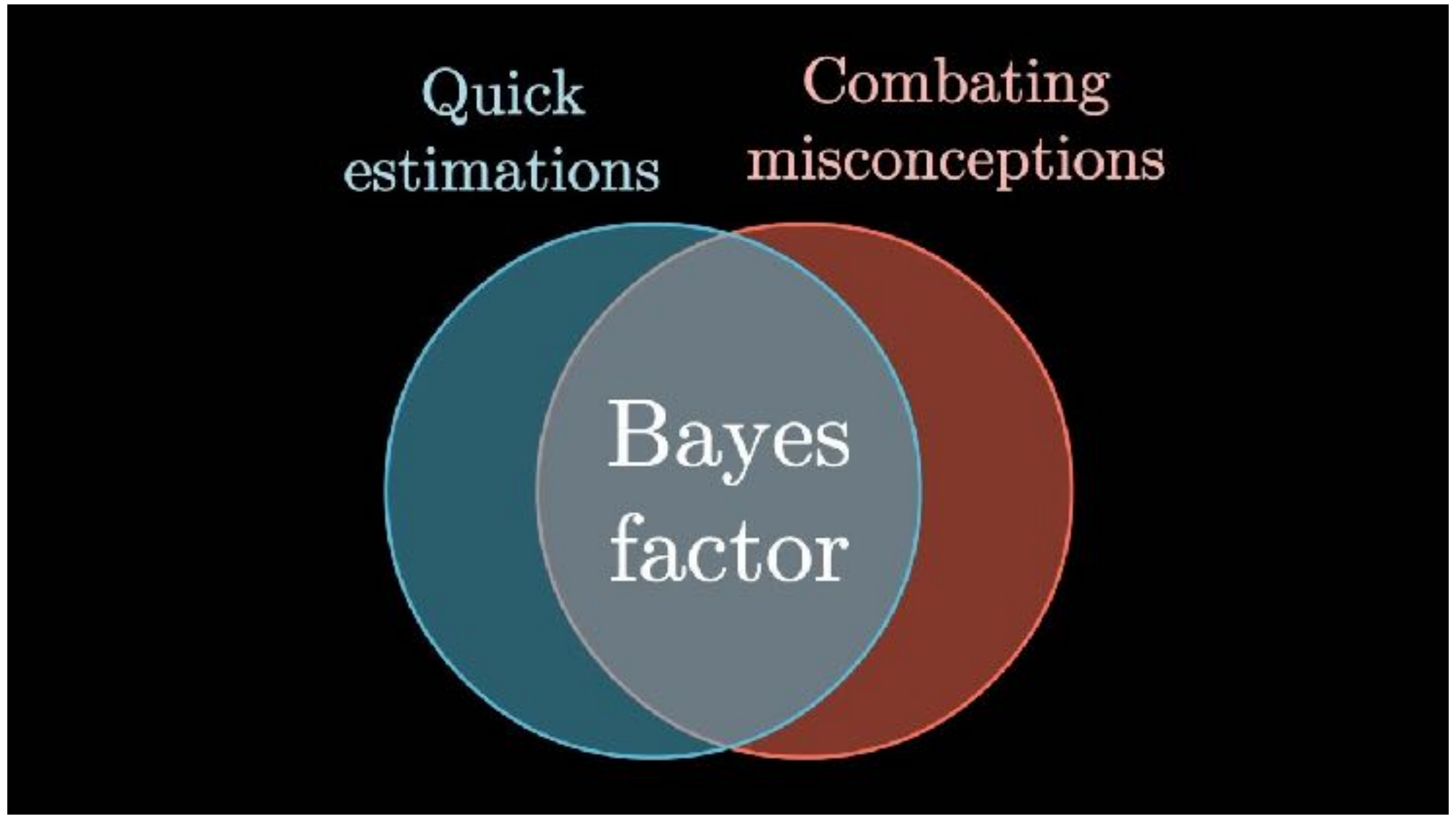
De legyünk óvatosak:
nem biztos, hogy ki is tudjuk számolni!



Valószínűségi eloszlások

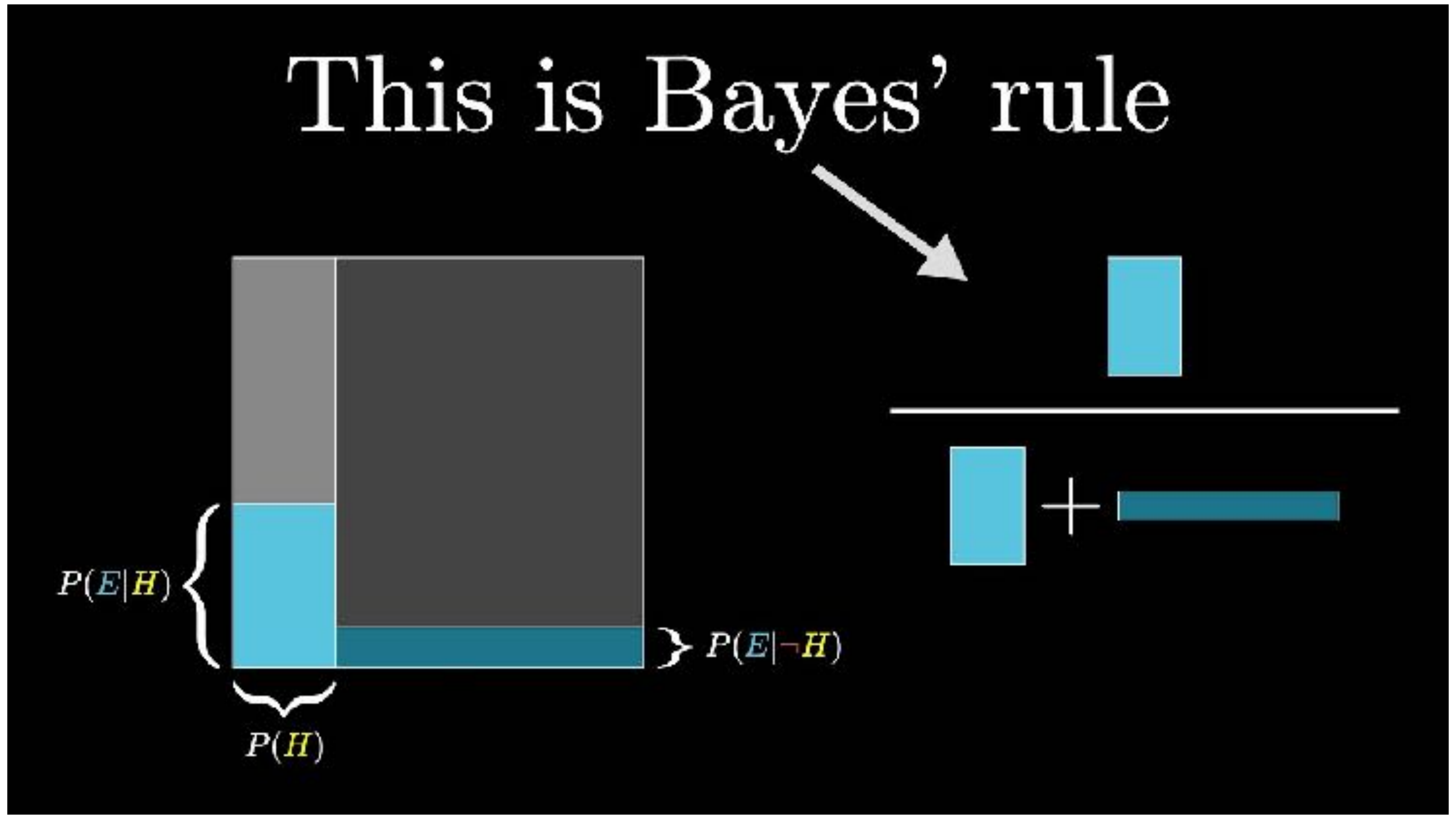
Bayes formula — Video ajánló

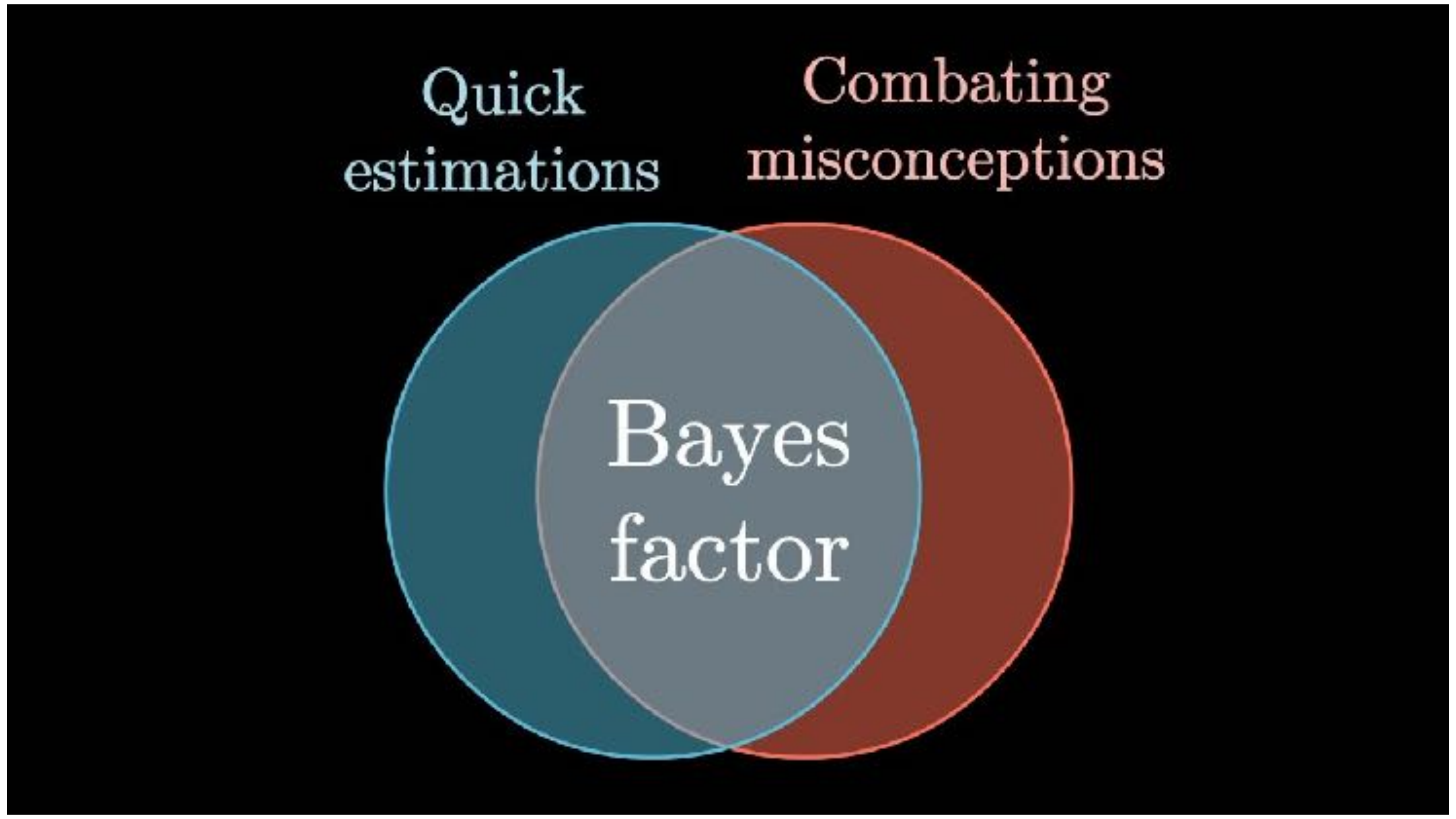




Valószínűségi eloszlások

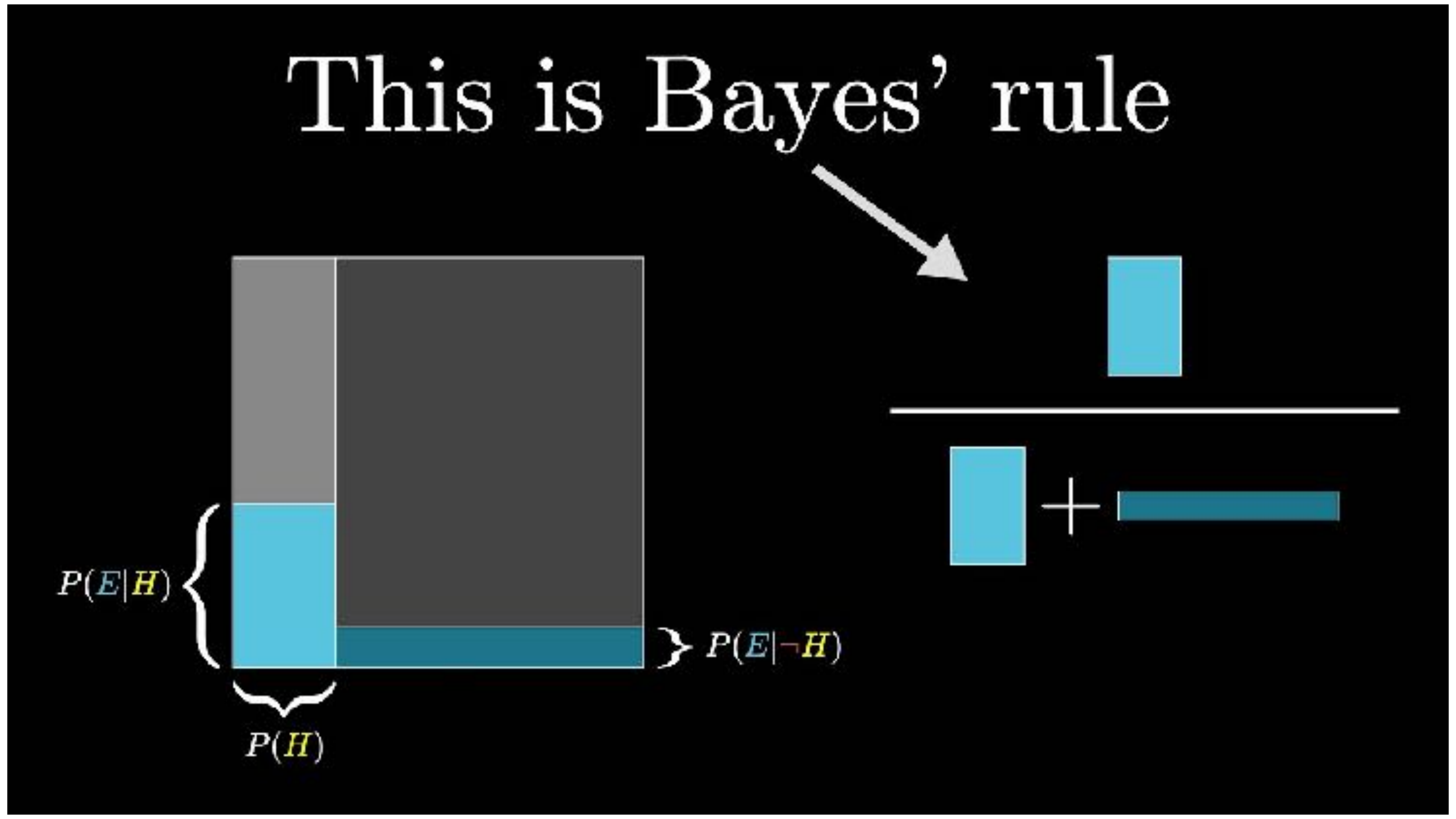
Bayes formula — Video ajánló

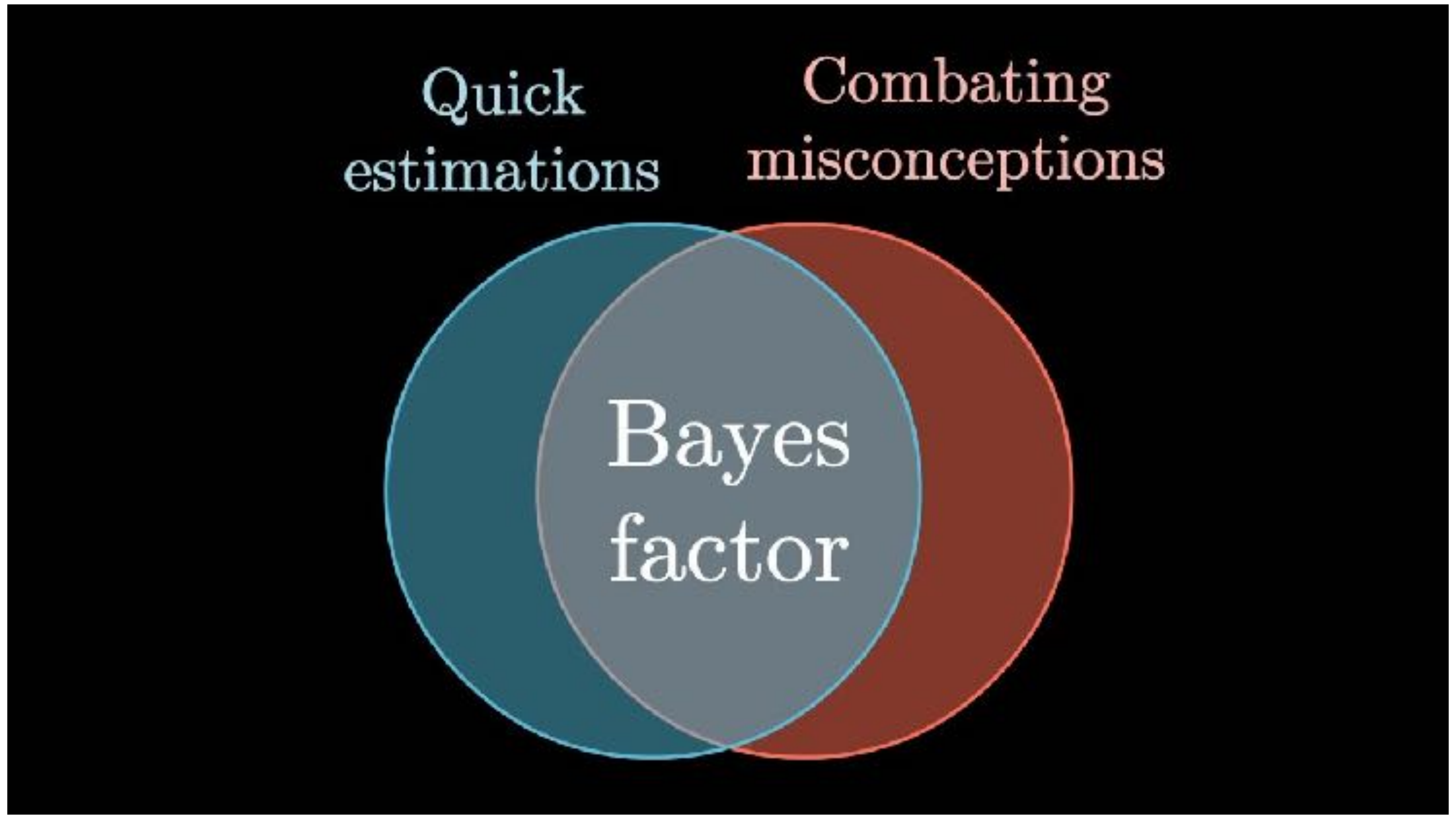




Valószínűségi eloszlások

Bayes formula — Video ajánló





Valószínűségi Eloszlások
Statisztikák

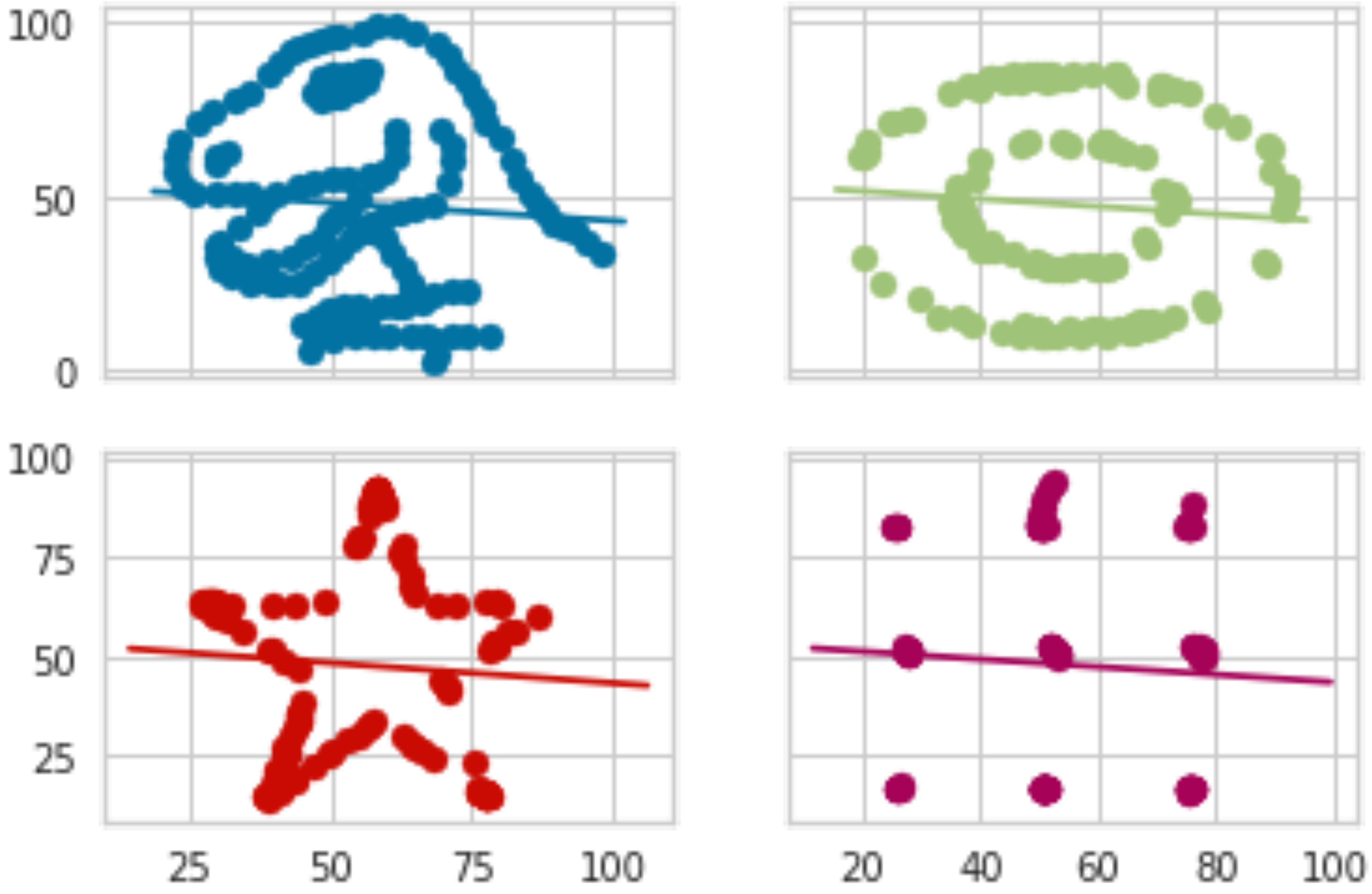
- **Várható érték**:

Konvex kombináció!

$$\mathbb{E}_{p(x)}(f(x)) = \int_{\Omega} f(x)p(x)dx$$

- **Szórás** (2. momentum):

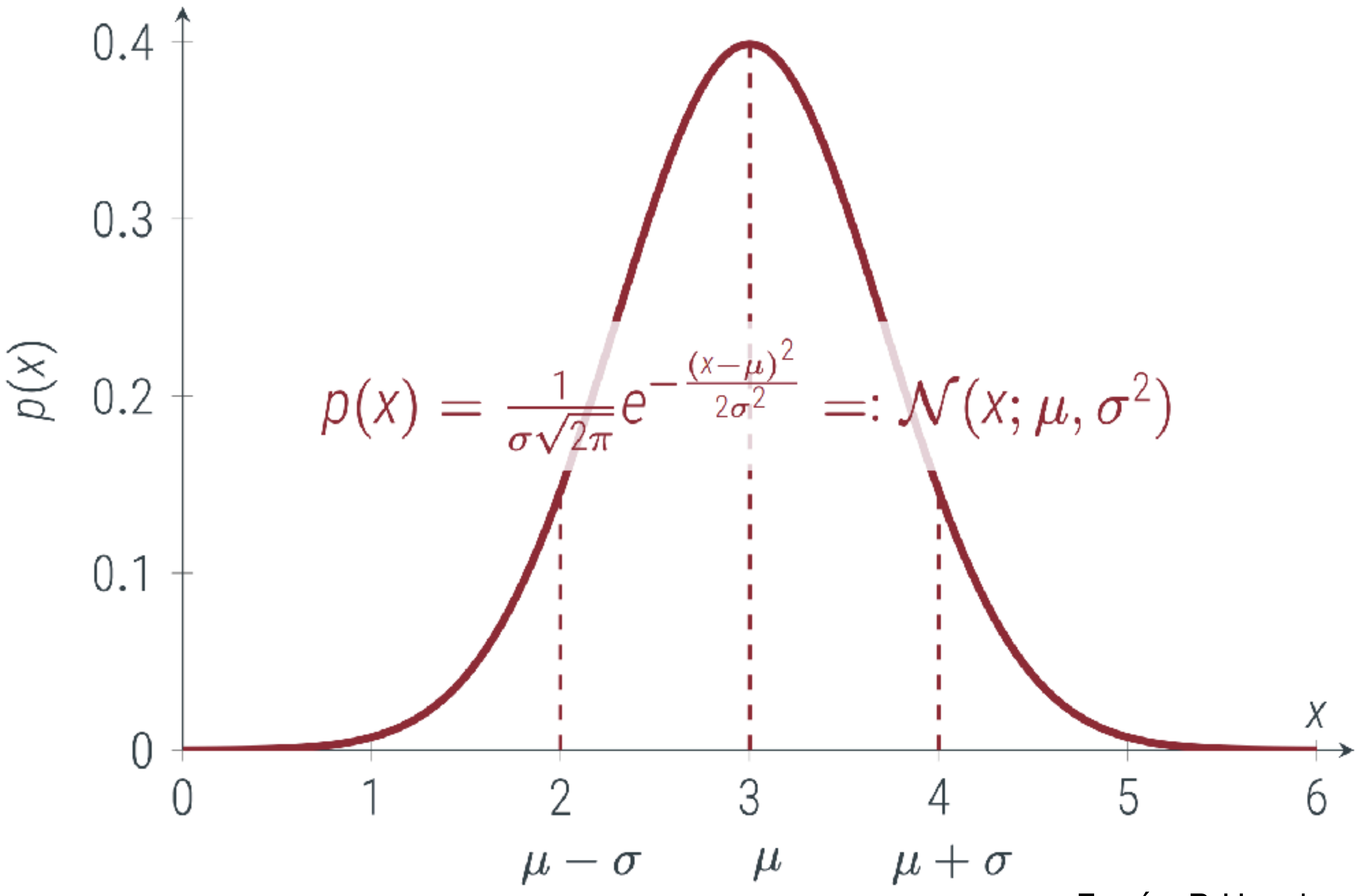
$$\mathrm{Var}(x) = \mathbb{E}_{p(x)}[(x - \mathbb{E}_{p(x)}[x])^2]$$



Egyforma átlag és szórás!
Ugyanolyan illeszkedő egyenes!

Valószínűségi Eloszlások

Gauss / Normális eloszlások — 1-D



Forrás: P. Hennig

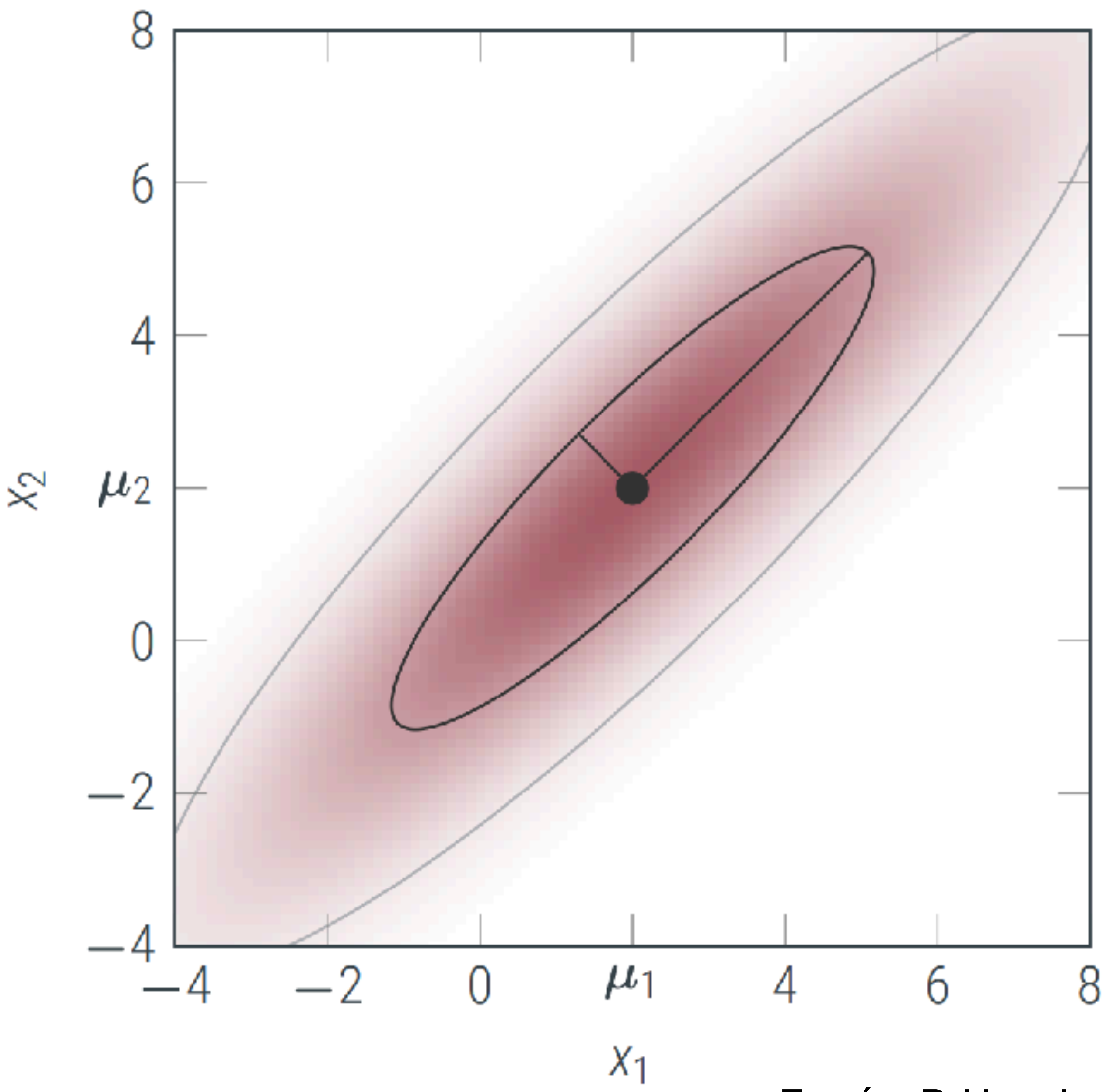
μ Várható érték / Átlag

σ^2 Variancia / Szórásnégyzet

σ Szórás / Standard deviancia

Valószínűségi Eloszlások

Gauss / Normális eloszlások — N-D



Forrás: P. Hennig

$$\mathcal{N}(x;\boldsymbol{\mu},\Sigma) = \frac{1}{(2\pi)^{n/2}|\Sigma|^{1/2}} \exp\left(-\underbrace{\frac{1}{2}(x-\boldsymbol{\mu})^{\intercal}\Sigma^{-1}(x-\boldsymbol{\mu})}_{\text{Kvadratikus függvény!}}\right)$$

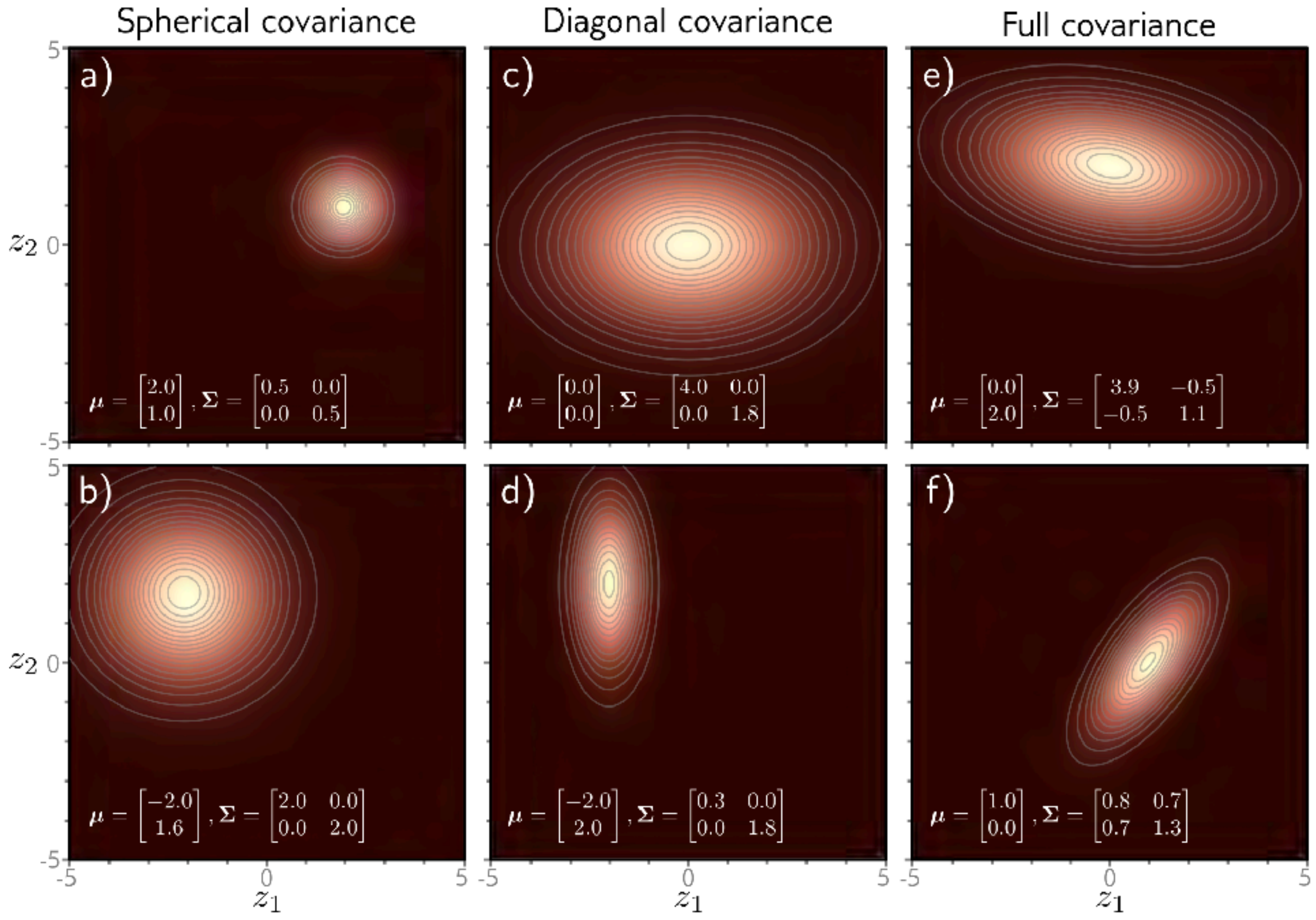
$\mu \in \mathbb{R}^N$ Várható érték / Átlag

$\Sigma \in \mathbb{R}^{N\times N}$ Kovarianciamátrix

(Szimmetrikus, + definit)

Valószínűségi Eloszlások

Gauss / Normális eloszlások — N-D



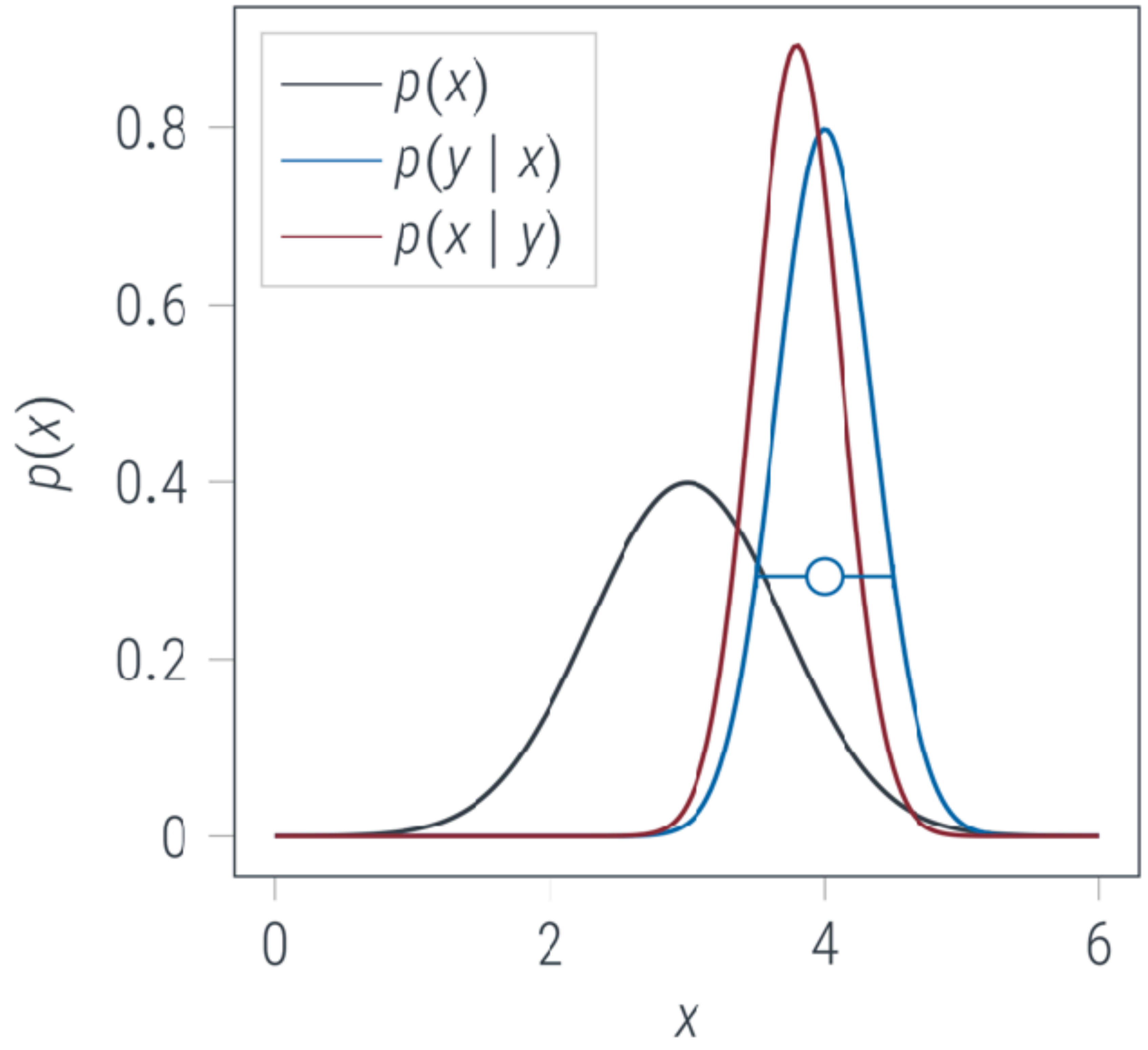
Forrás: S.J.D. Prince

Konstans szintfelületek:
N-dim. **ellipszoidok**
Főtengelyek: Σ sajátértékei/vektorai

Valószínűségi Eloszlások

Gauss kalkulus

Forrás: P. Hennig

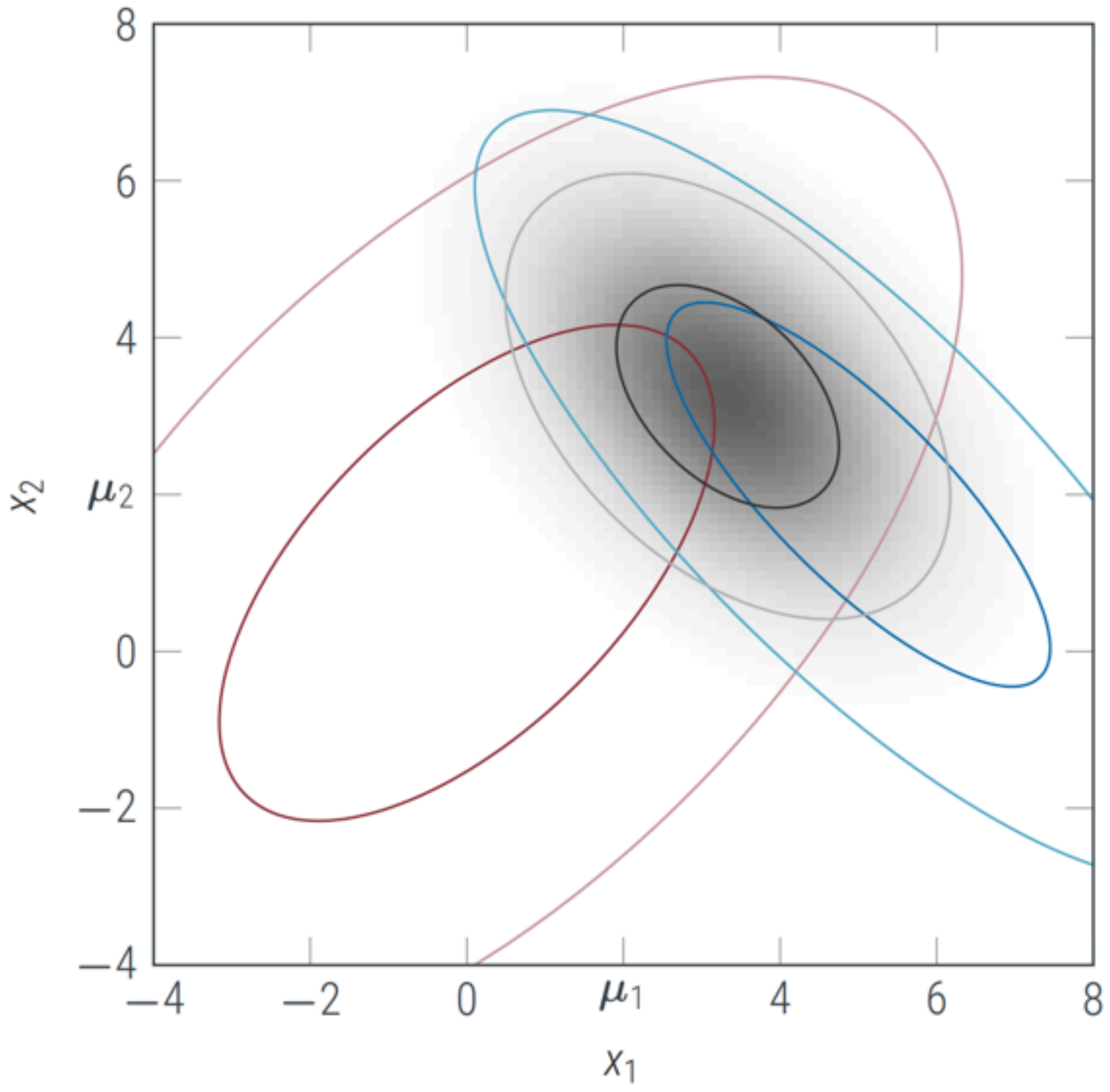


Let

$$p(x) = \mathcal{N}(x; \mu, \sigma^2)$$
$$p(y \mid x) = \mathcal{N}(y; x, \nu^2)$$

Then

$$\begin{aligned} p(x \mid y) &= \frac{p(x)p(y \mid x)}{\int p(x)p(y \mid x)\,dx} \\ &= \mathcal{N}(x; m, s^2), \text{ with} \\ s^2 &:= \frac{1}{\sigma^{-2} + \nu^{-2}} \\ m &:= \frac{\sigma^{-2}\mu + \nu^{-2}y}{\sigma^{-2} + \nu^{-2}} \end{aligned}$$



Gauss eloszlások szorzata Gauss eloszlású!

Valószínűségi Eloszlások

Gauss kalkulus

Forrás: P. Hennig

- products of Gaussians are Gaussians

$$\mathcal{N}(x; a, A)\mathcal{N}(x; b, B)$$
$$= \mathcal{N}(x; c, C)\mathcal{N}(a; b, A + B)$$
$$C := (A^{-1} + B^{-1})^{-1} \quad c := C(A^{-1}a + B^{-1}b)$$

- linear projections of Gaussians are Gaussians

$$p(z) = \mathcal{N}(z; \mu, \Sigma)$$
$$\Rightarrow \quad p(Az) = \mathcal{N}(Az, A\mu, A\Sigma A^\intercal)$$

- marginals of Gaussians are Gaussians

$$\int \mathcal{N}\left[\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}; \begin{pmatrix} \mu_x \\ \mu_y \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \Sigma_{xx} & \Sigma_{xy} \\ \Sigma_{yx} & \Sigma_{yy} \end{pmatrix}\right] dy = \mathcal{N}(x; \mu_x, \Sigma_{xx})$$

- (linear) conditionals of Gaussians are Gaussians

$$p(x \mid y) = \frac{p(x, y)}{p(y)}$$
$$= \mathcal{N}\left(x; \mu_x + \Sigma_{xy}\Sigma_{yy}^{-1}(y - \mu_y), \Sigma_{xx} - \Sigma_{xy}\Sigma_{yy}^{-1}\Sigma_{yx}\right)$$

Bayesian inference becomes linear algebra

If $p(x) = \mathcal{N}(x; \mu, \Sigma)$ and $p(y \mid x) = \mathcal{N}(y; A^\intercal x + b, \Lambda)$, then

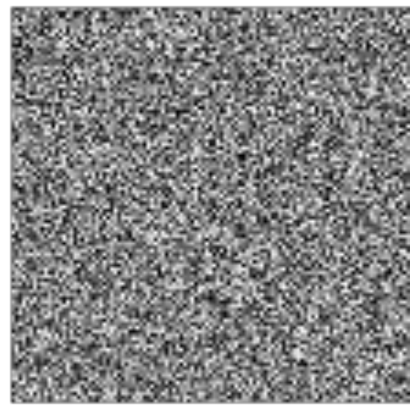
$$p(B^\intercal x + c \mid y) = \mathcal{N}[B^\intercal x + c; B^\intercal \mu + c + B^\intercal \Sigma A(A^\intercal \Sigma A + \Lambda)^{-1}(y - A^\intercal \mu - b), B^\intercal \Sigma B - B^\intercal \Sigma A(A^\intercal \Sigma A + \Lambda)^{-1} A^\intercal \Sigma B]$$

Gauss kalkulus = lineáris algebra!

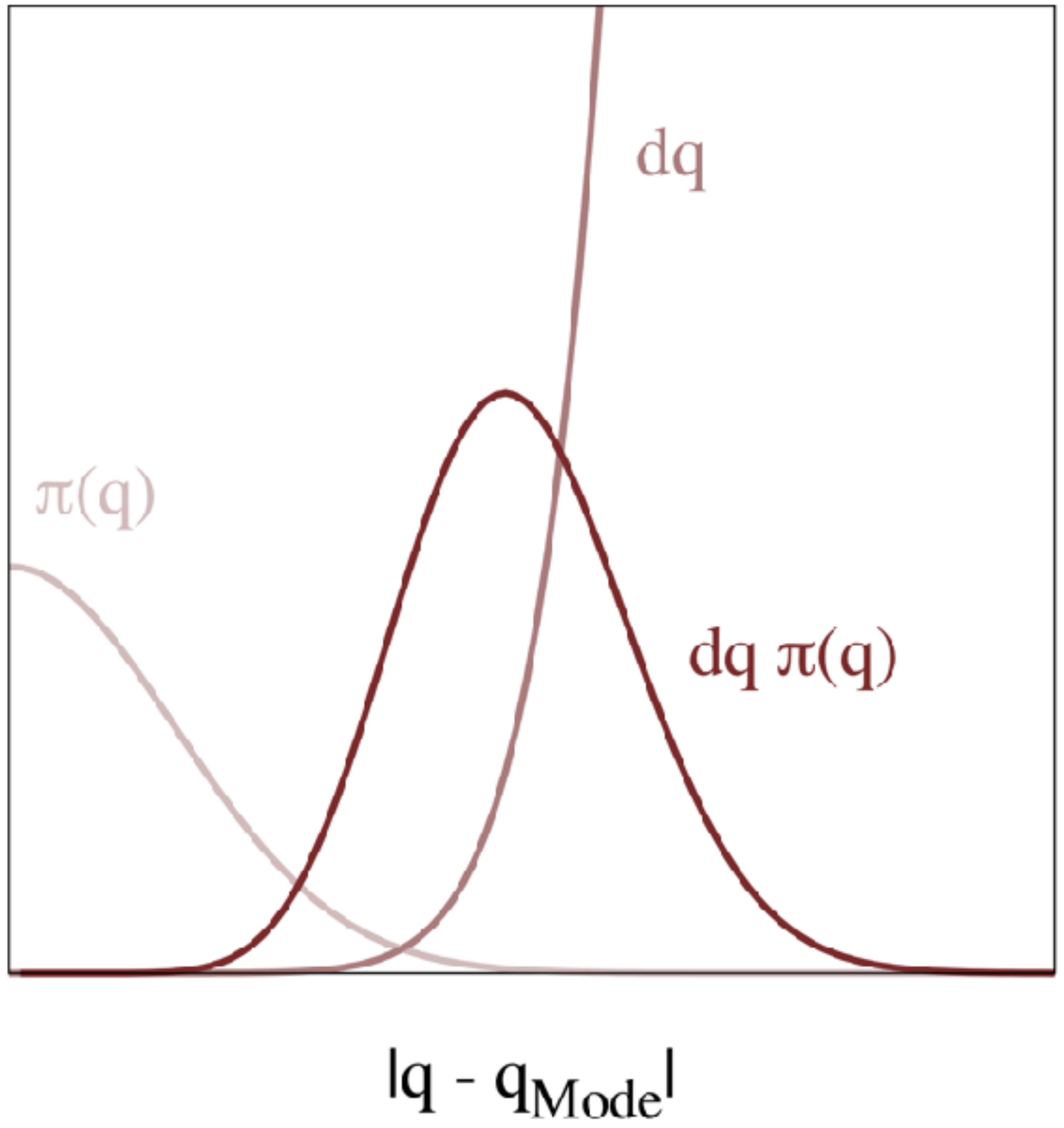
Valószínűségi Eloszlások

Egy kis intuíció

- Hol található egy N-dimenziós (pl. Normális) eloszlás “tömegének” legnagyobb része?
- Nem az eloszlás maximuma körül, hanem attól kb. $\sqrt{N}$ szórásnyi távolságra!
    - N-D térfogat exponenciálisan nő!
- Hogy néz ki egy N-dimenziós Gaussi eloszlásból vett minta?



Forrás: M. Betancourt

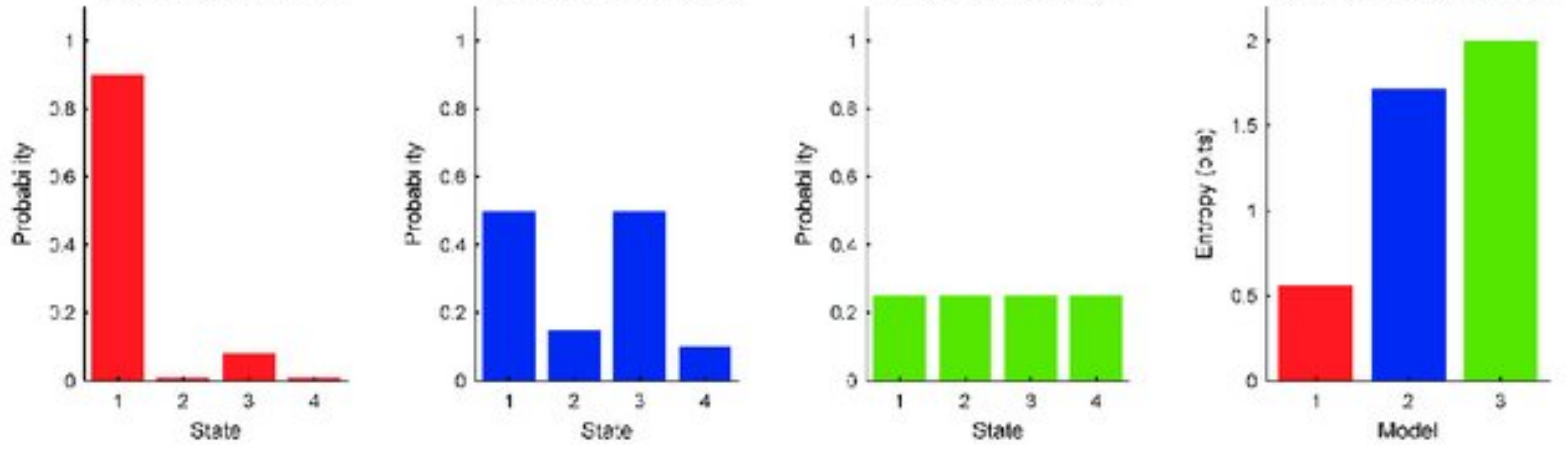


Valószínűségi Eloszlások
Entrópia

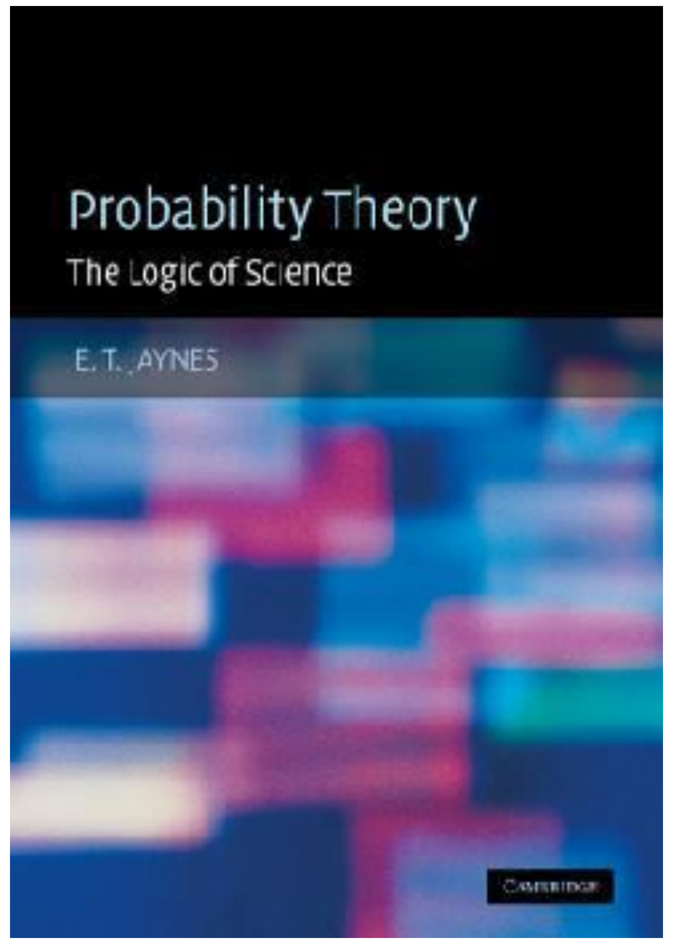
- Meglepetés/ optimális bitszám: $b_{p_i} = \log \frac{1}{p_i} = -\log p_i$

Belátható, hogy csak a log függvény lehet!

- **<u>Entrópia</u>** — várható bitszám: $H(p) = \sum_i p_i b_{p_i} = -\sum_i p_i \log p_i$



"Maximum Entrópia" elve [Jaynes, 1957]



Valószínűségi Eloszlások

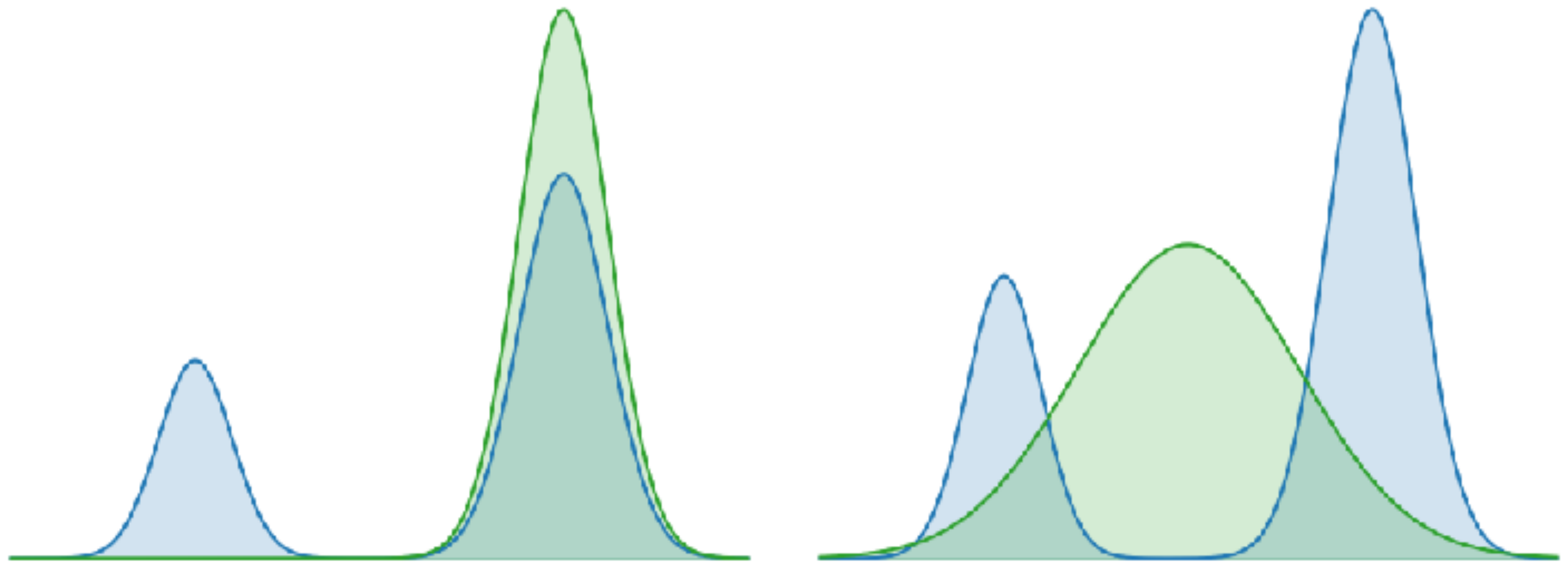
Eloszlások összehasonlítása

- Kereszt-entrópia: $H(p, q) = -\sum_i p_i \log q_i$
- **<u>Relatív entrópia / Kullback-Leibler divergencia:</u>**

$$D_{KL}(p||q) = H(p, q) - H(p) = -\sum_i p_i \log \frac{p_i}{q_i}$$

Nem szimmetrikus "távolság"

- $D_{KL}(p||q) \geq 0$
- $D_{KL}(p||q) \neq D_{KL}(q||p)$!!!



$D_{KL}(p||q) \rightarrow \min$ $D_{KL}(q||p) \rightarrow \min$

Valószínűségi Eloszlások
Mintavételezés

- Egyenletes (uniform) eloszlásokból "könnyű" mintavételezni (véletlenszám generátor, **RNG**)
- Hogyan tudunk mintavételezni *általános* eloszlásokból?

$$\boxed{x \sim p(x)}$$

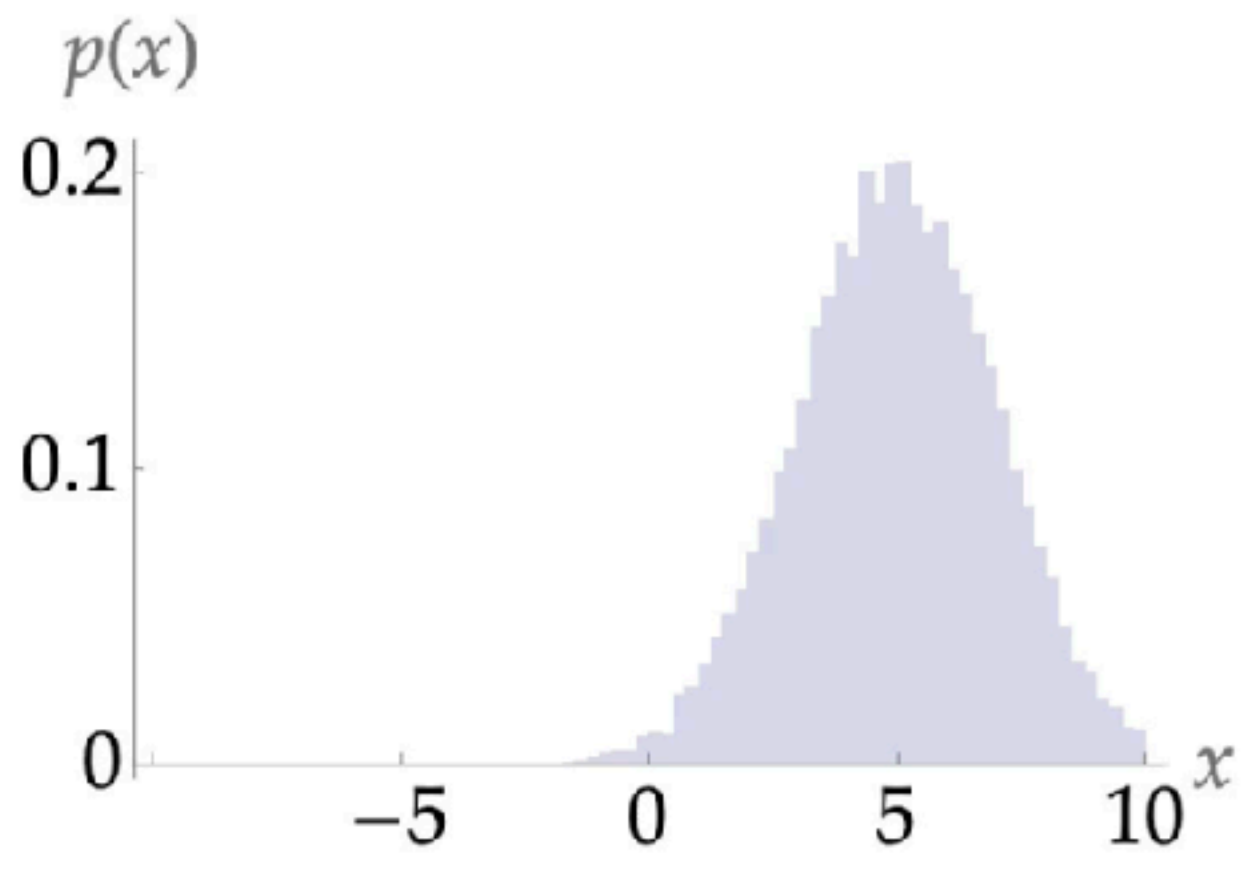
Valószínűség eloszlások

Mintavételezés — Normális eloszlás

- 1-D Gauss eloszlás: **Box-Müller transzformáció**
- N-D Gauss: N db 1D mintából

Forrás: K. Crane

```
def SampleNormal( μ, σ ):
    u = uniform(0,1) * 2*pi
    v = uniform(0,1)
    return σ*sqrt(v)*cos(u) + μ
```



Valószínűségi eloszlások

Mintavételezés — Inverzió

Forrás: K. Crane

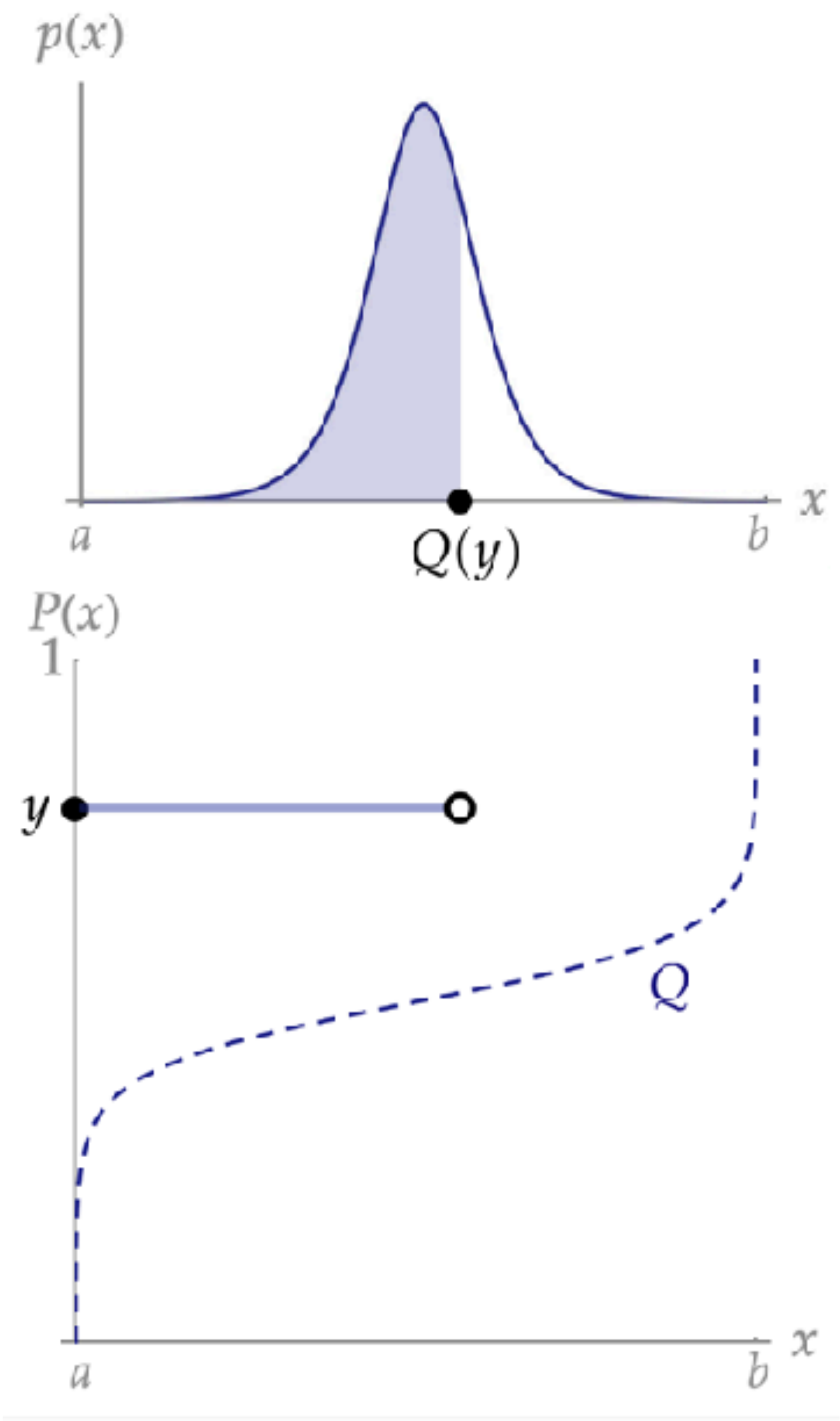
- 1. Uniform eloszlással mintavételezünk [0,1]-ből ($y \sim \mathcal{U}([0,1])$)
- 2. Kiszámítjuk az eloszlás kumulatív eloszlás függvényét (CDF):

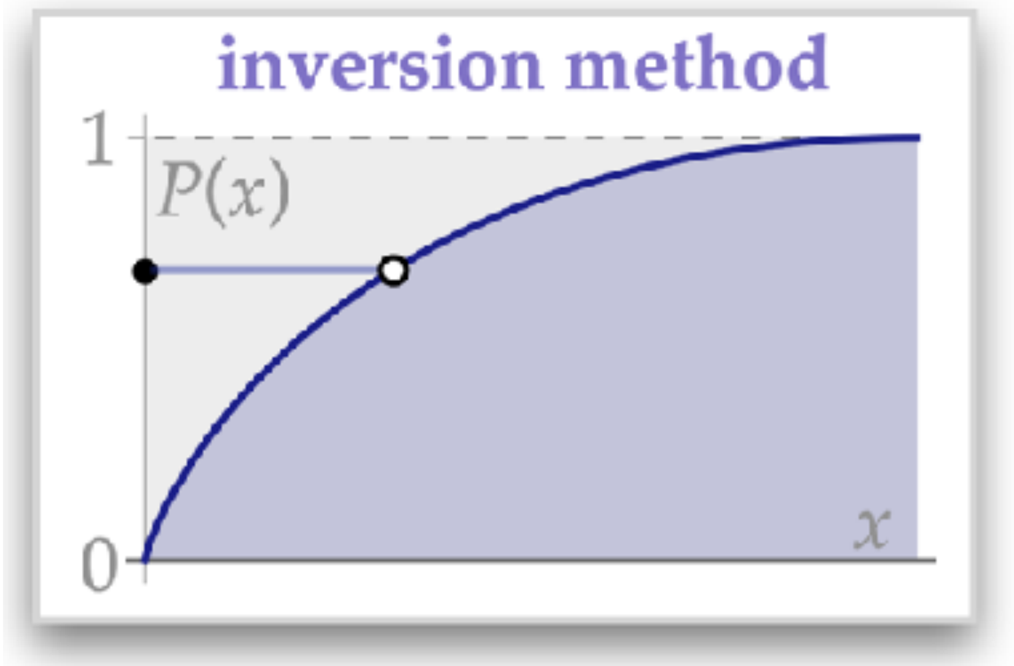
$$P(x) = \int_a^x p(X)dX$$

- 3. Invertáljuk a CDF-et (kvantilis)

$$Q(y) = P^{-1}(y) \sim p(x)$$

- Nem mindig alkalmazható, pláne magasabb dimenziókban…



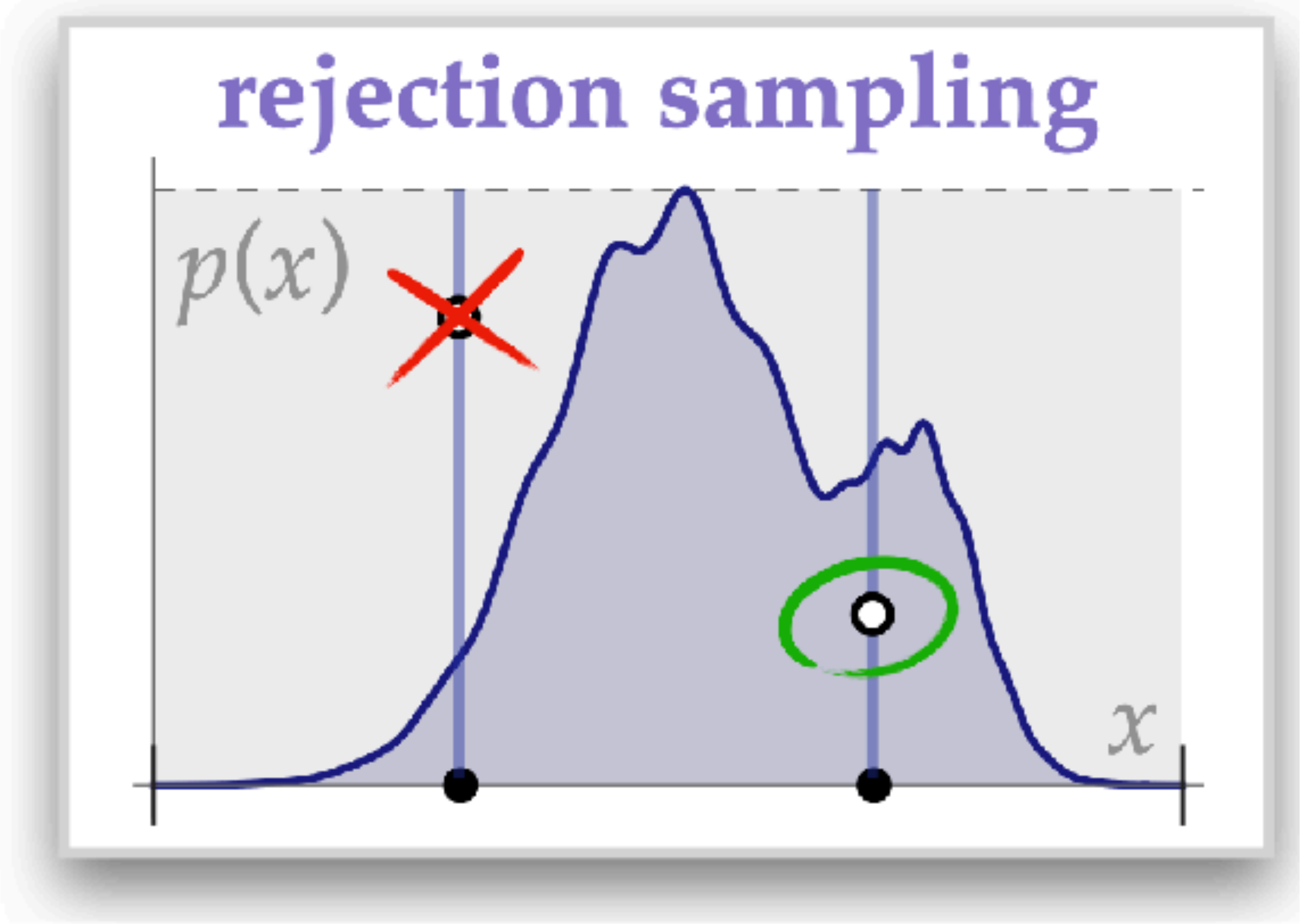


Valószínűségi eloszlások

Mintavételezés — Rejection sampling

- 1. Uniform mintavételezzük az értelmezési tartományt ($x \sim \mathcal{U}(\Omega)$)
- 2. Uniform mintavételezzük a PDF értékkészletét ($y \sim [0, \max p(x)]$)
- 3. Ha $y < p(x)$, elfogadjuk a mintát, egyébként elutasítjuk

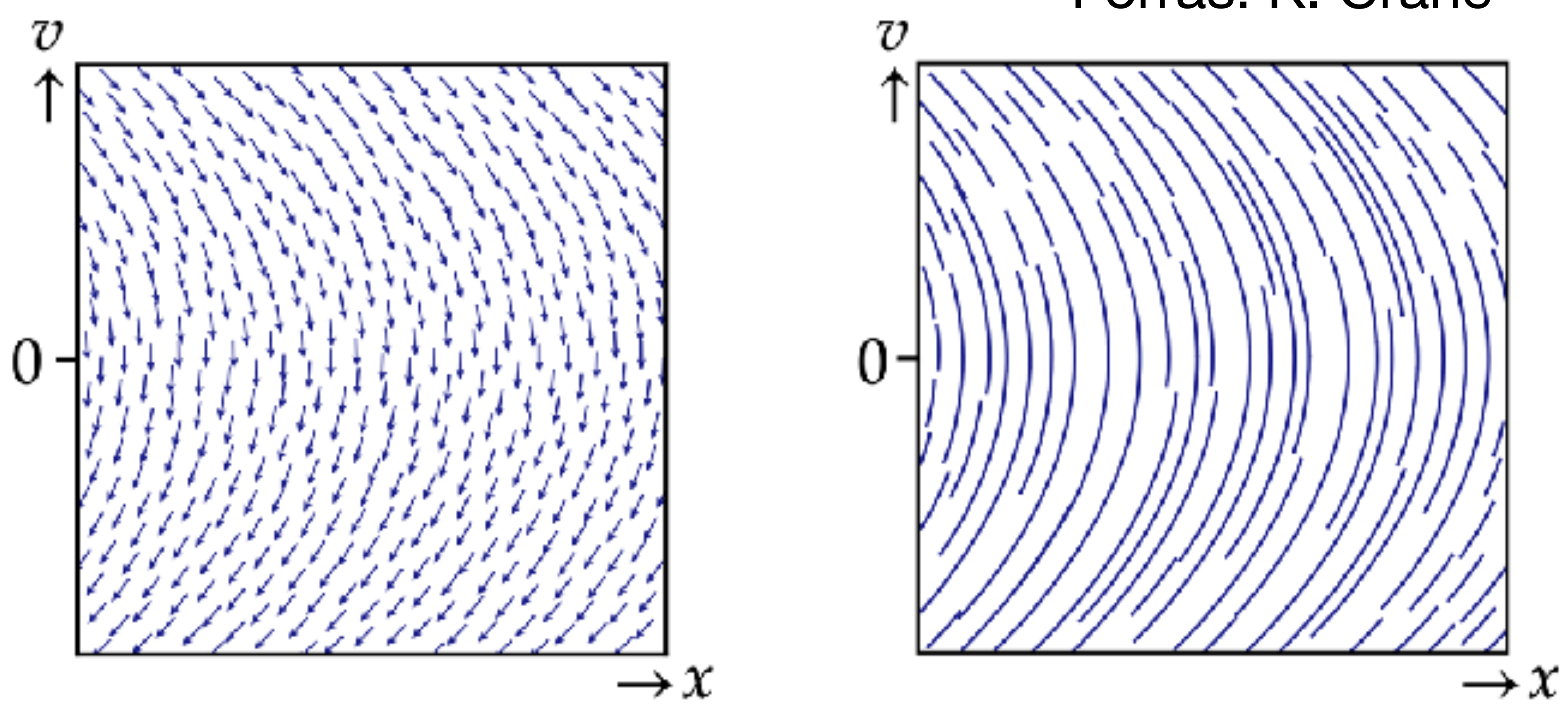
Forrás: K. Crane



Differenciálegyenletek

ODE

Forrás: K. Crane



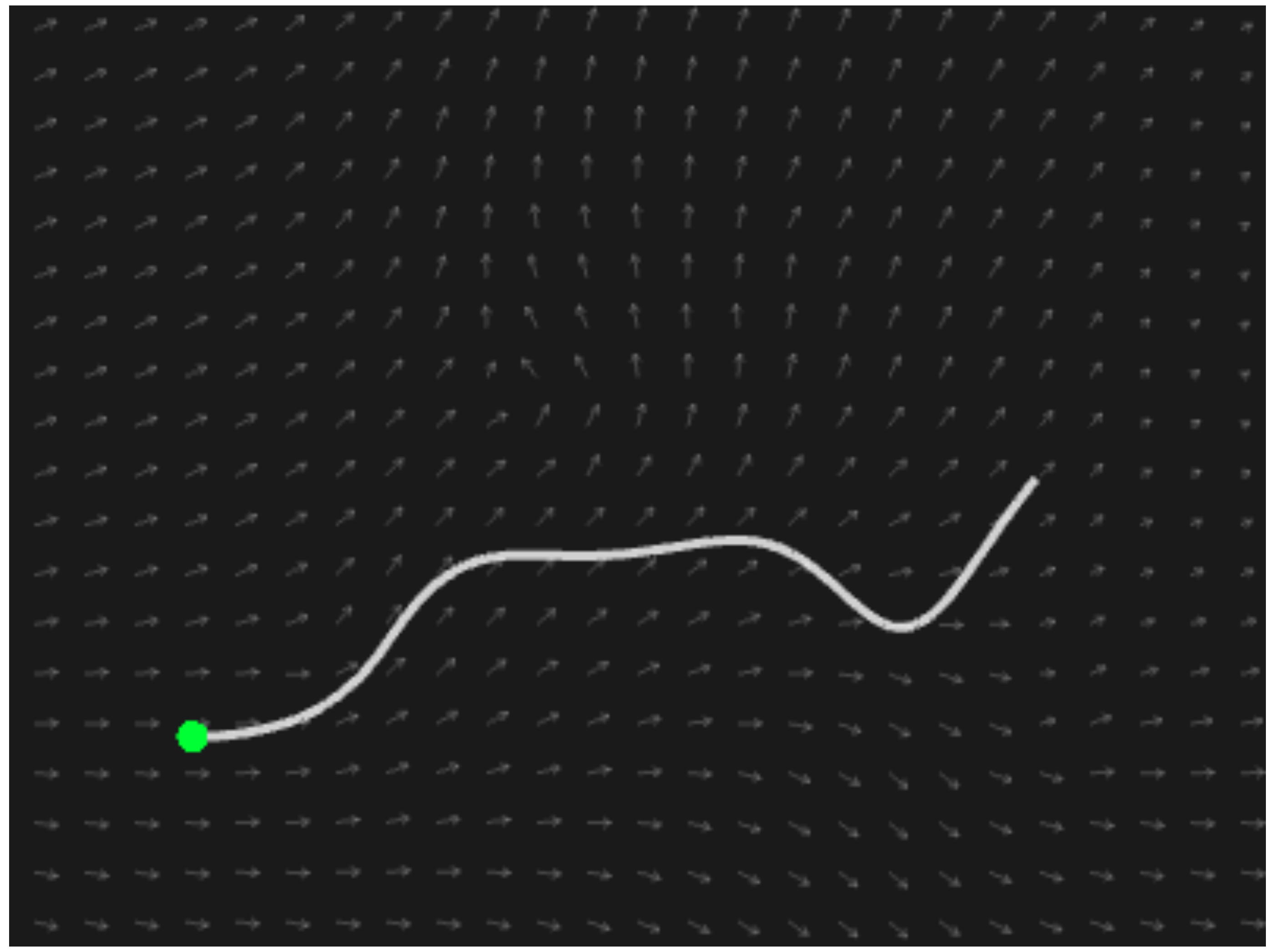
- **Közönséges differenciálegyenlet (ODE):**

$$\frac{d\mathbf{x}}{dt} = \mathbf{f}(x(t), t)$$

$x(t) \in \mathbb{R}^n$ — függő változó (állapotvektor)
$t \in \mathbb{R}$ — független változó ("idő")

- Aka "dinamikai rendszer"
- Geometriai értelmezés: vektormező
  - Akár explicit függhet az időtől is!
- Formális megoldás (integrálgörbe / **folyam**):

$$x(t) = x(0) + \int_0^t f(x(\tau), \tau)d\tau$$



Forrás: M. Gemoll

Differenciálegyenletek

ODE

- **Közönséges differenciálegyenlet (ODE):**

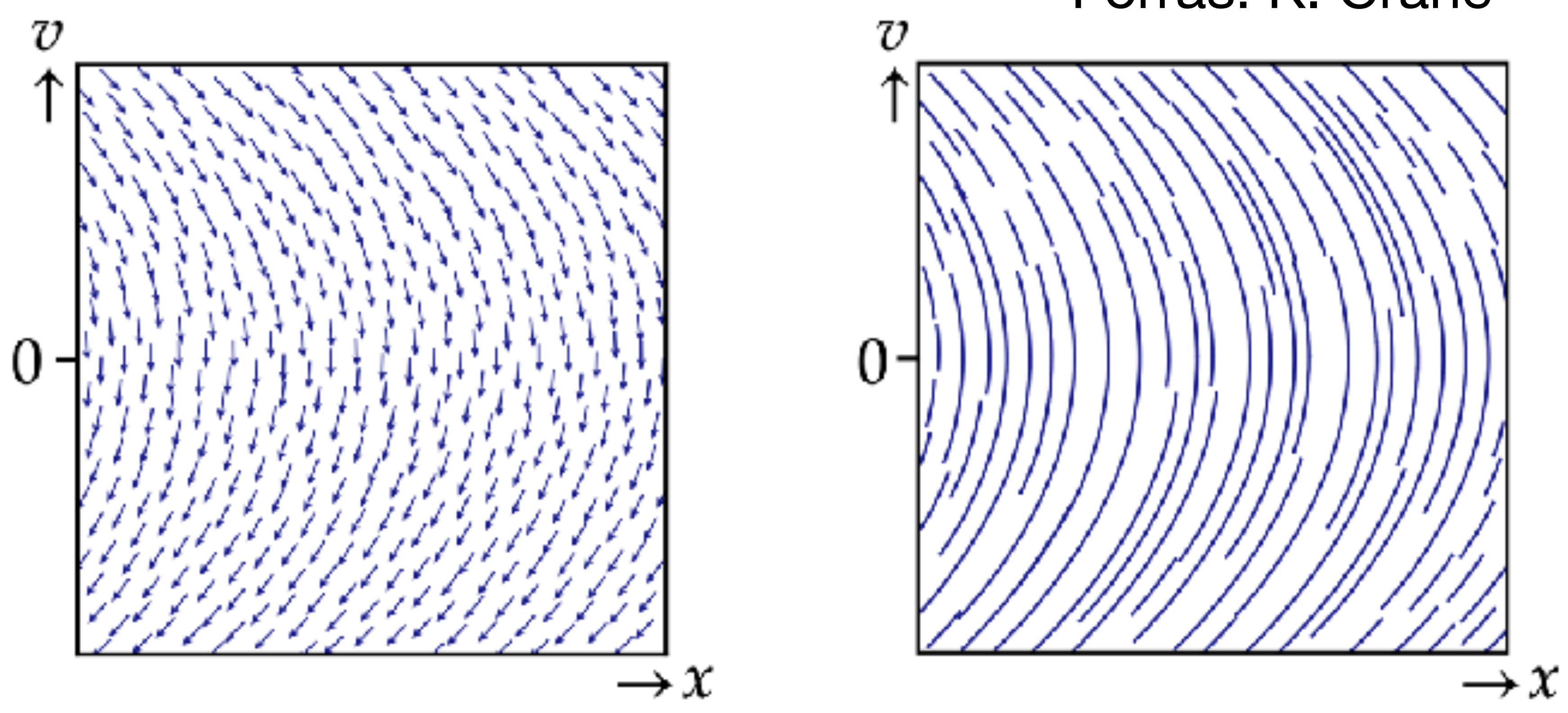
$$\frac{d\mathbf{x}}{dt} = \mathbf{f}(x(t), t)$$

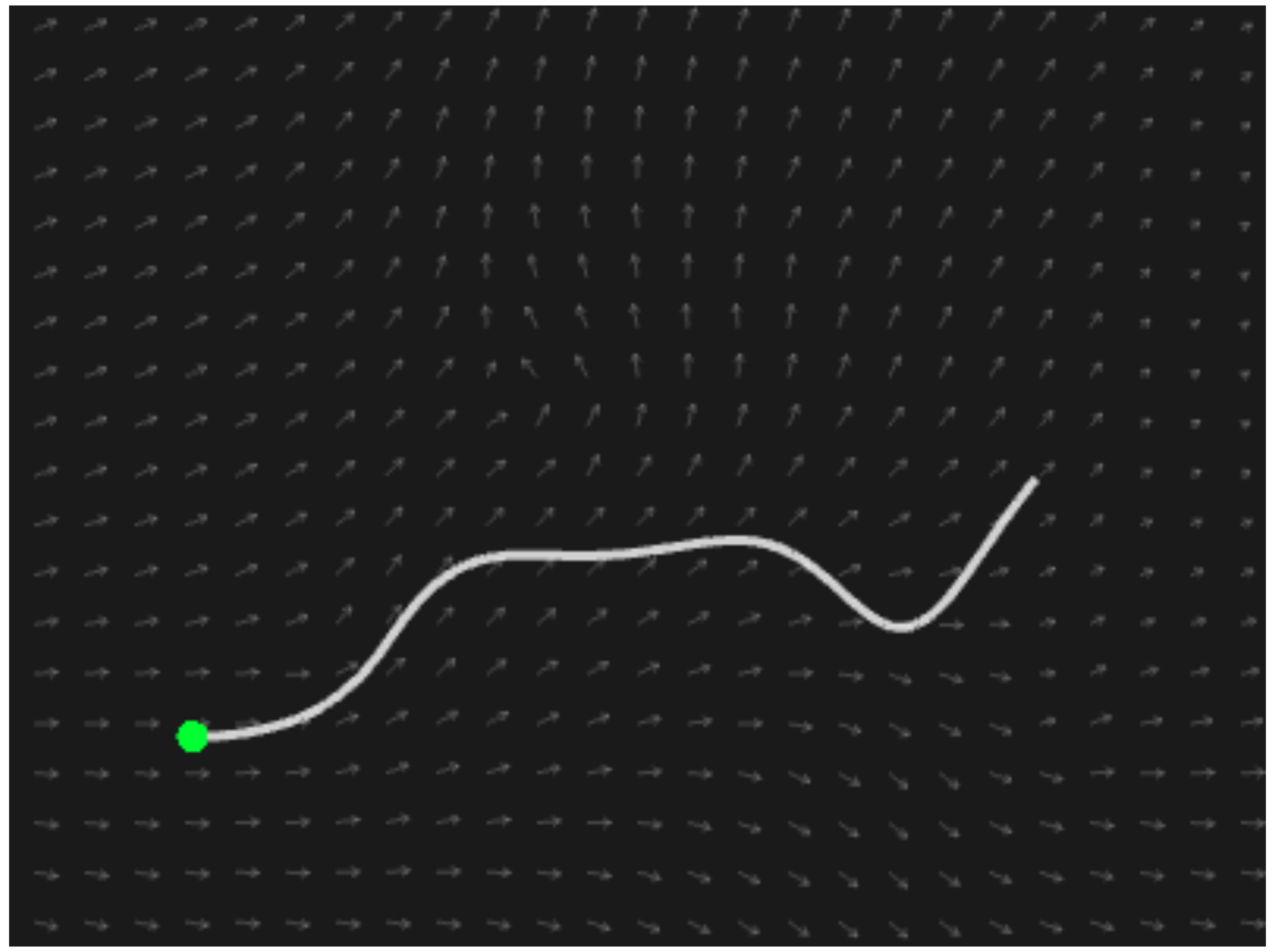
$x(t) \in \mathbb{R}^n$ — függő változó (állapotvektor)
$t \in \mathbb{R}$ — független változó ("idő")

- Aka "dinamikai rendszer"
- Geometriai értelmezés: vektormező
    - Akár explicit függhet az időtől is!
- Formális megoldás (integrálgörbe / **folyam**):

$$x(t) = x(0) + \int_0^t f(x(\tau), \tau)d\tau$$

Forrás: K. Crane





Forrás: M. Gemoll

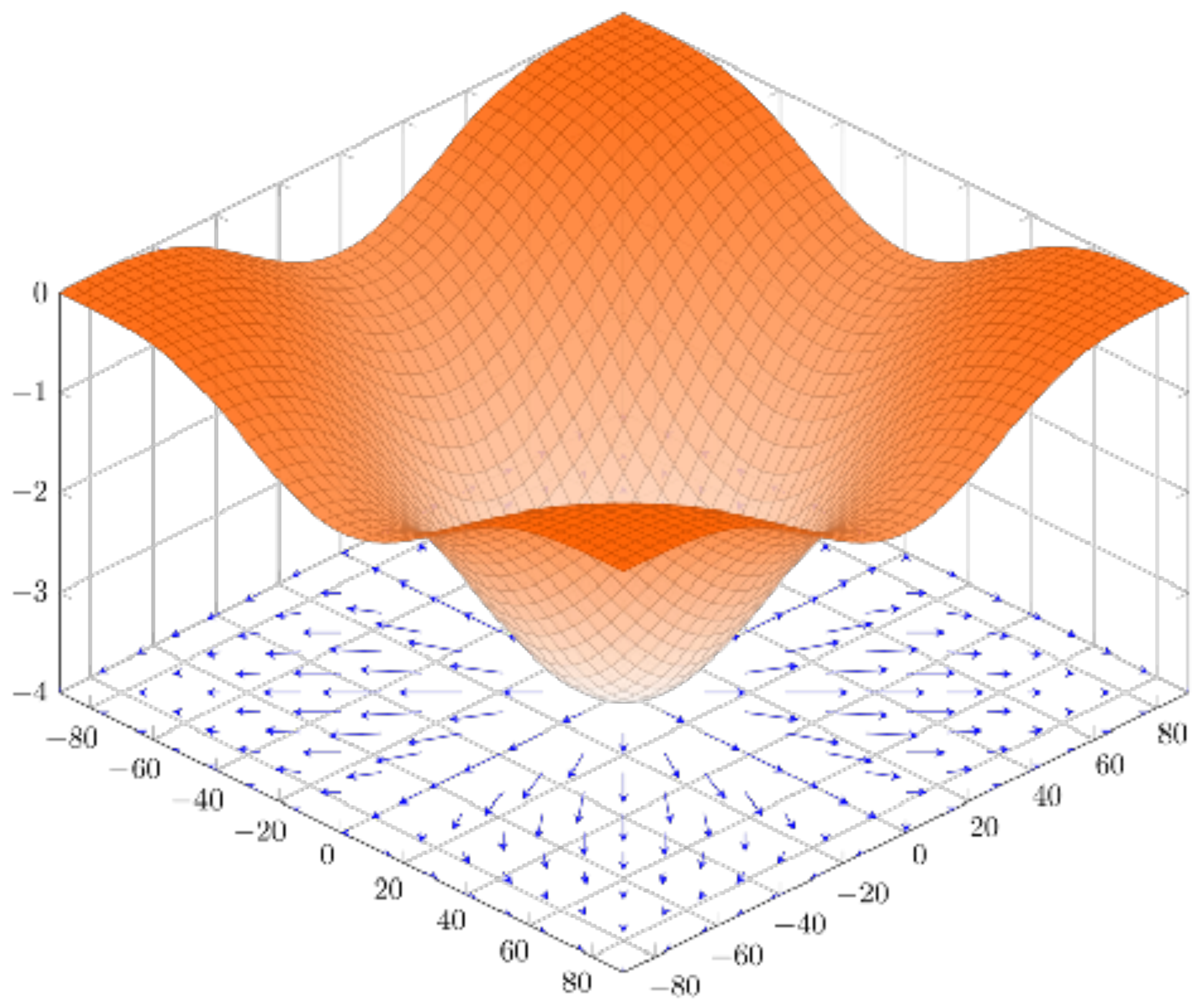
Differenciálegyenletek

ODE — Példa

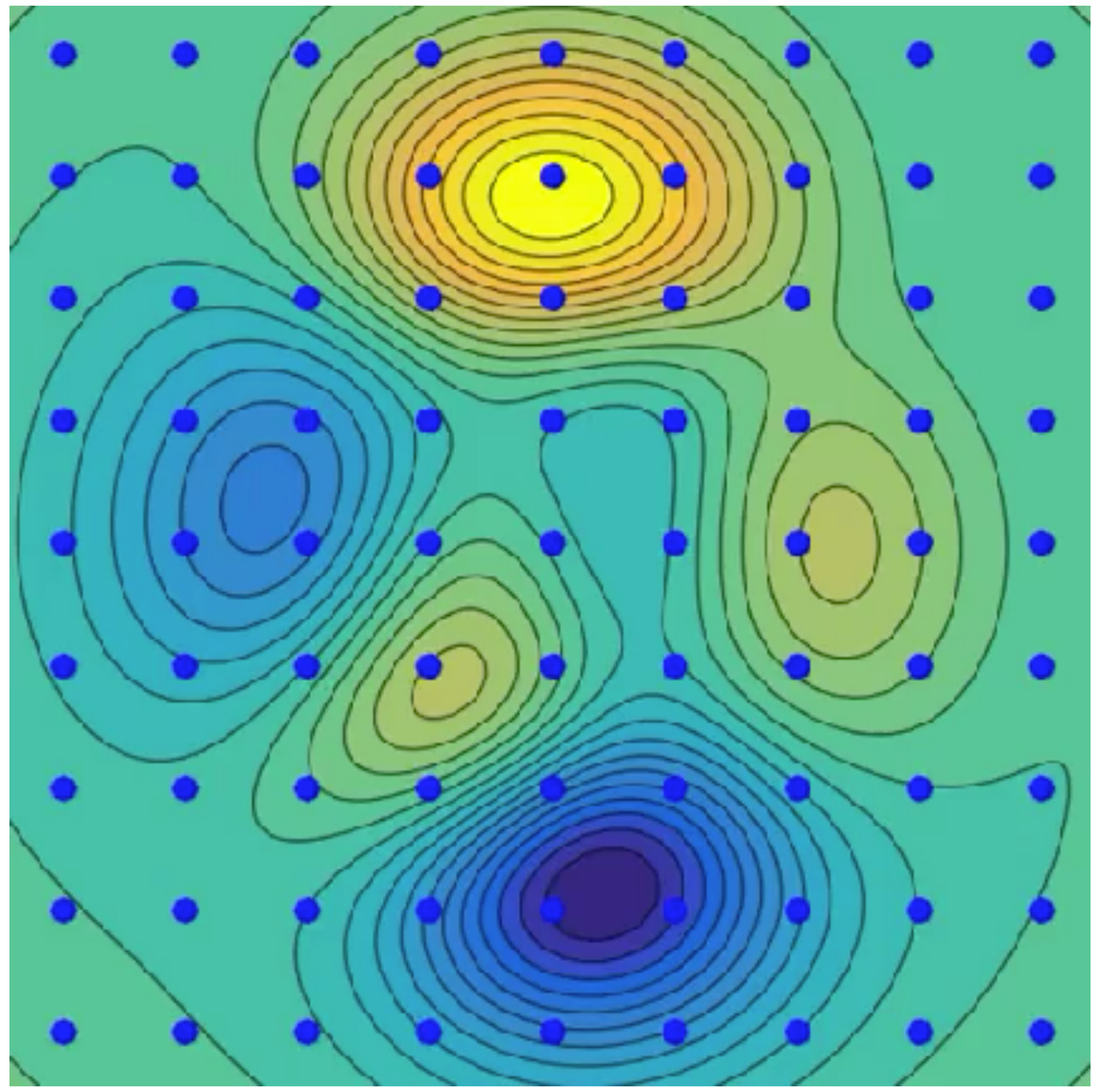
- **<u>Gradiens folyam (gradient flow):</u>**

$$\frac{d\mathbf{x}}{dt} = -\nabla F(\mathbf{x})$$

- Az integrálgörbék a függvény <u>kritikus pontjaiba</u> ($\nabla F(x) = 0$) futnak be!
- Gradient descent “folytonos idejű” megfelelője



Forrás: Wikipedia



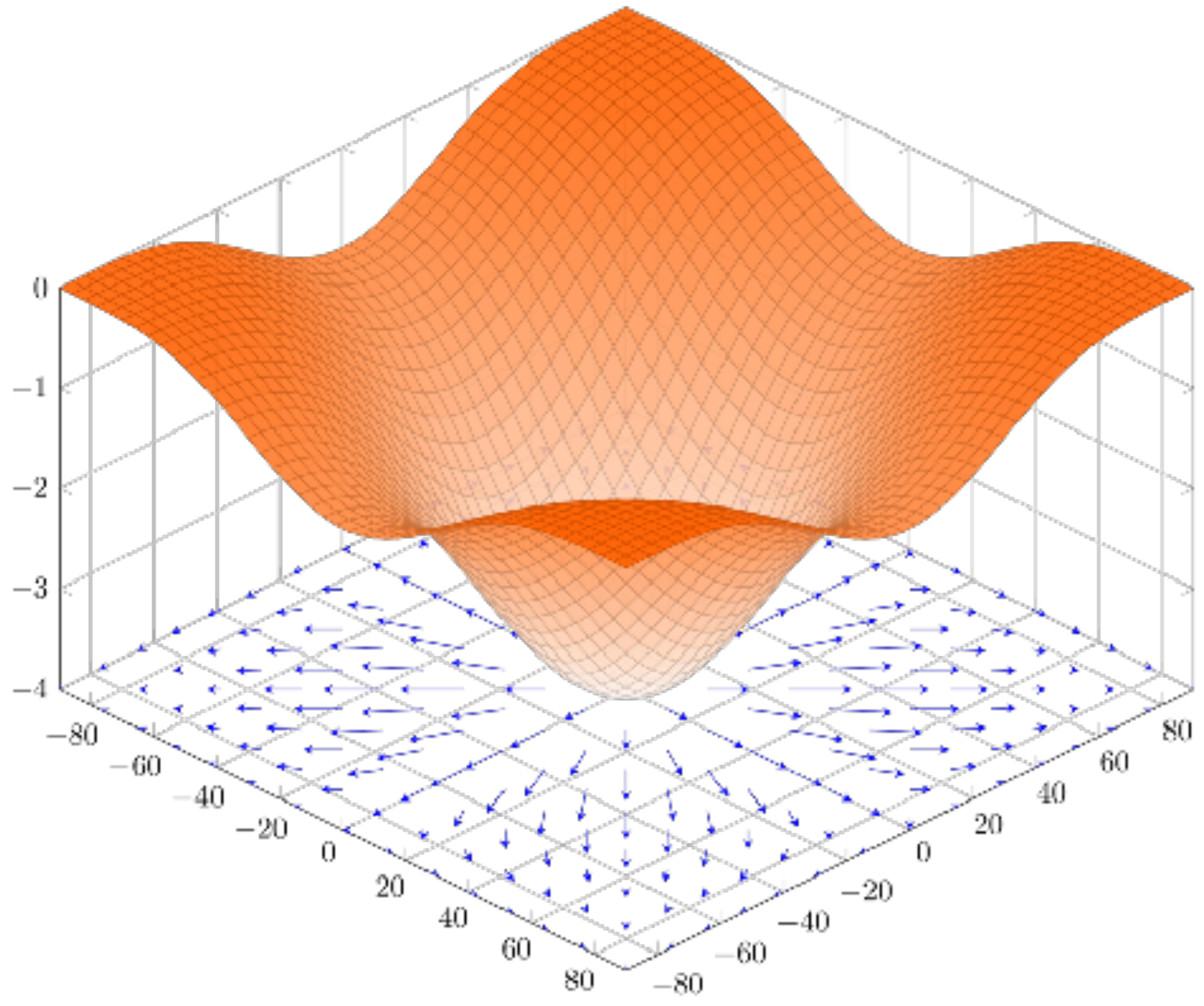
Differenciálegyenletek

ODE — Példa

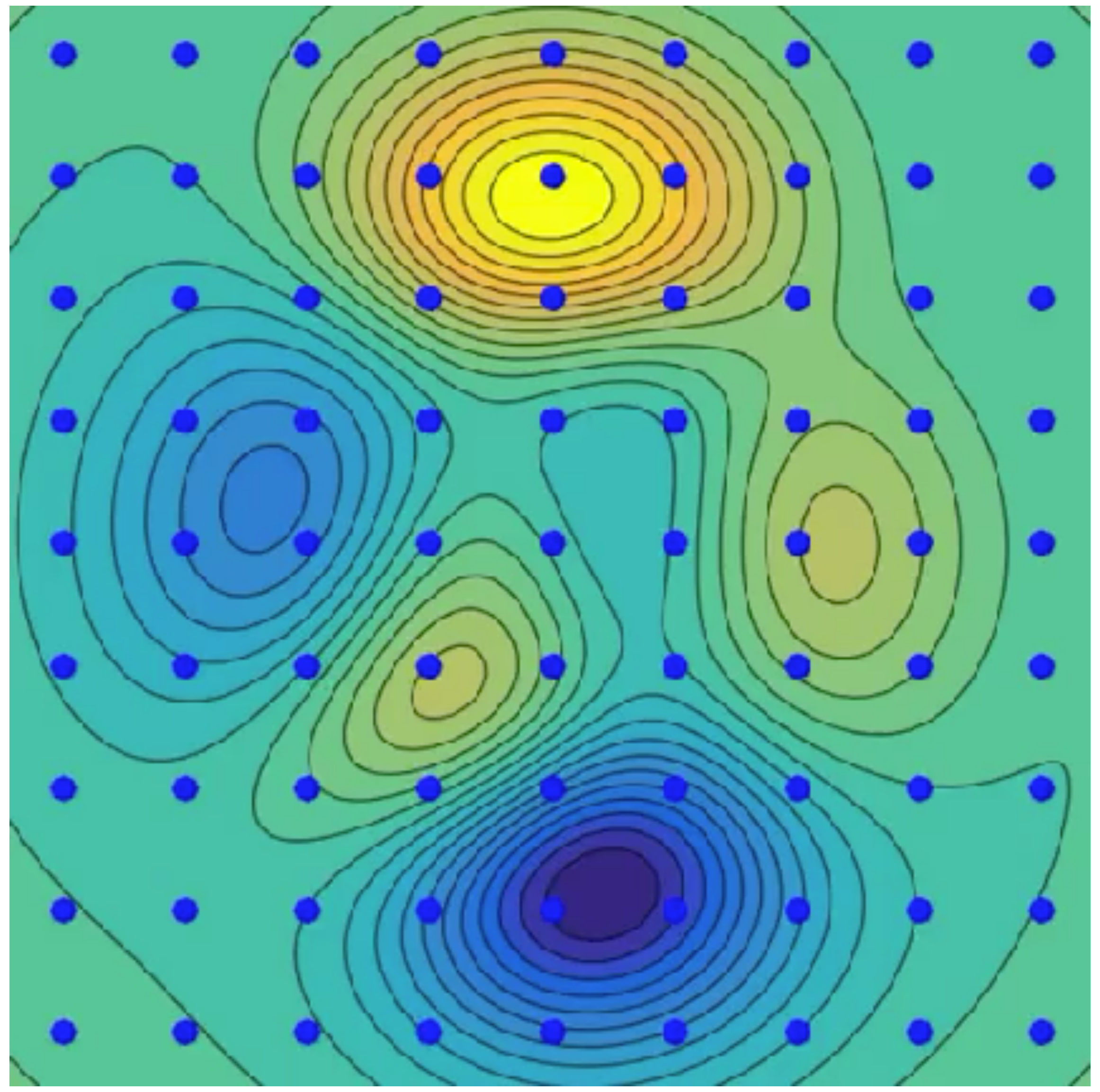
- **Gradiens folyam (gradient flow):**

$$\frac{d\mathbf{x}}{dt} = -\nabla F(\mathbf{x})$$

- Az integrálgörbék a függvény kritikus pontjaiba ($\nabla F(x) = 0$) futnak be!
- Gradient descent "folytonos idejű" megfelelője



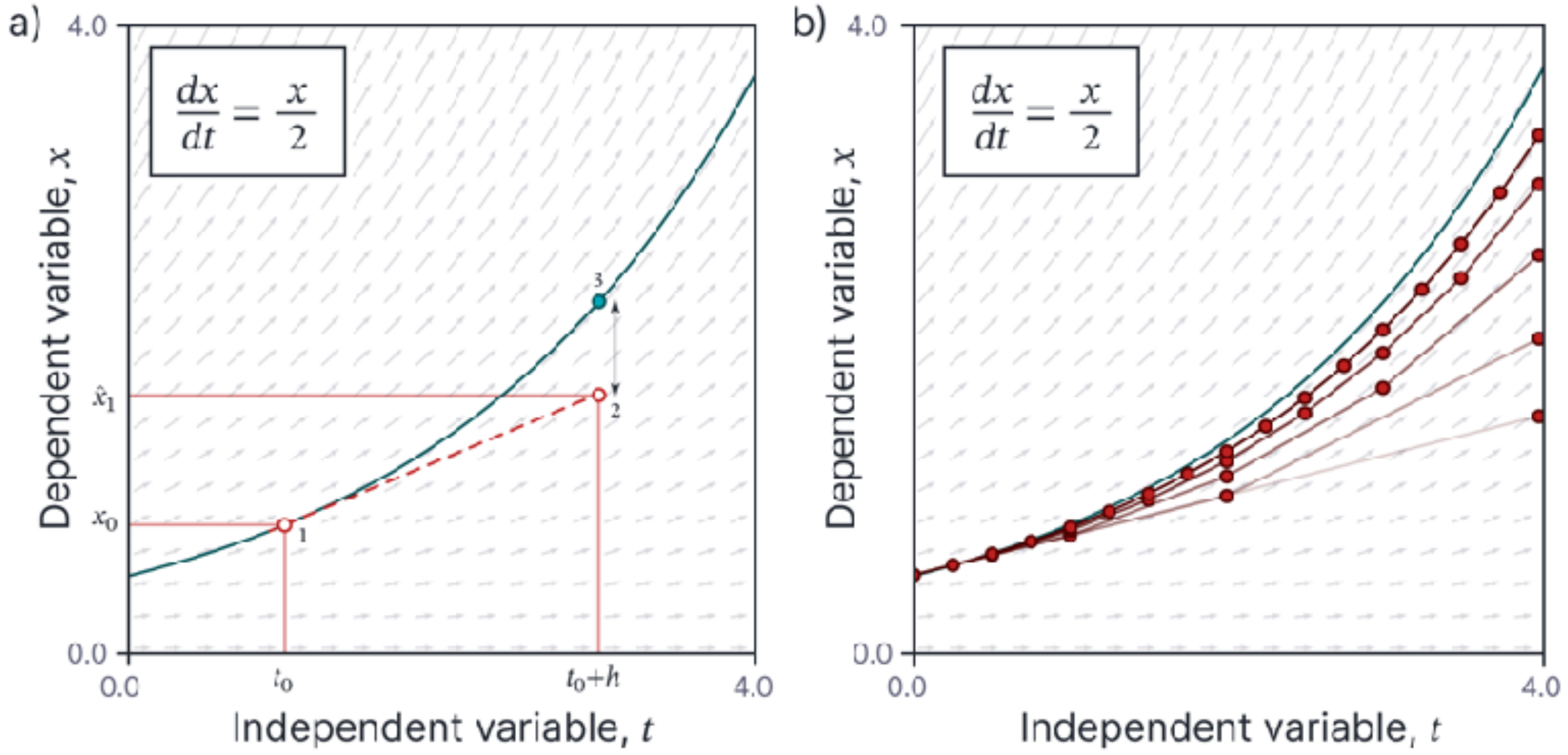
Forrás: Wikipedia



Differenciálegyenletek

ODE — Numerikus módszerek

Forrás: S.J.D. Prince



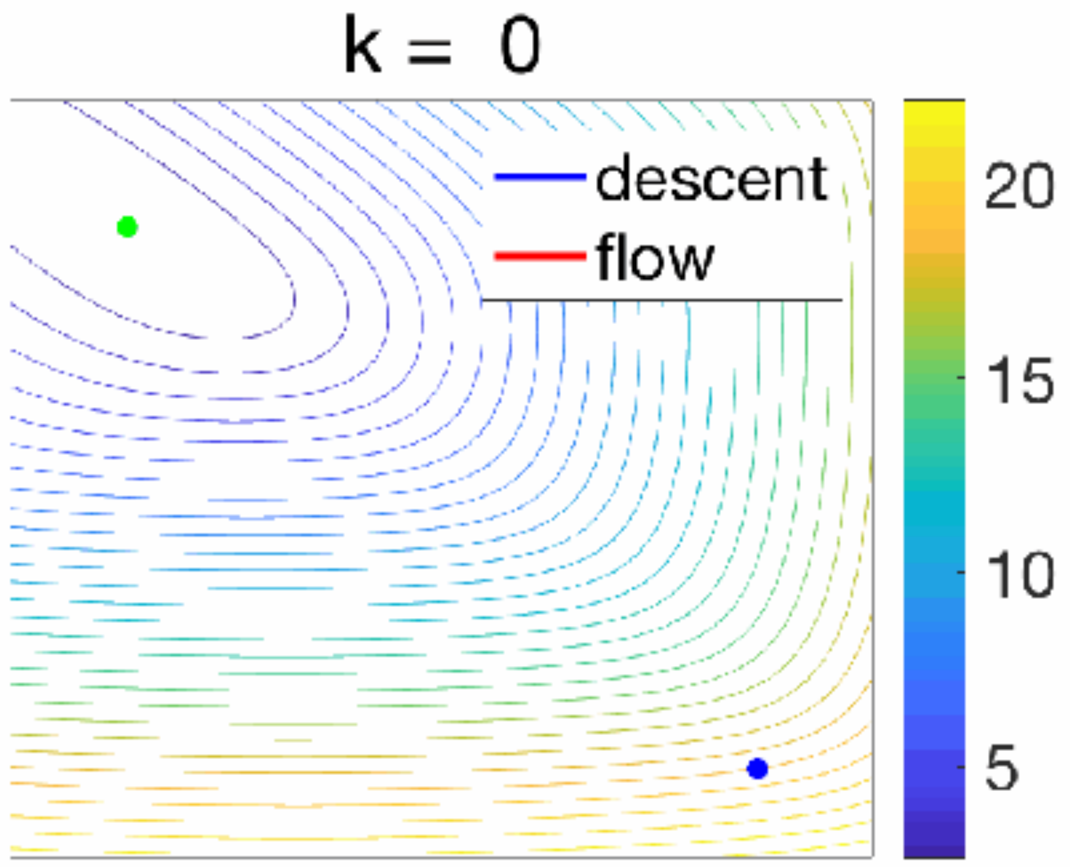
- Diszkretizáljuk az időt:

$$\frac{dx}{dt} \approx \frac{x(t + \Delta t) - x(t)}{\Delta t} = f(x(t), t)$$

- **Explicit / Forward Euler** módszer:

$$x(t_{k+1}) = x(t_k) + \Delta t \cdot f(x(t_k), t_k)$$

  - Gradient Descent = Gradiens folyam + Forward Euler!



Forrás: F. Bach

Differenciálegyenletek

ODE — Numerikus módszerek

- Diszkretizáljuk az időt:

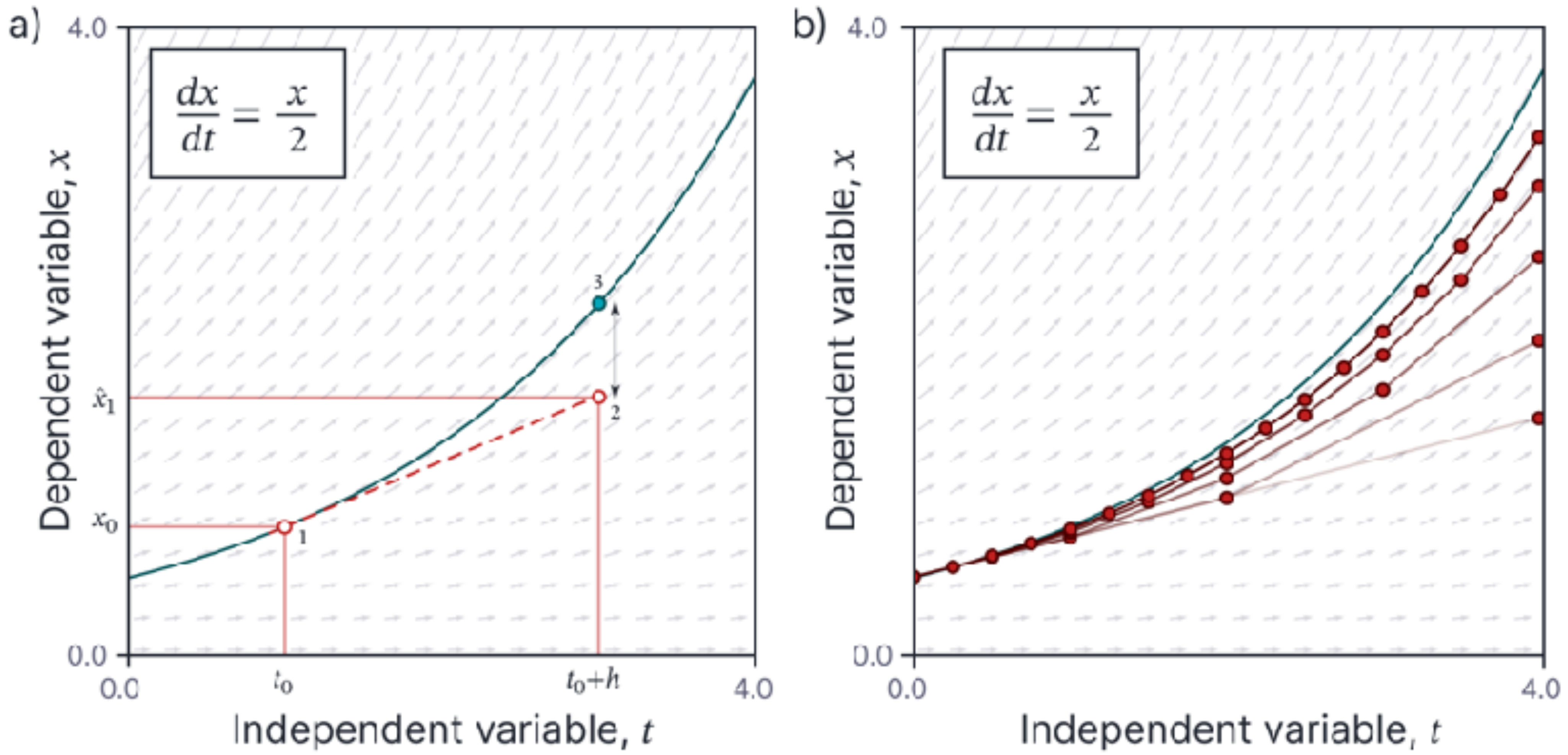
$$\frac{dx}{dt} \approx \frac{x(t+\Delta t) - x(t)}{\Delta t} = f(x(t), t)$$

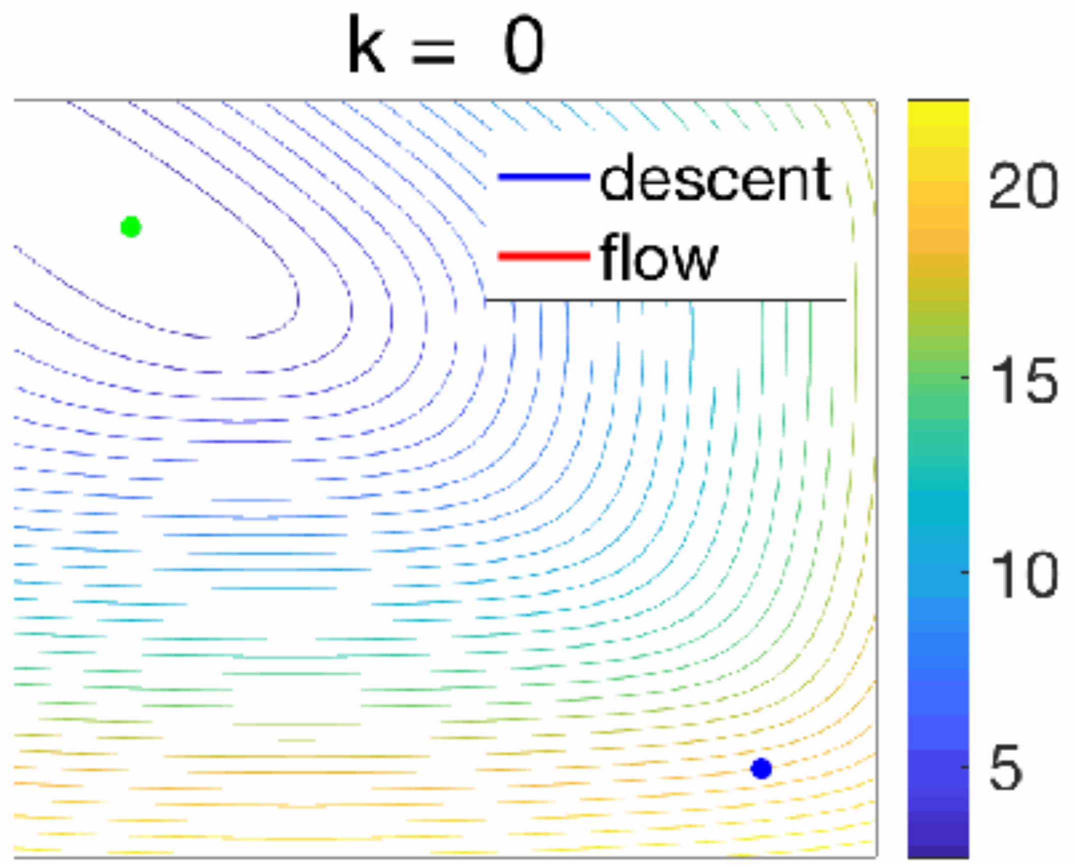
- **Explicit / Forward Euler** módszer:

$$x(t_{k+1}) = x(t_k) + \Delta t \cdot f(x(t_k), t_k)$$

  - Gradient Descent =
    Gradiens folyam + Forward Euler!

Forrás: S.J.D. Prince



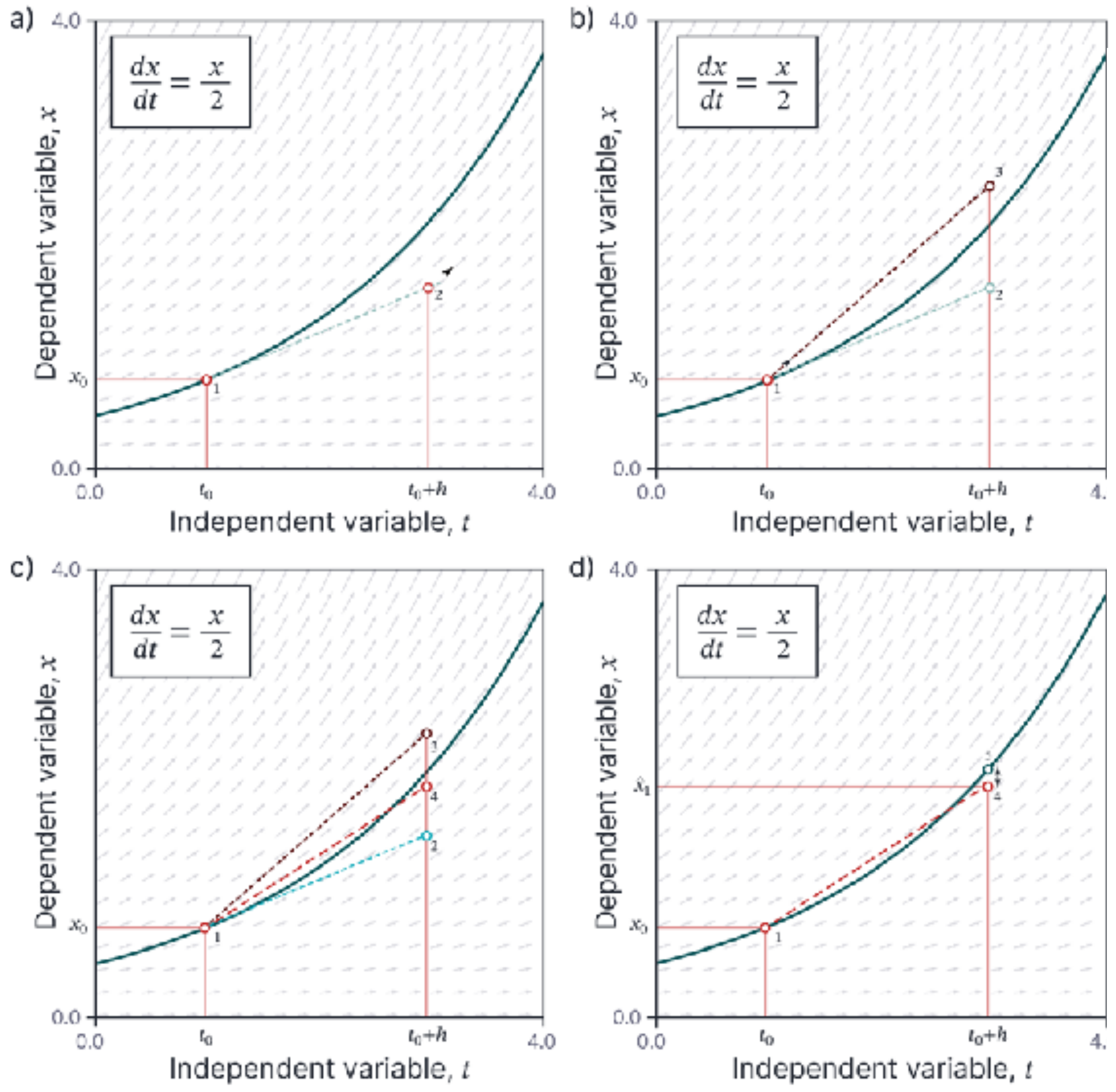


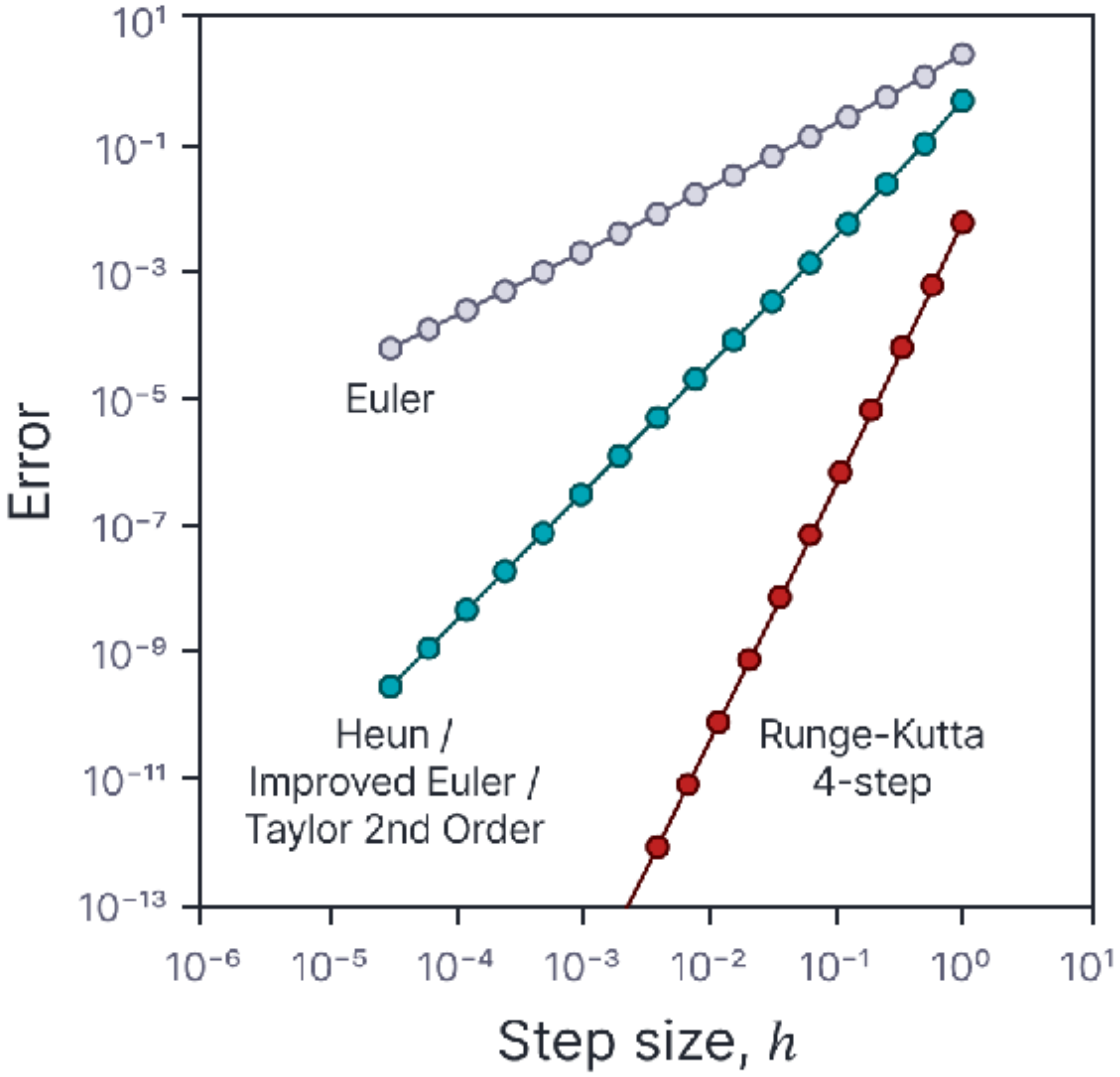
Forrás: F. Bach

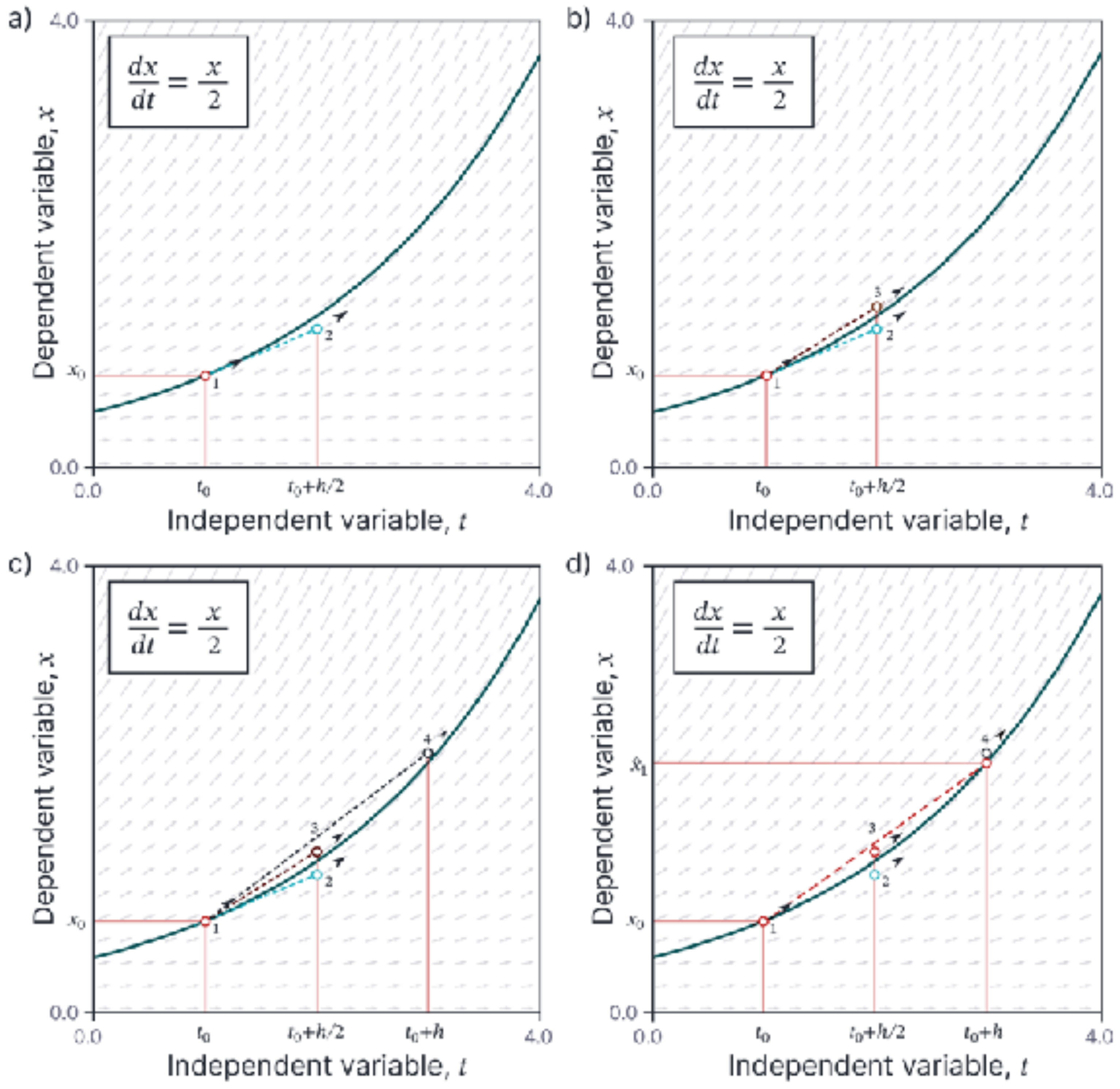
Differenciálegyenletek

ODE — Numerikus módszerek — Integrátorok

Forrás: <u>S.J.D. Prince</u>







<u>Heun</u> (2. rendű)

<u>Runge-Kutta</u> (4. rendű)

Differenciálegyenletek

ODE — Numerikus módszerek — Integrátorok

- **Implicit / backward Euler**:

$$x(t_{k+1}) = x(t_k) + \Delta t \cdot f(x(t_{k+1}), t_{k+1})$$

$$G(x(t_{k+1})) = x(t_{k+1}) - \Delta t \cdot f(x(t_{k+1}), t_{k+1}) - x(t_k) = 0$$

Implicit egyenlet!

- Nemlineáris egyenletrendszer $x(t_{k+1})$-re
    - Megoldható iteratív módszerekkel (pl. Newton-Raphson)
- Stabil kb. bármilyen Δt választása esetén!
- Gradiens dinamikára ($f(x) = -\nabla F(x)$) ekvivalens *optimalizáció-alapú* interpretáció ("**inkrementális potenciál**"):

$$x(t_{k+1}) = \text{argmin} \left(\frac{1}{2\Delta T} \left\| x - x(t_k) \right\|^2 + F(x) \right)$$

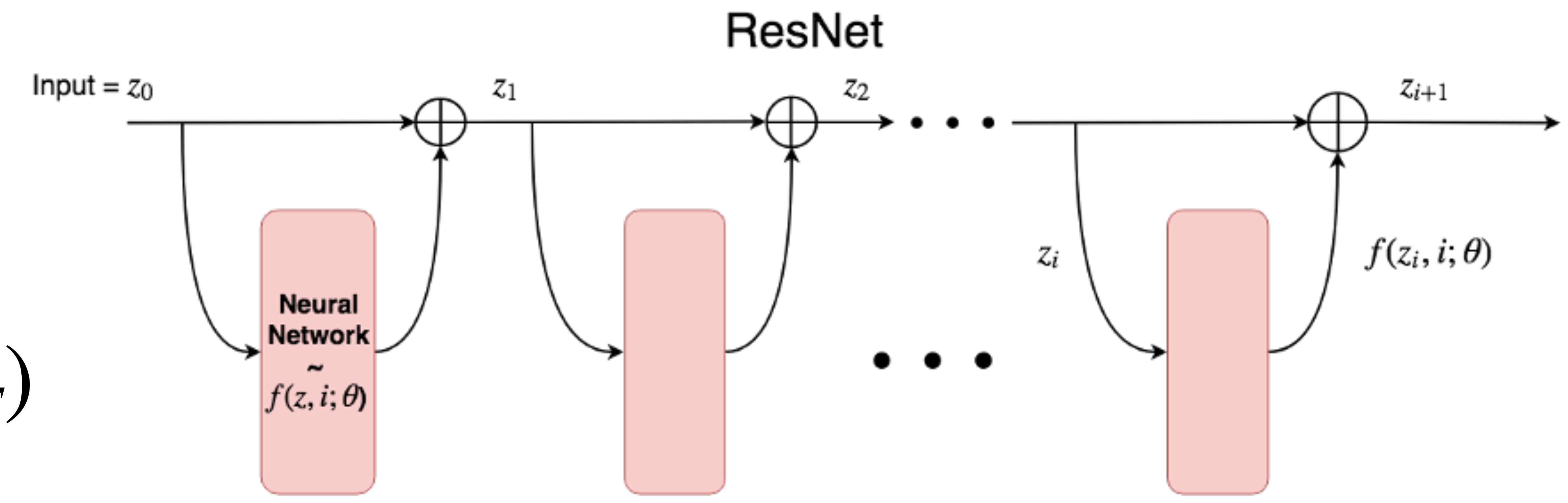
Megoldás:
pl. Newton~~(-Raphson)~~!

Differenciálegyenletek

Neural ODE

Neural Ordinary Differential Equations

Ricky T. Q. Chen*, Yulia Rubanova*, Jesse Bettencourt*, David Duvenaud
University of Toronto, Vector Institute



- Várjunk csak…

$$x_{L+1} = x_L + f_{W_L}(x_l) \quad 🤔 \quad x_{T+1} = x_T + f(x_T)$$

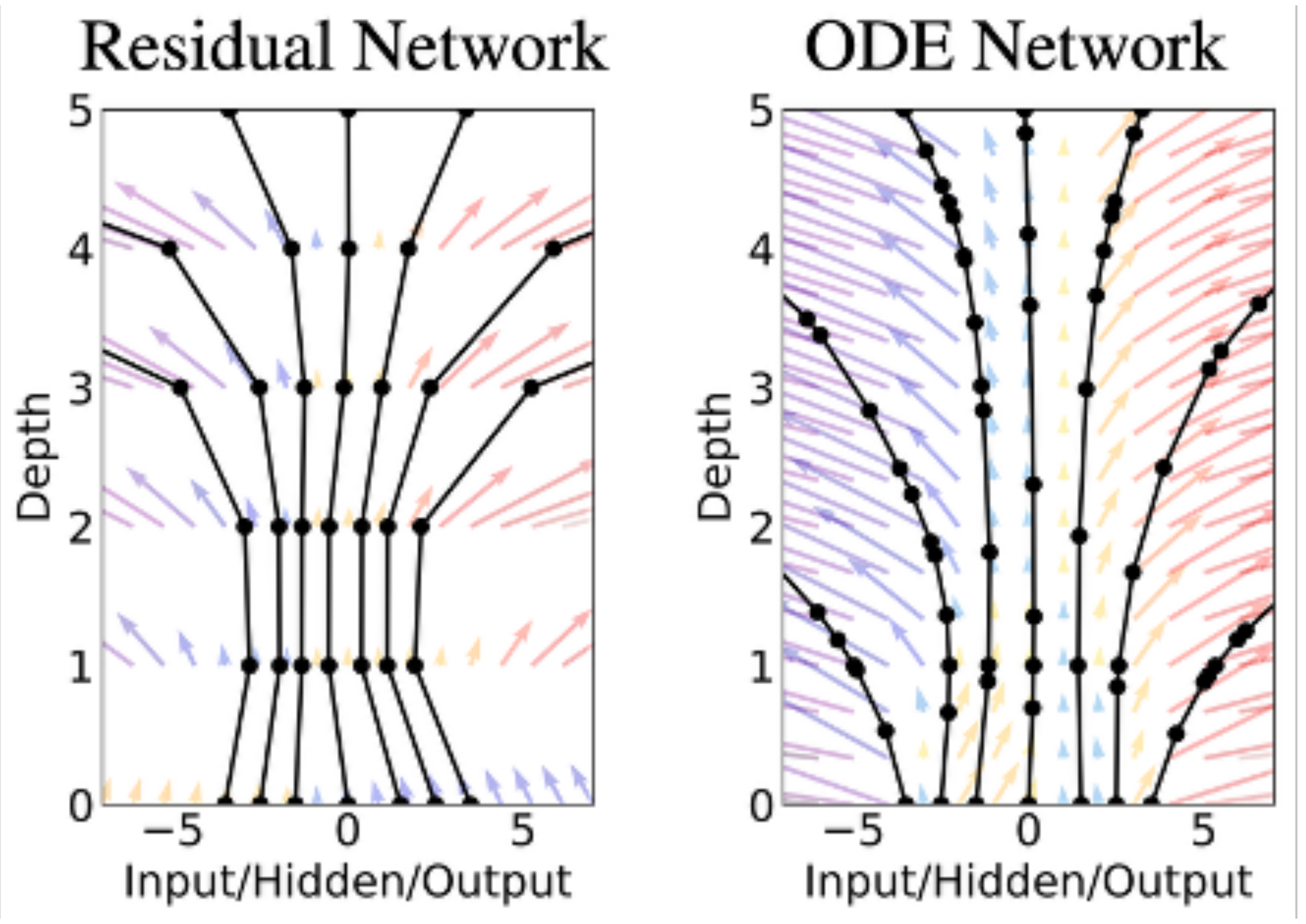
Reziduális réteg — Forward Euler

- Mi lesz egy ResNet-ből, ha $L \to \infty$ és a rétegek egyformák?

$$\frac{dx}{dt} = f_W(x, t)$$

Neural ODE

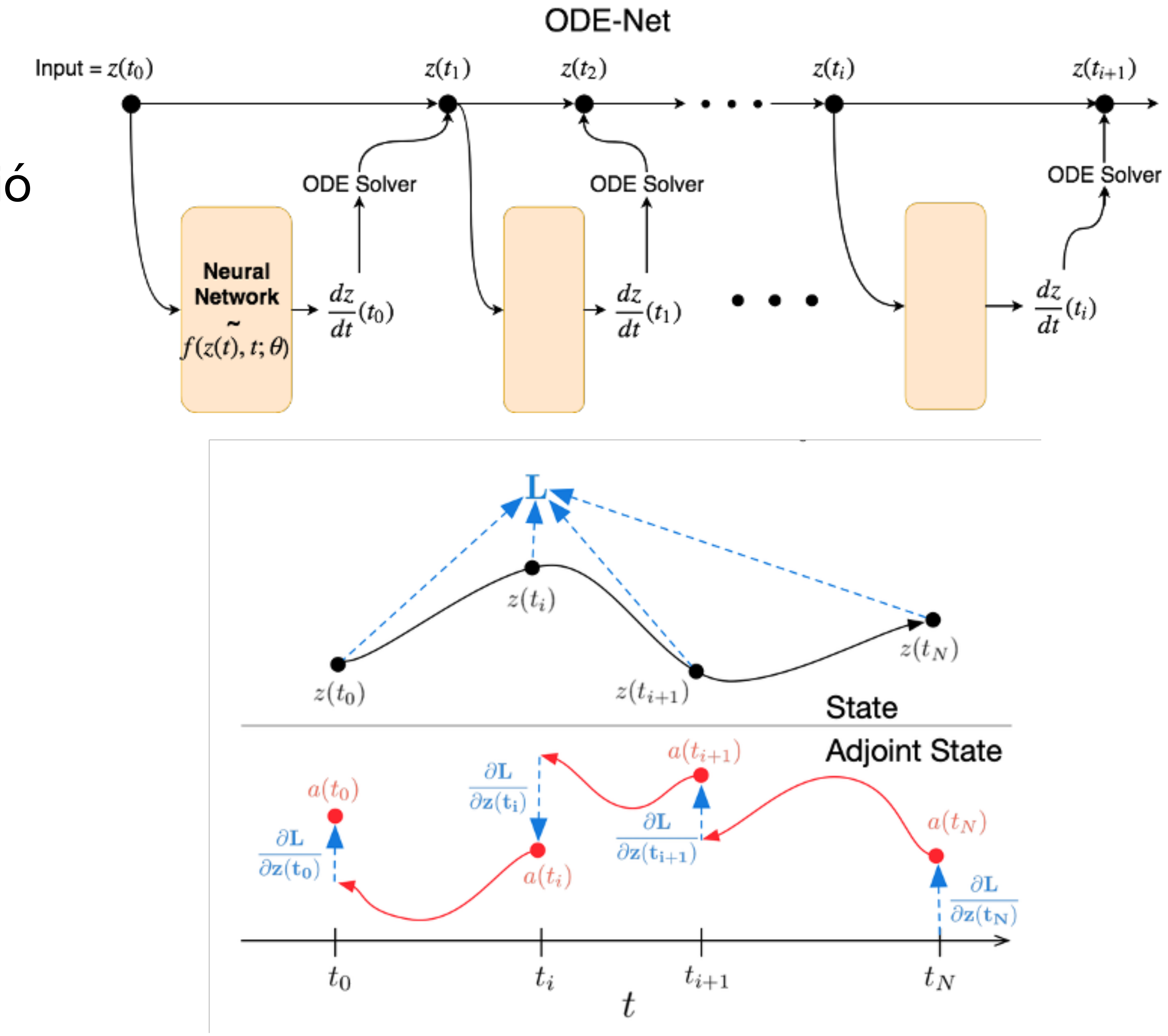
Neurális háló — a bemenet *változási sebességét* definiálja!



Differenciálegyenletek

Neural ODE

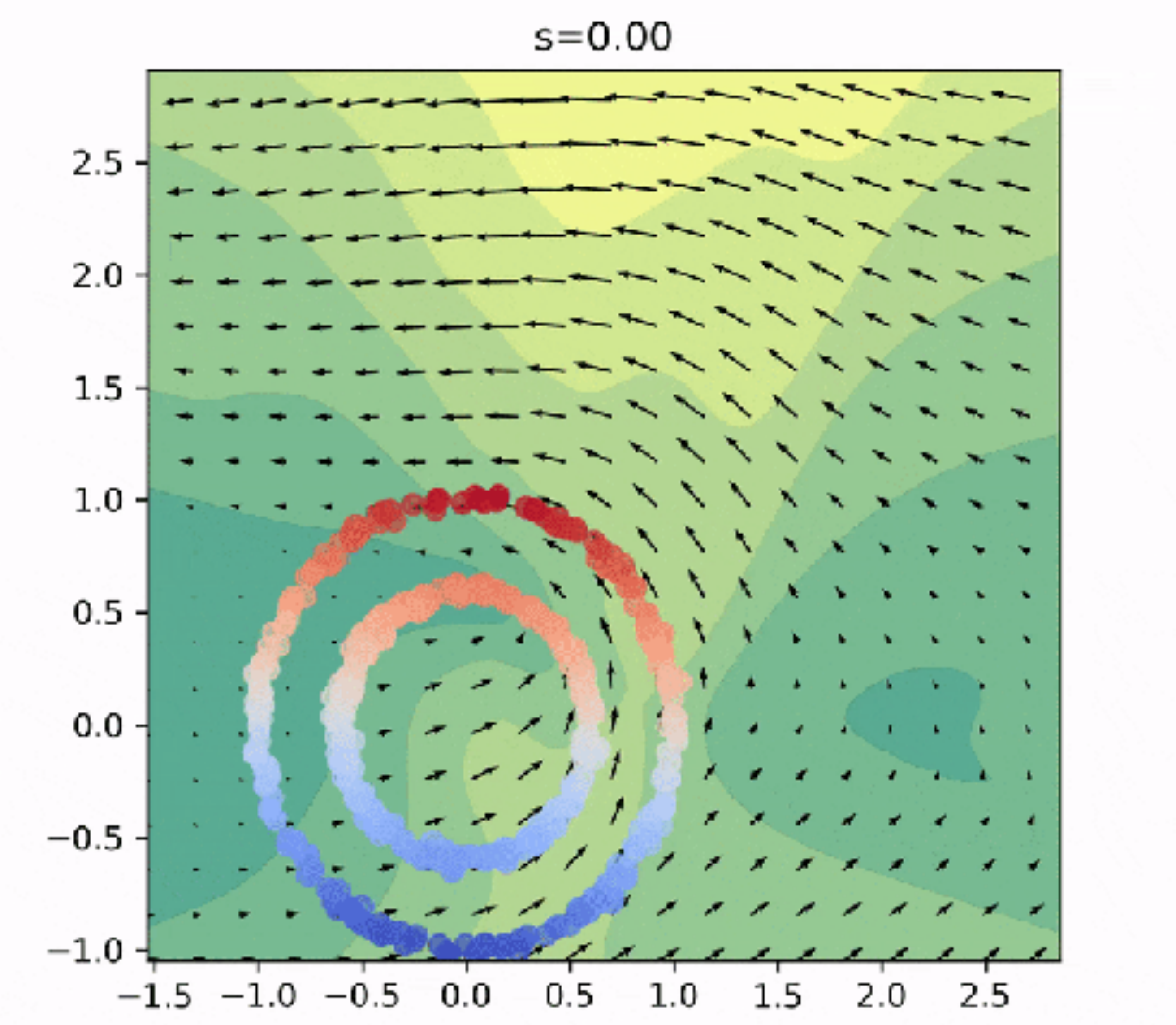
- ResNet = Neural ODE + Forward Euler diszkretizáció
- De *bármilyen* integrátort (ODE megoldót) használhatunk a kiértékelésre!
    - Pl. Runge-Kutta, backward Euler, adaptív lépésköz stb.
- Neural ODE tanítása:
    - 1. ötlet: backprop. az ODE megoldó iterációin keresztül ("unrolling")
    - 2. ötlet: "**adjoint ODE**" integrálása időben visszafelé (aka "folytonos backprop", "adjoint method") — hatékonyabb!



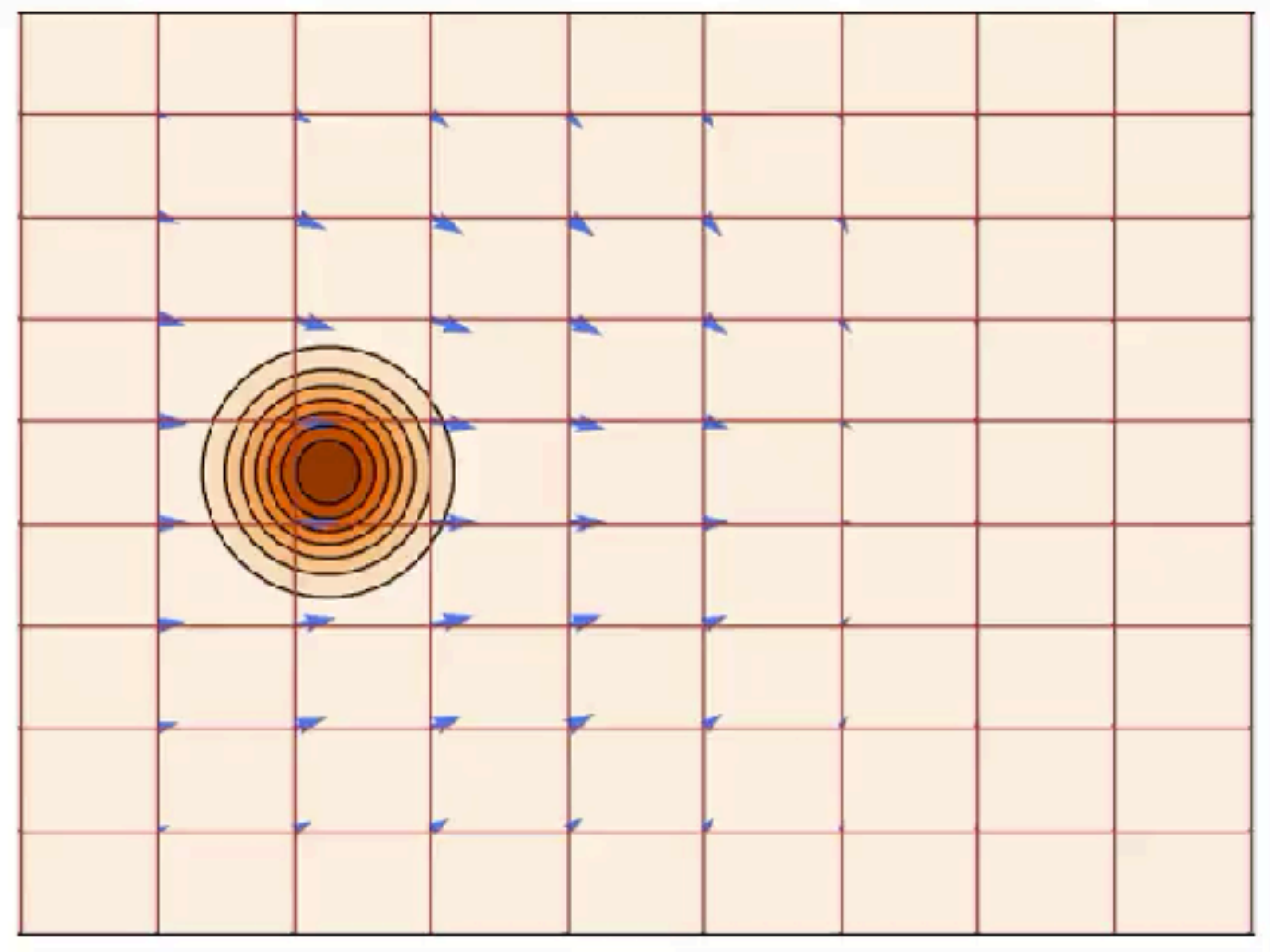
Differenciálegyenletek

Neural ODE

- Neural ODE alkalmazásai:
  - Idősor analízis
  - Fizikai / dinamikai modellezés
  - Irányítástechnika / robotika
  - **<u>Generatív modellezés (diffúzió & flow módszerek)</u>**
- Érdeklődőknek: <u>Implicit Rétegek</u>



Forrás: M. Poli

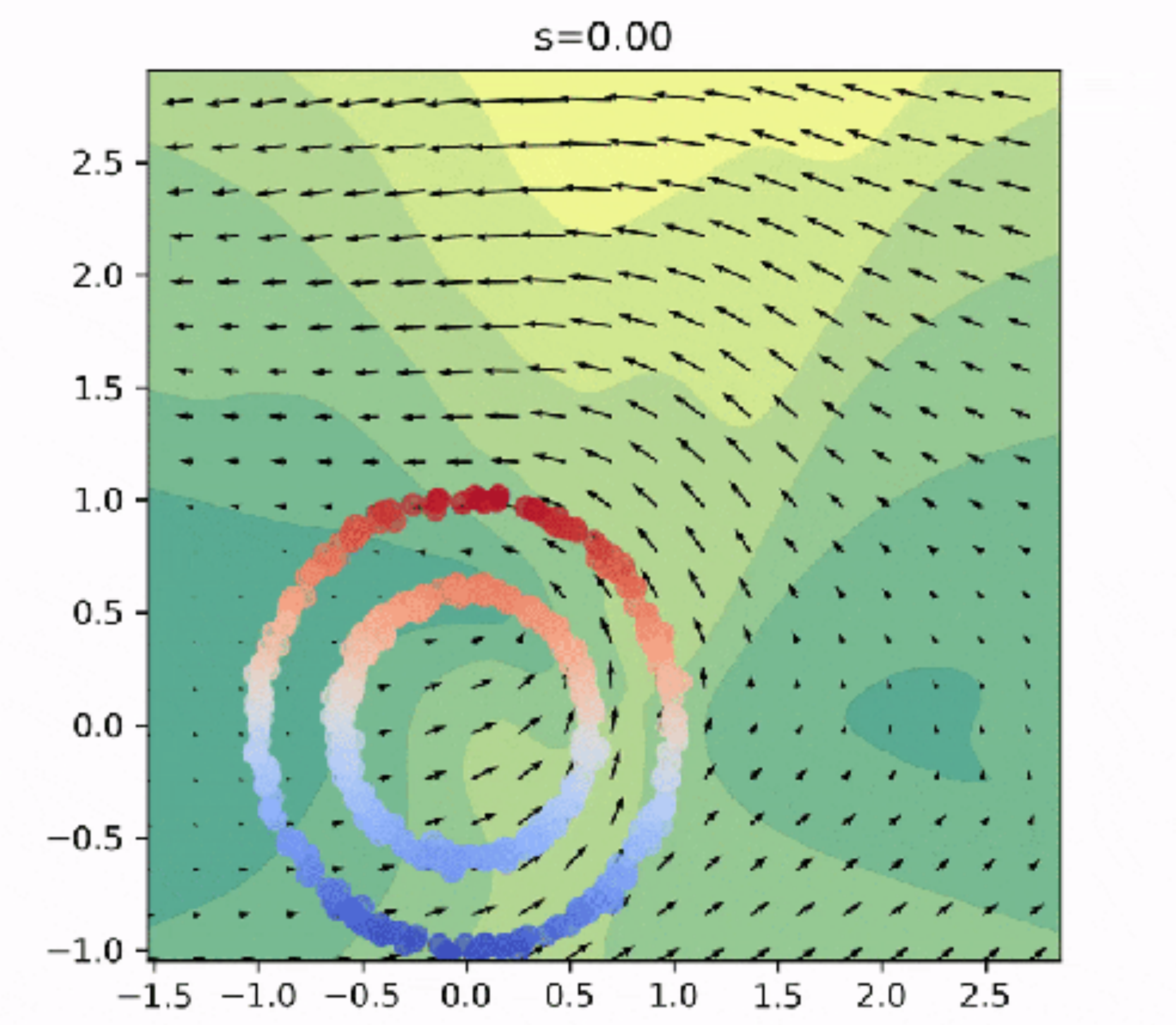


Forrás: Y. Lipman

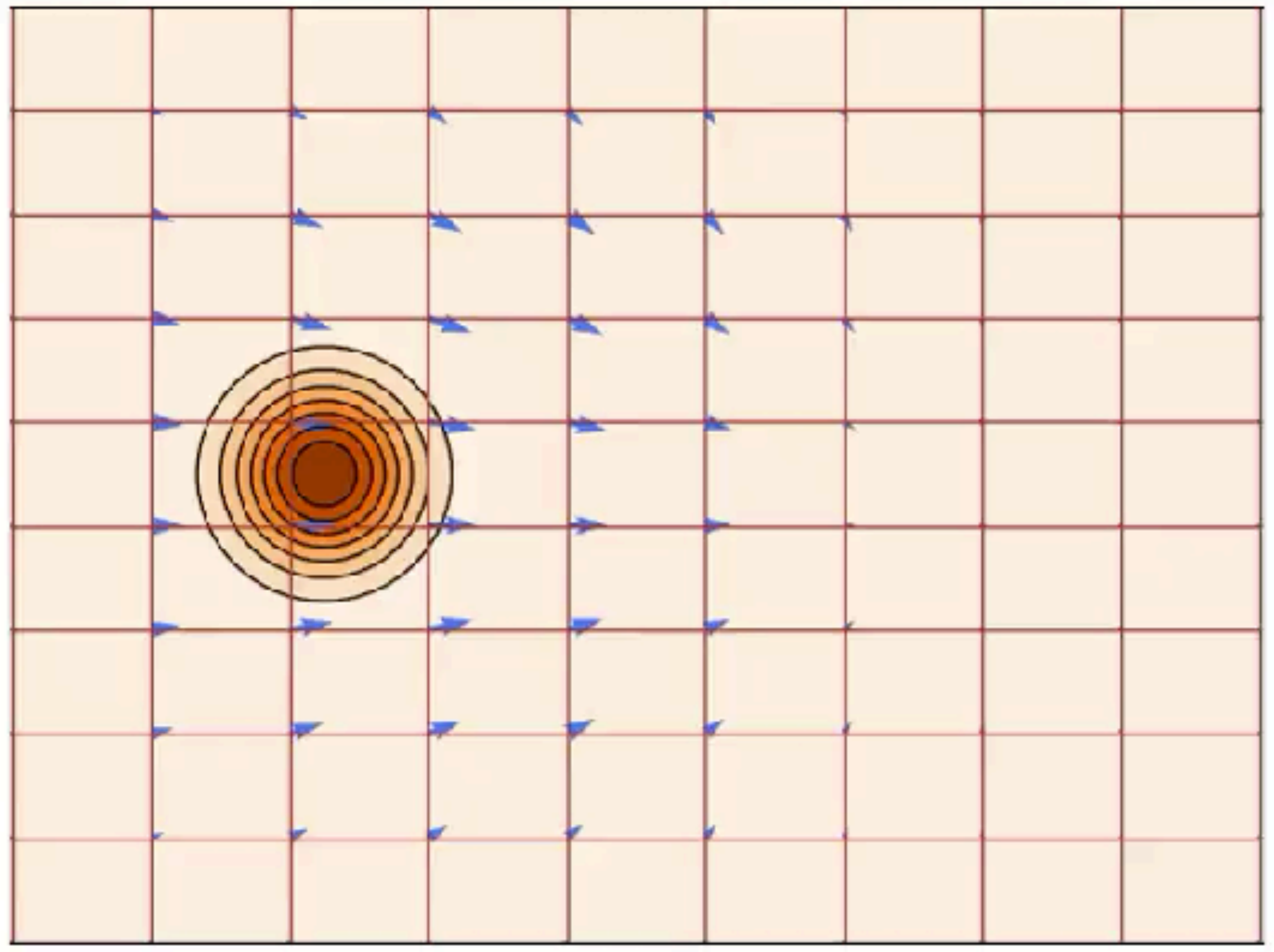
Differenciálegyenletek

Neural ODE

- Neural ODE alkalmazásai:
  - Idősor analízis
  - Fizikai / dinamikai modellezés
  - Irányítástechnika / robotika
  - **<u>Generatív modellezés (diffúzió & flow módszerek)</u>**
- Érdeklődőknek: <u>Implicit Rétegek</u>



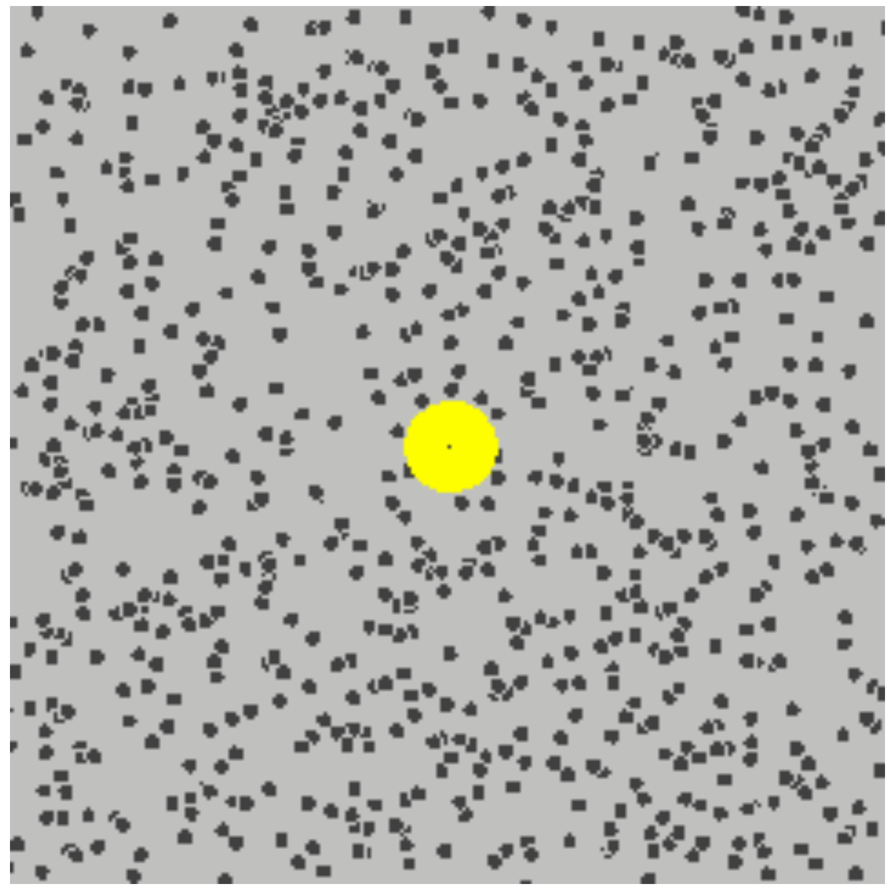
Forrás: M. Poli

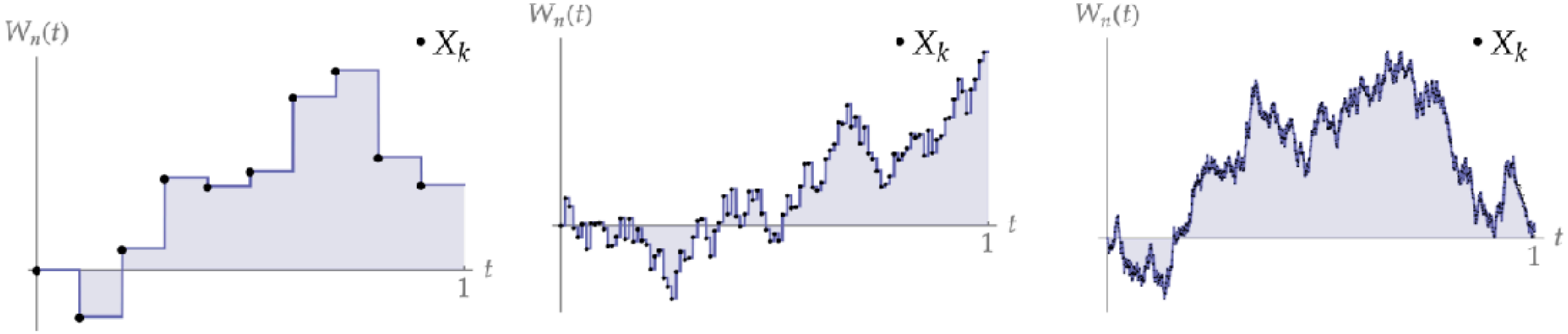


Forrás: Y. Lipman

Differenciálegyenletek

SDE — Véletlen séta, Wiener folyamat

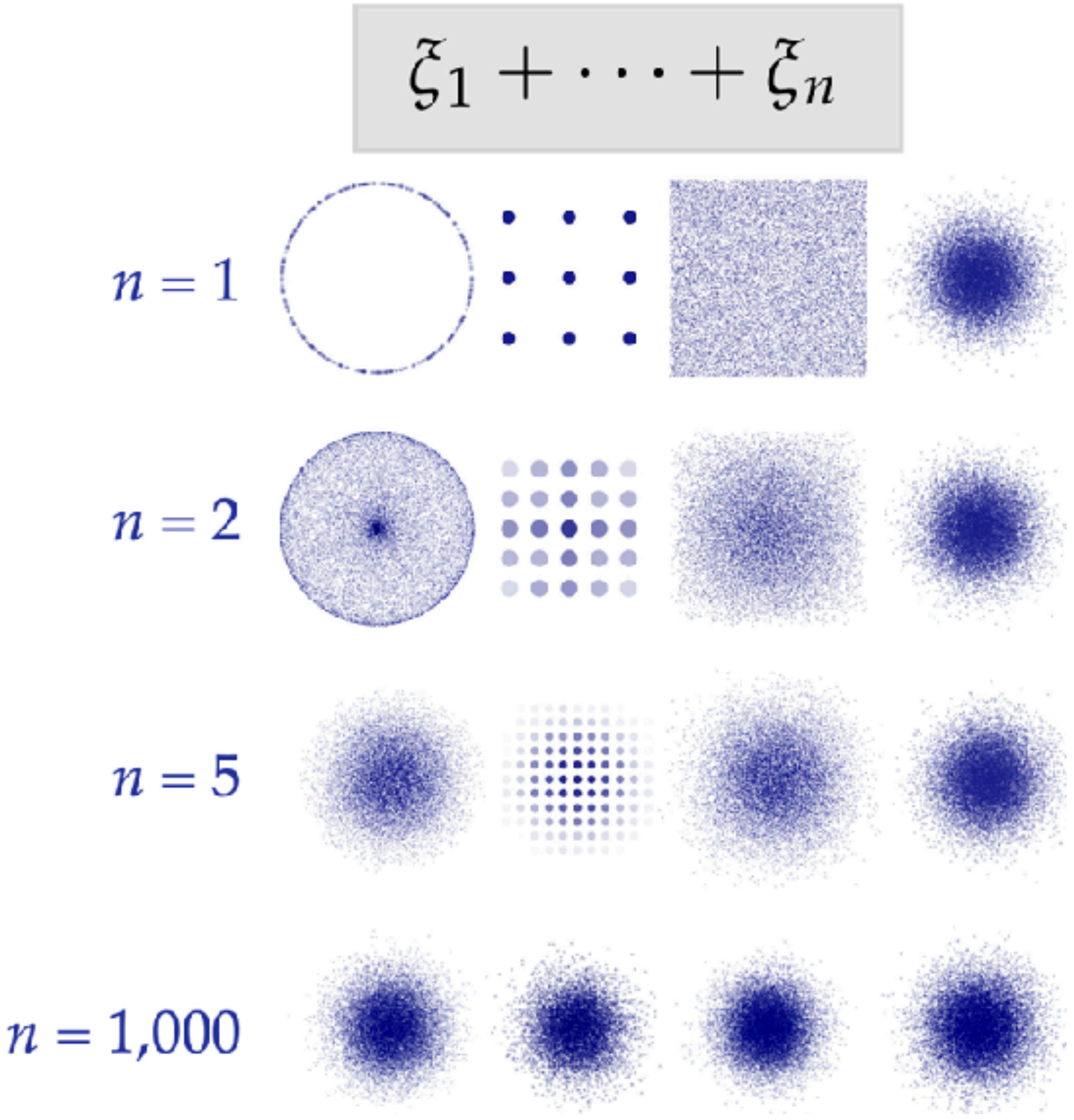




Brown-mozgás / **véletlen séta** — sztochasztikus folyamat
Sok lépés esetén az egyes lépések eloszlása nem számít!
(ld. centrális határeloszlás tétel)

Wiener folyamat — független, *normális eloszlású* inkremensek:

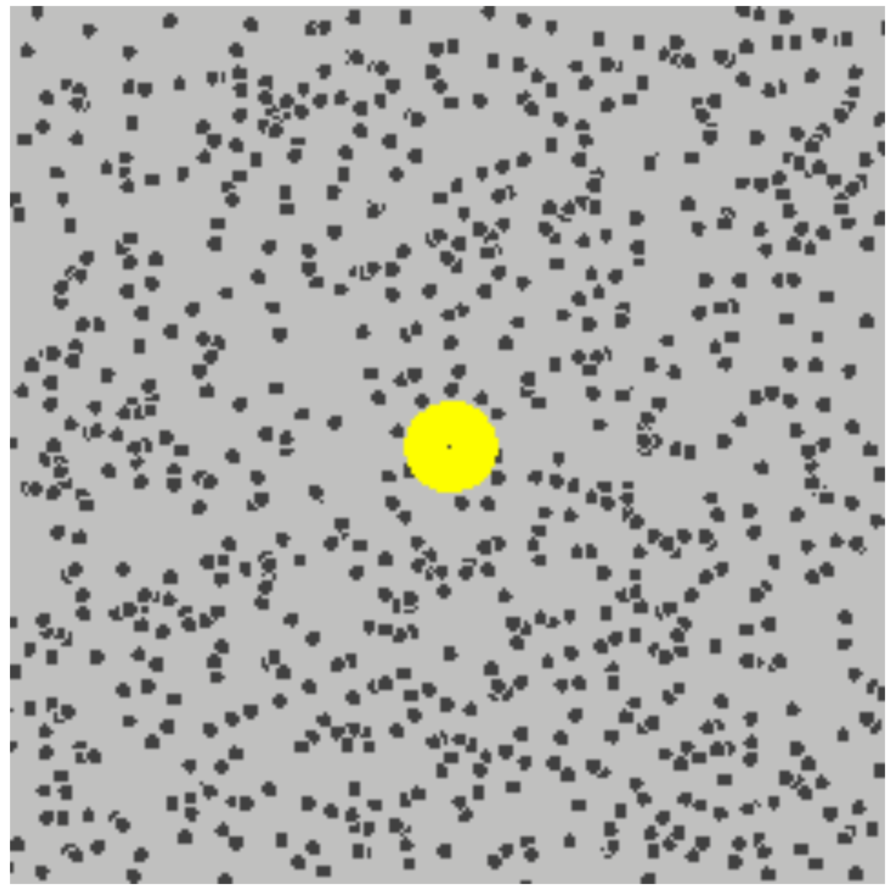
$$dW_t \approx W_{t_2} - W_{t_1} \sim \mathcal{N}(0, t_2 - t_1)$$

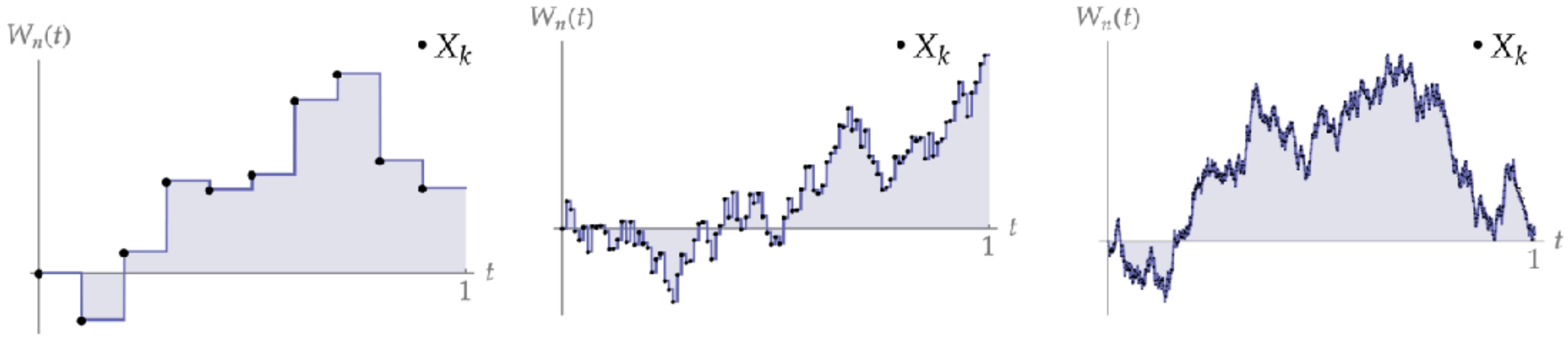


Forrás: K. Crane

Differenciálegyenletek

SDE — Véletlen séta, Wiener folyamat

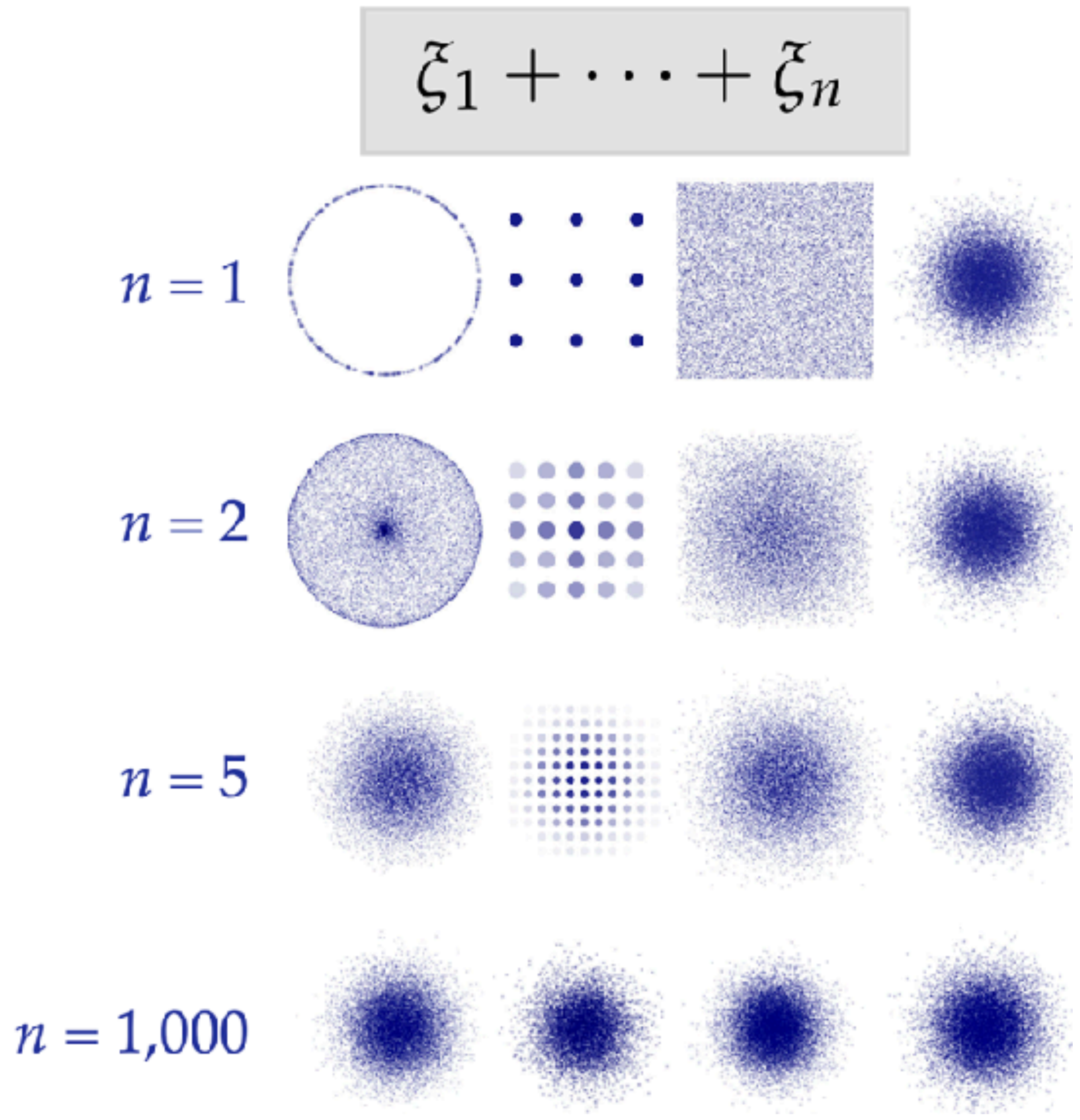




<u>Brown-mozgás</u> / **<u>véletlen séta</u>** — sztochasztikus folyamat
Sok lépés esetén az egyes lépések eloszlása nem számít!
(ld. centrális határeloszlás tétel)

<u>Wiener folyamat</u> — független, *normális eloszlású* inkremensek:

$$dW_t \approx W_{t_2} - W_{t_1} \sim \mathcal{N}(0, t_2 - t_1)$$



Forrás: K. Crane

Differenciálegyenletek

Sztochasztikus Differenciálegyenletek (SDE)

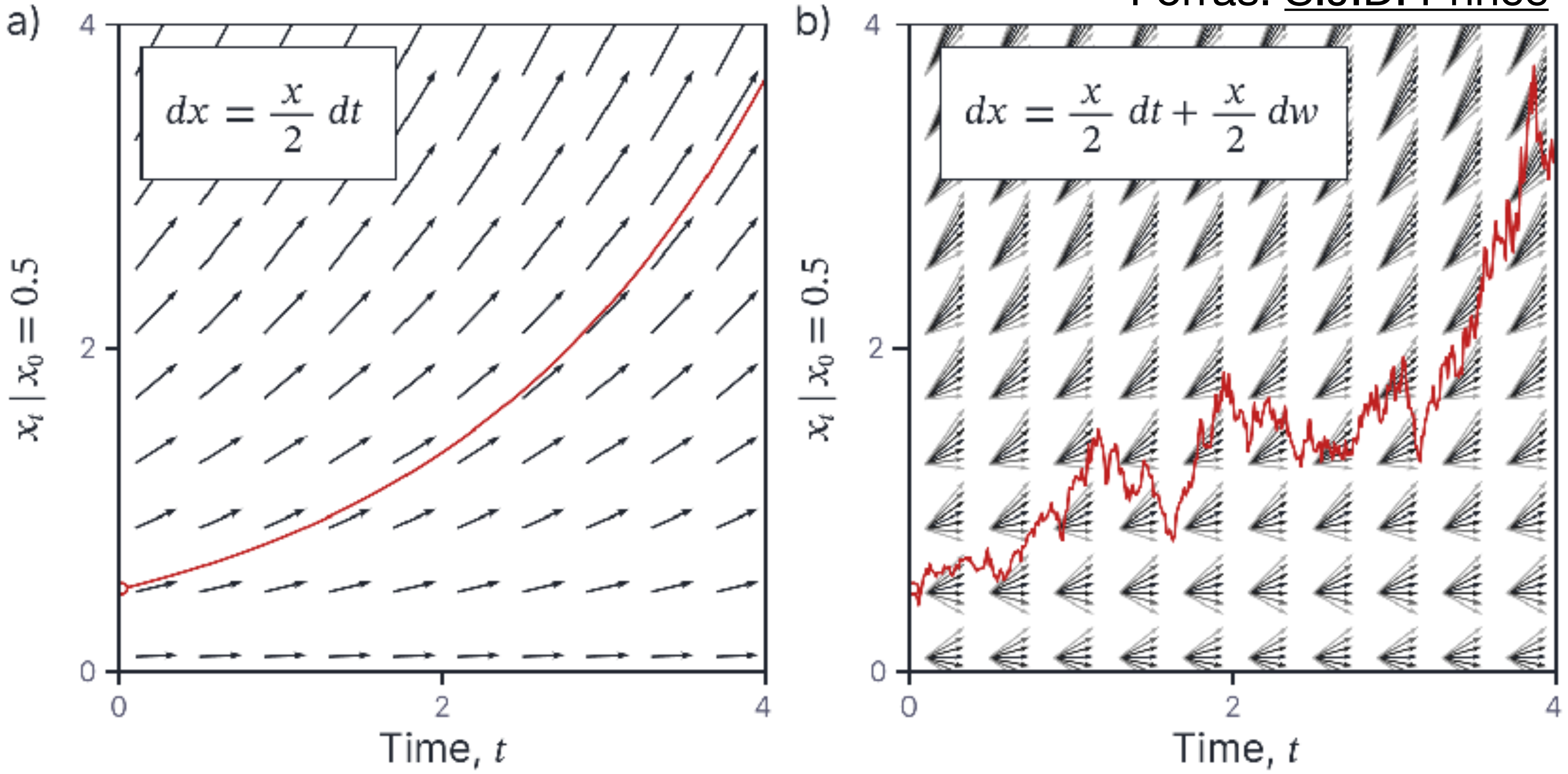
- **Sztochasztikus Differenciálegyenlet (SDE)**:

$$dX_t = \underbrace{f(X_t)dt}_{\substack{\text{Drift} \\ \text{(determinisztikus ODE)}}} + g(\overbrace{dW_t}^{\substack{\text{Brown-mozgás} \\ \text{(stochasztikus folyamat)}}})$$

- **Euler—Maruyama** módszer: Euler lépés + (std. normális) zaj

$$x_{T+1} = x_T + \Delta T \cdot (f(x_T) + \epsilon),\ \epsilon \sim \mathcal{N}(0,1)$$

Forrás: S.J.D. Prince



Valószínűségi eloszlások
Log-likelihood

- Gyakran valószínűségek logaritmusát manipuláljuk (**<u>log-likelihood</u>**): $\log P(x)$
- Linearizálja valószínűségek szorzatát és hányadosát:

$$\log \frac{p(x)q(x)}{r(x)} = \log p(x) + \log q(x) - \log r(x)$$

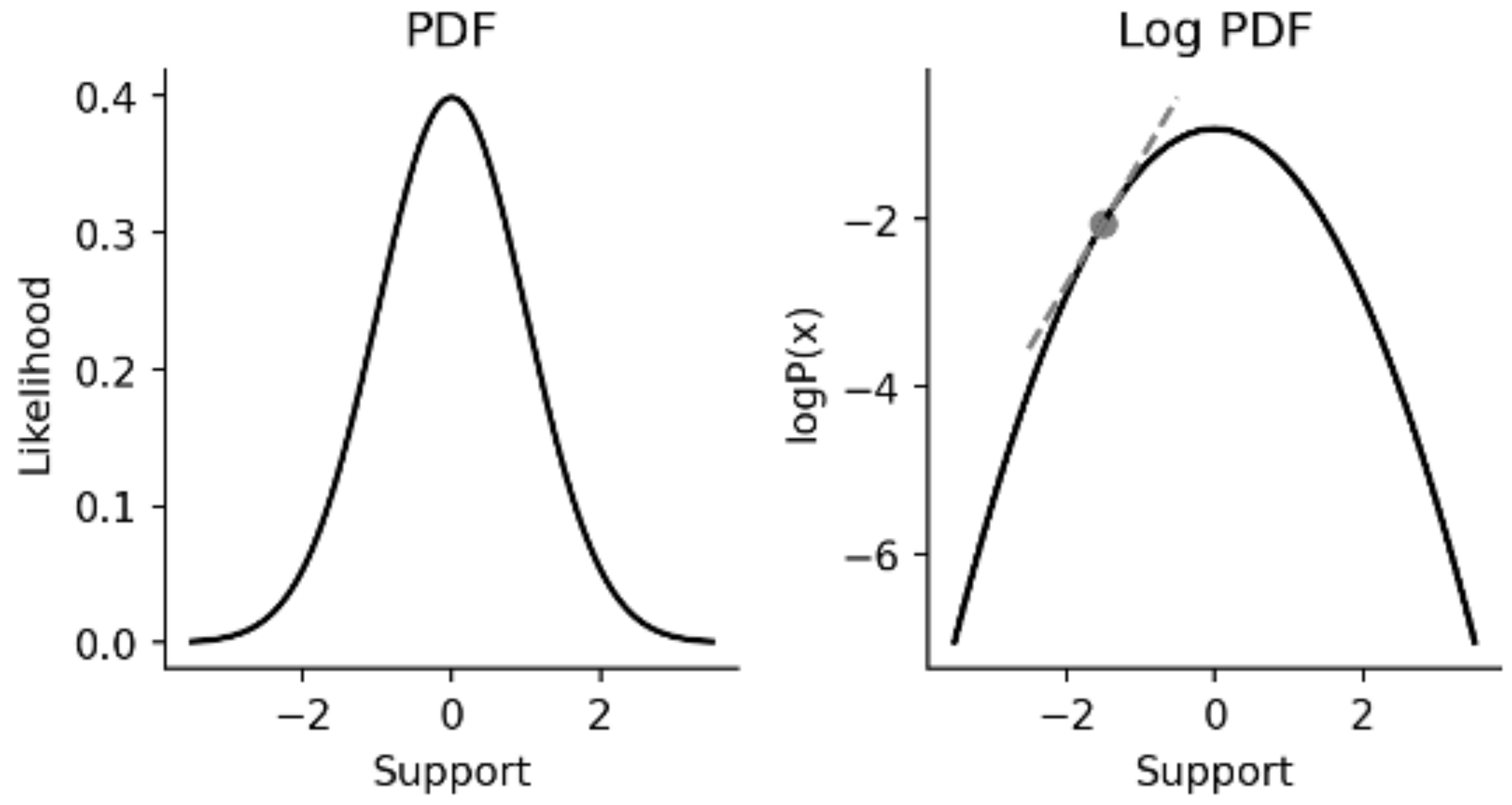
- Sok valószínűségeloszlás log-konkáv függvény!
- **<u>Boltzmann eloszlás:</u>**

$E(x)$: "**<u>energiafv.</u>**"

$$p(x) = \frac{e^{-E(x)}}{\int e^{-E(y)}dy} = \frac{e^{-E(x)}}{Z}$$

Partíció függvény

$$\log p(x) = -E(x) - \underbrace{\log Z}_{\text{konstans!}}$$



Valószínűségi eloszlások

Score függvény

- **<u>“Score” függvény</u>** — log-likelihood gradiense:

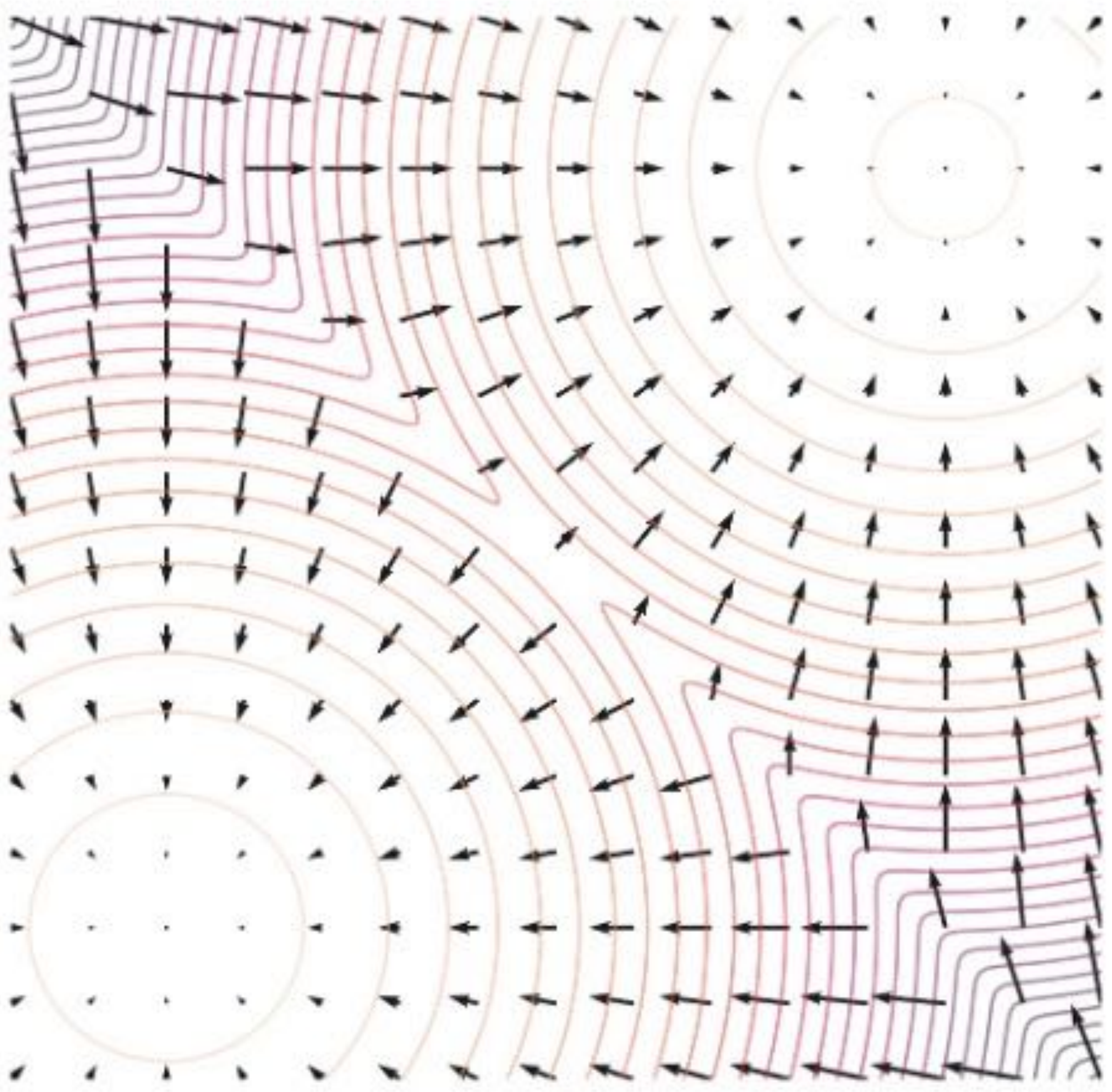
$$\nabla_x \log p(x)$$

- <u>Vektormező</u> —az eloszlás maximumai felé “áramlik”!

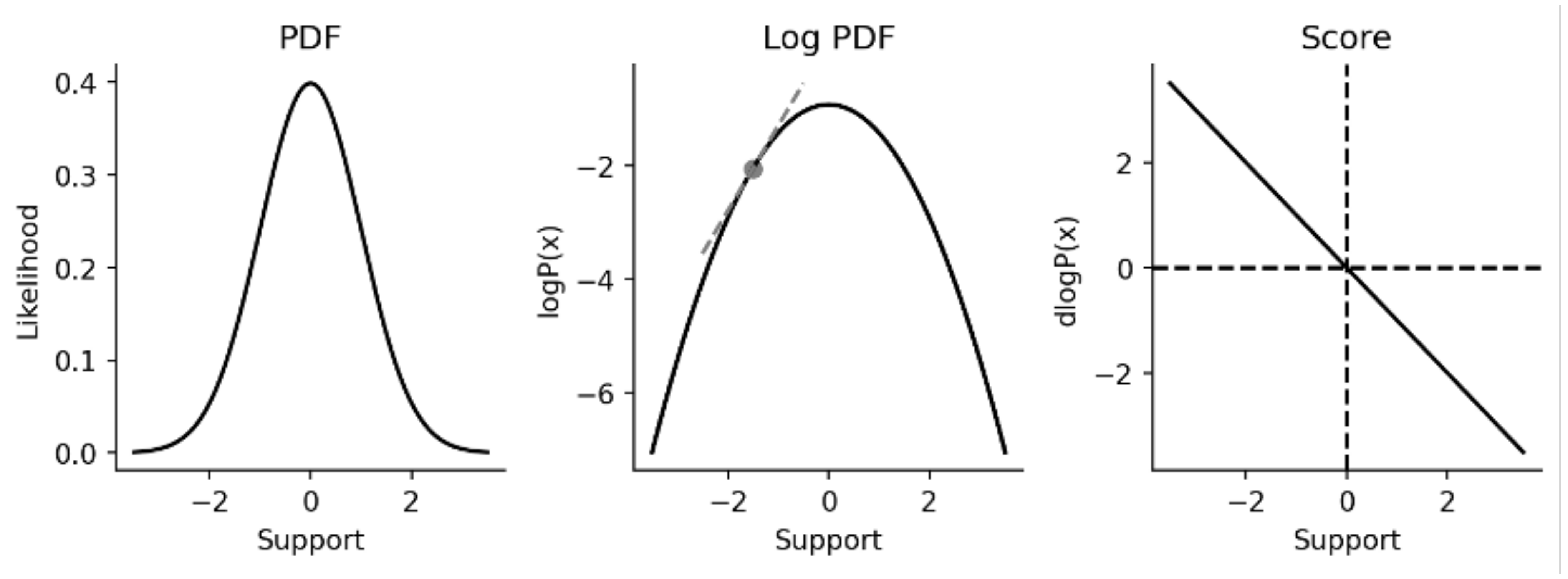
- Boltzmann eloszlásra:

$$\nabla_x \log p(x) = \nabla_x E(x) - \nabla_x \underbrace{\cancel{\int E(x)dx}}_{\text{const}} = \nabla_x E(x)$$

A normalizáció érdektelen!!!



Forrás: Y. Song



Differenciálegyenletek

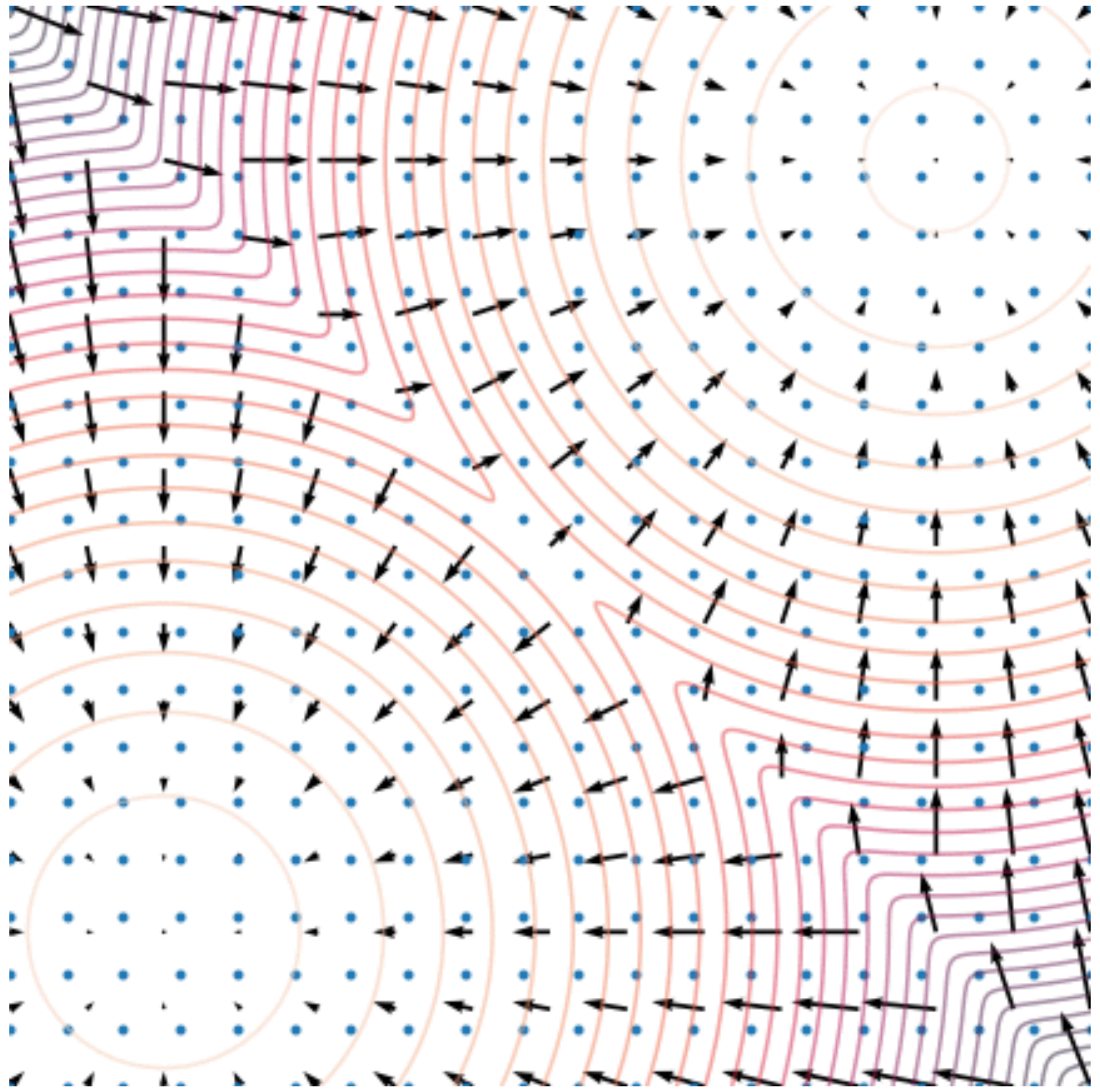
SDE —Langevin dinamika

- **<u>Langevin dinamikai rendszer</u>:** gradient descent a log-eloszlásra (score függvény) + zaj

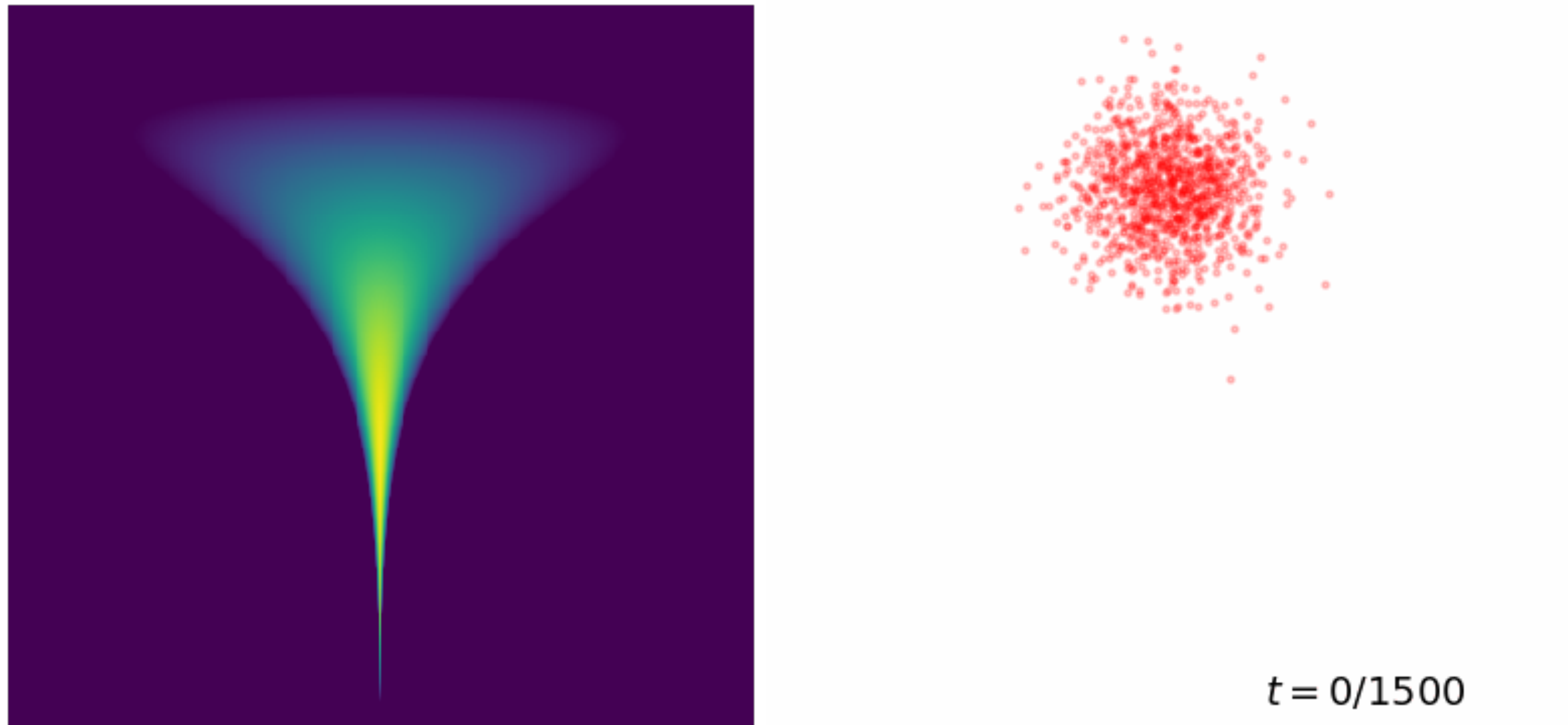
$$x_{k+1} = x_k + \Delta T \cdot \nabla \log p(x_k) + \sqrt{2 \cdot \Delta T} \cdot \epsilon_k$$
$$\epsilon_k \in \mathcal{N}(0,\mathbf{I})$$

- Belátható, hogy a generált minták az eredeti eloszláshoz konvergálnak!

$$x_k \sim p(x),\ k \to \infty$$



Forrás: Y. Song



Forrás: M. Yi

Differenciálegyenletek

SDE —Langevin dinamika

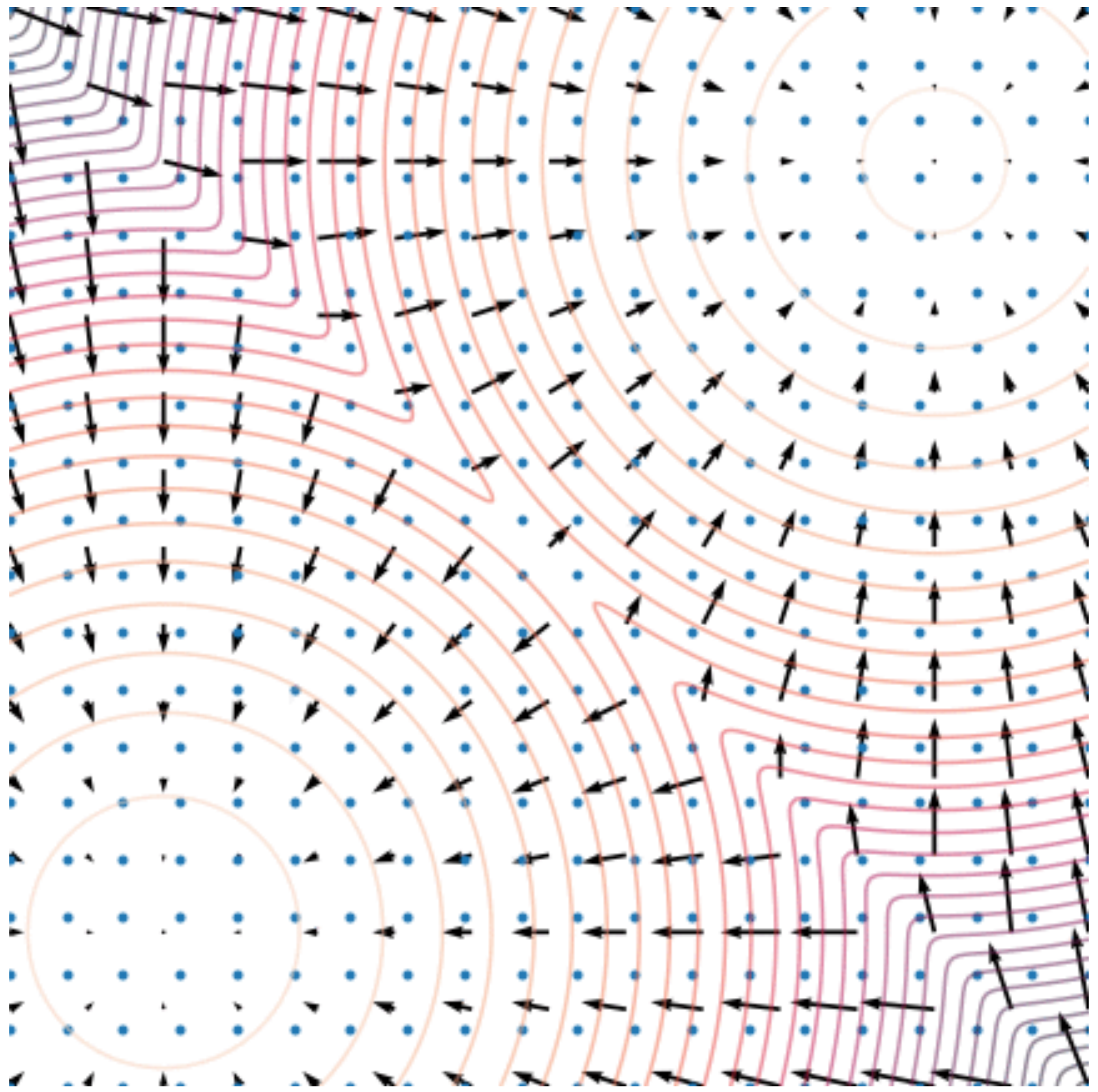
- **Langevin dinamikai rendszer**: gradient descent a log-eloszlásra (score függvény) + zaj

$$x_{k+1} = x_k + \Delta T \cdot \nabla \log p(x_k) + \sqrt{2 \cdot \Delta T} \cdot \epsilon_k$$

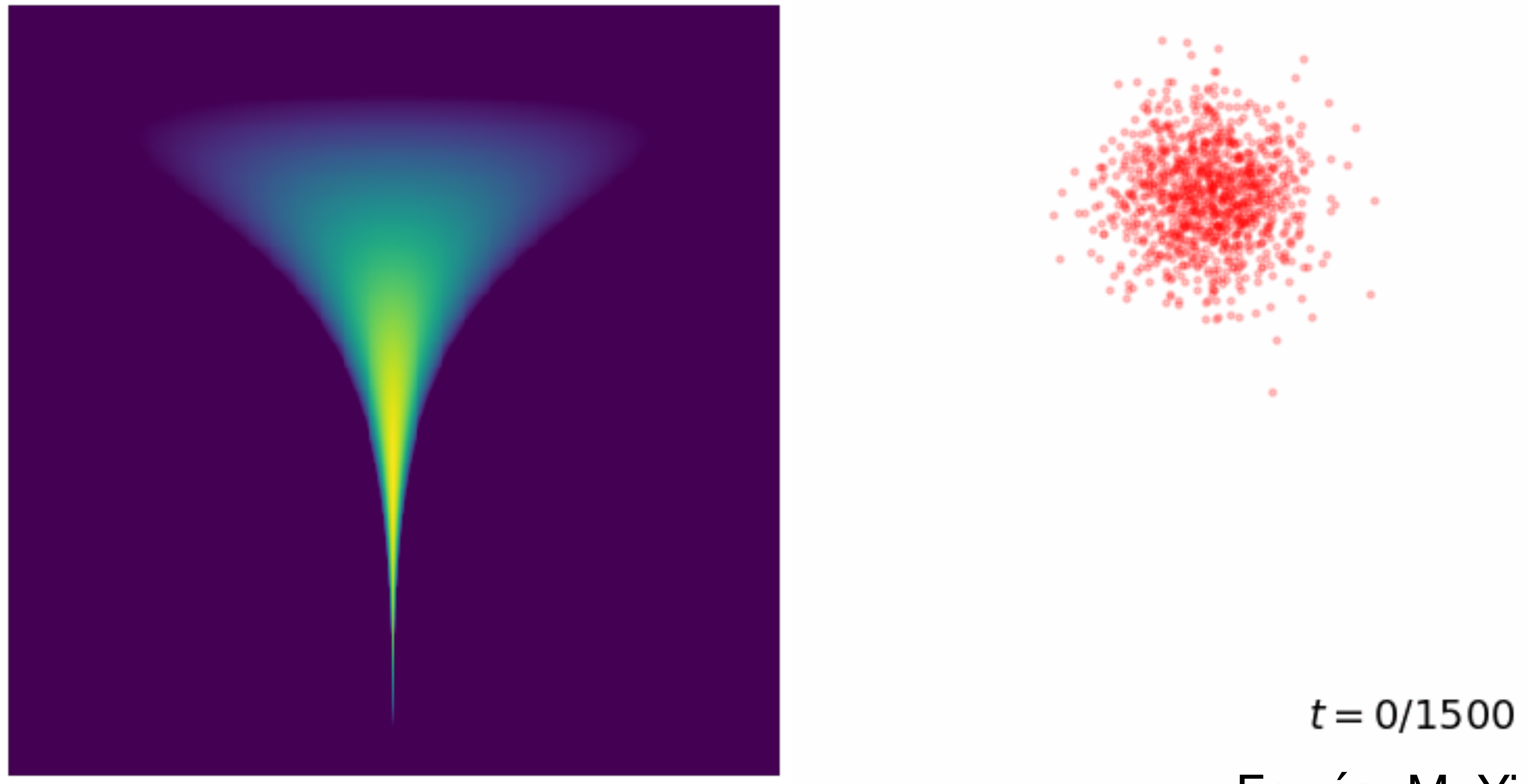
$$\epsilon_k \in \mathcal{N}(0,\mathbf{I})$$

- Belátható, hogy a generált minták az eredeti eloszláshoz konvergálnak!

$$x_k \sim p(x),\ k \to \infty$$



Forrás: Y. Song

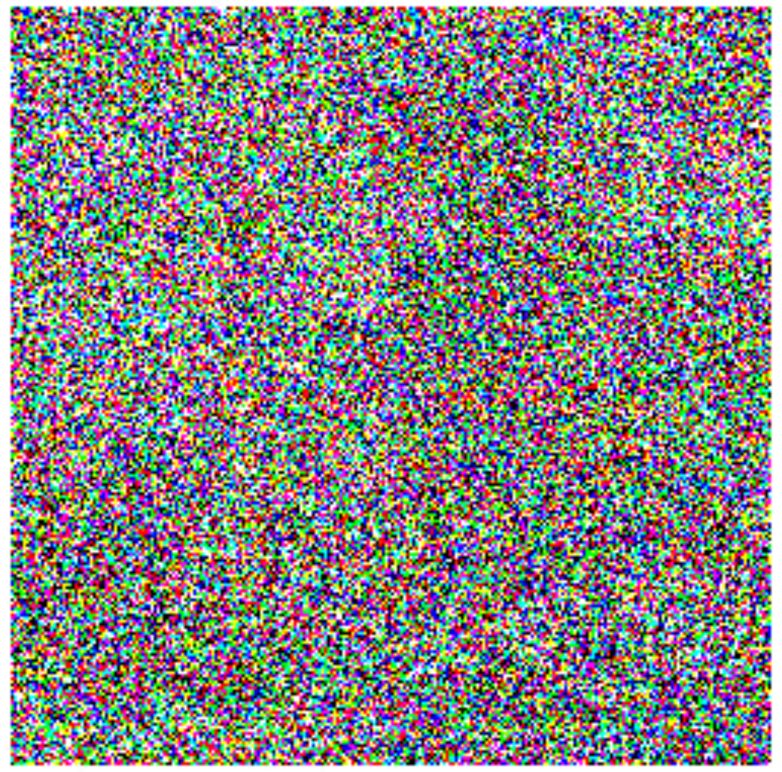


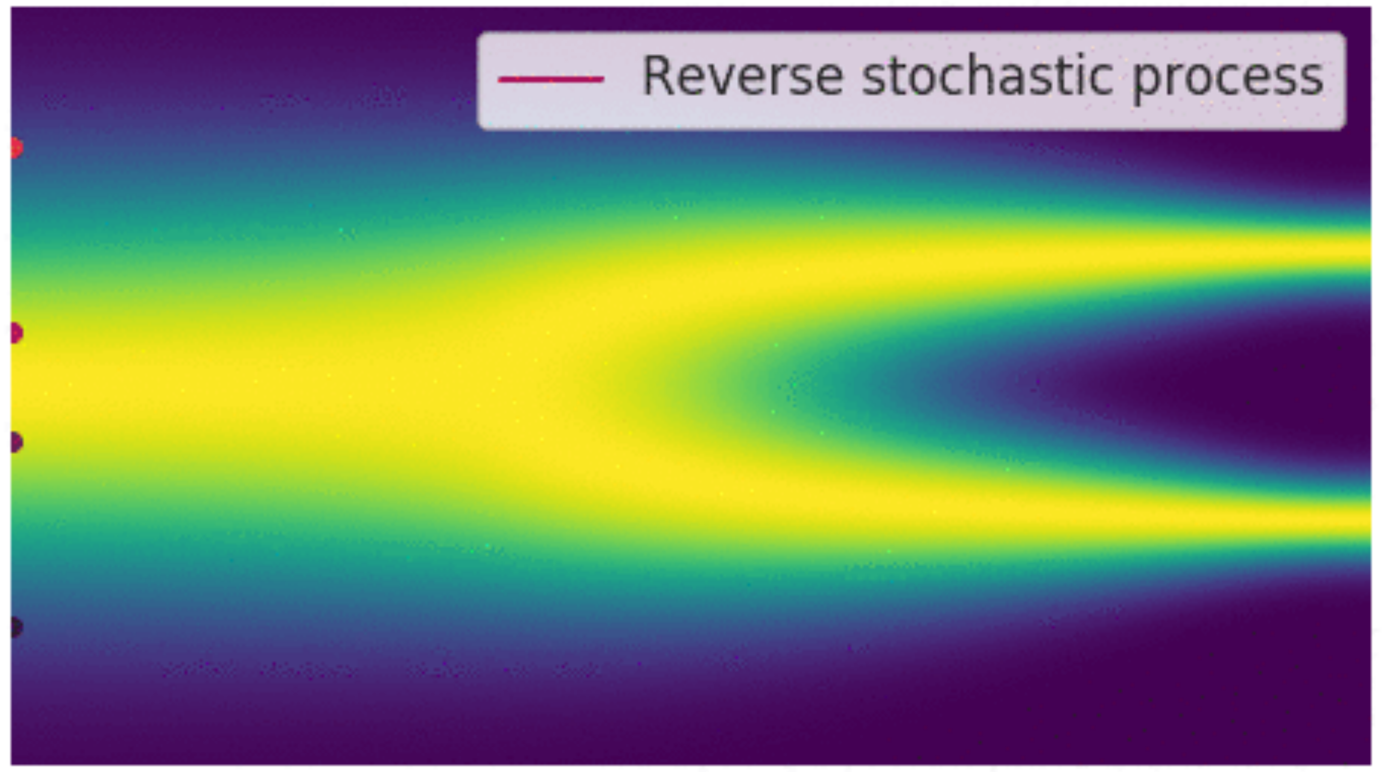
Forrás: M. Yi

Differenciálegyenletek

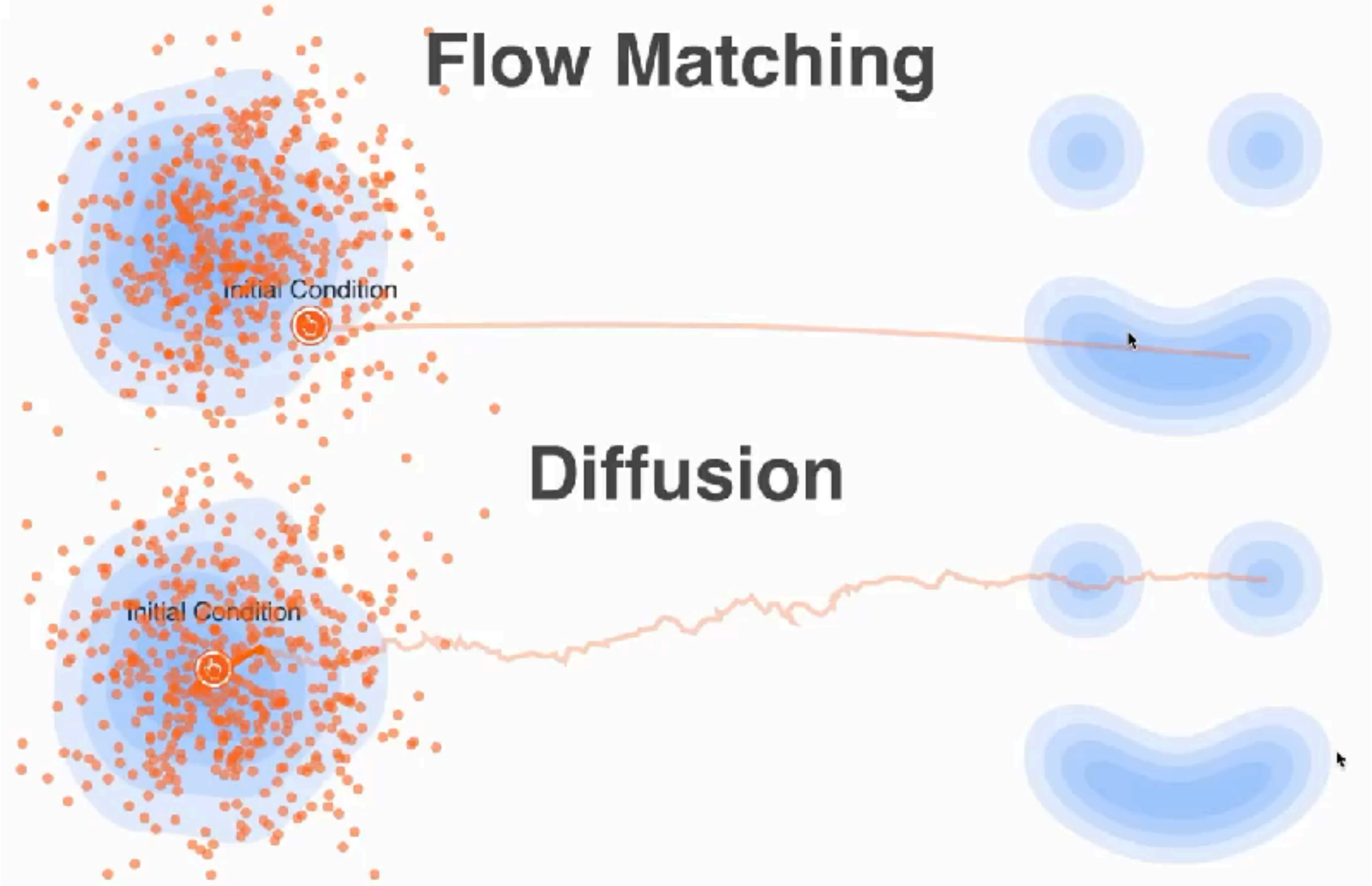
Előretekintés

Forrás: Y. Song





Forrás: A. Helbling

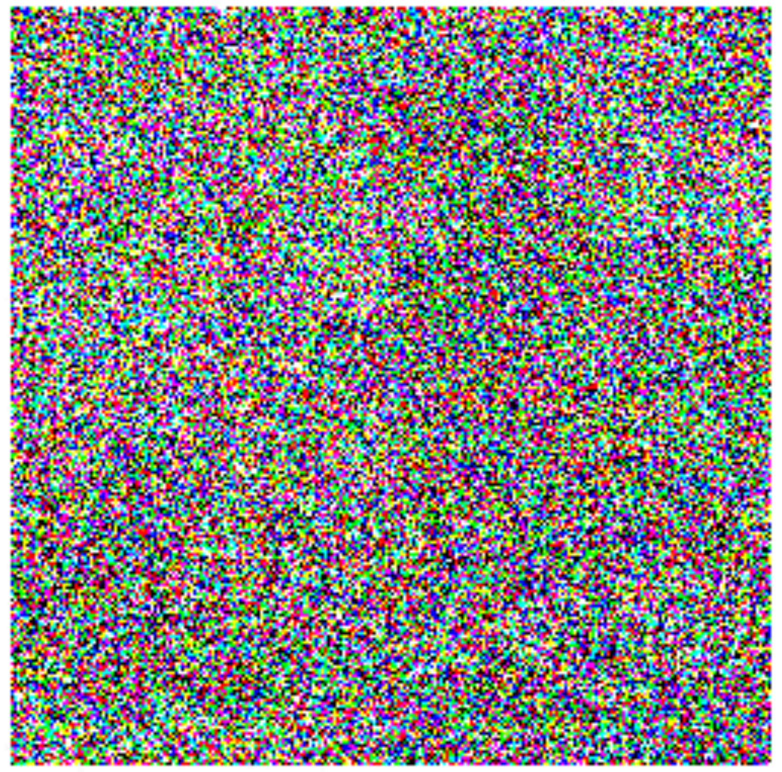


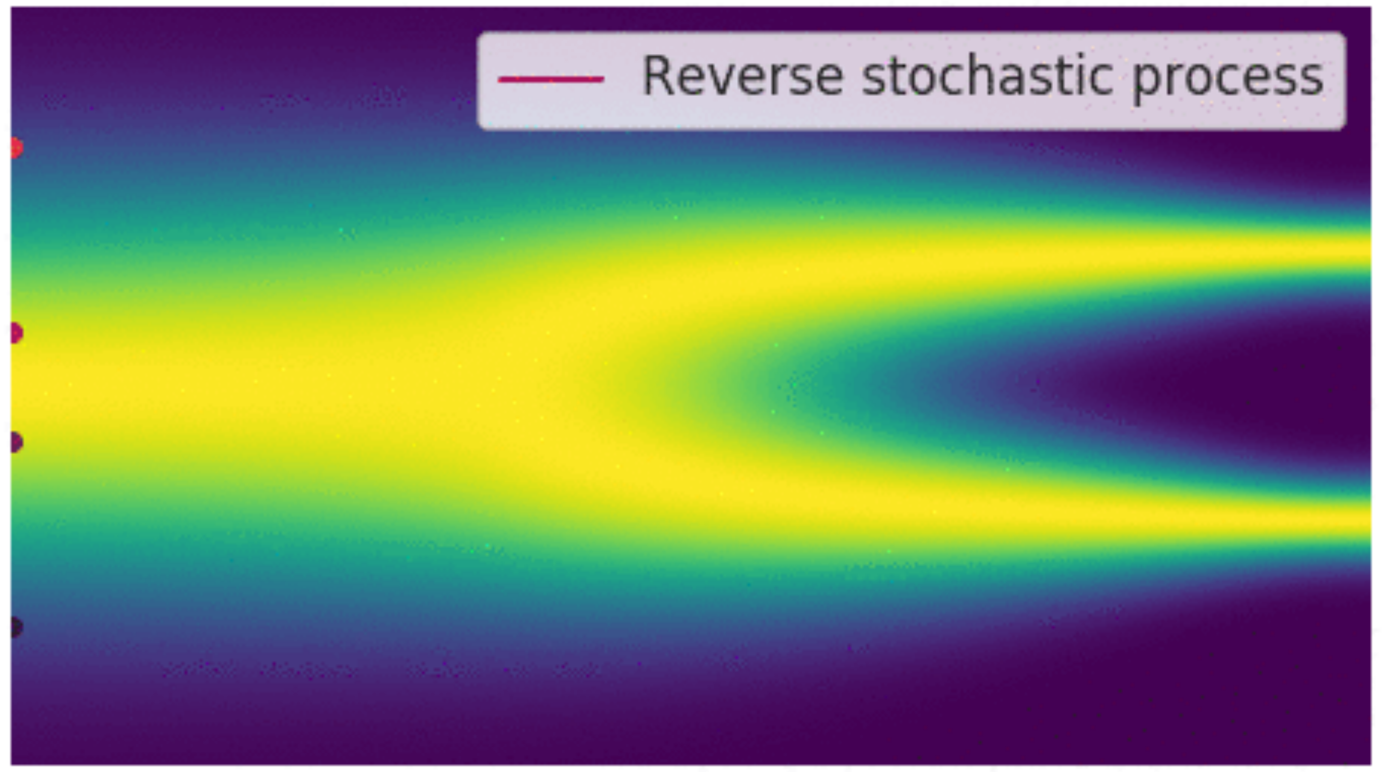
A kurrens diffúziós & folyam-alapú generatív modellek ODE / SDE technikákra épülnek!

Differenciálegyenletek

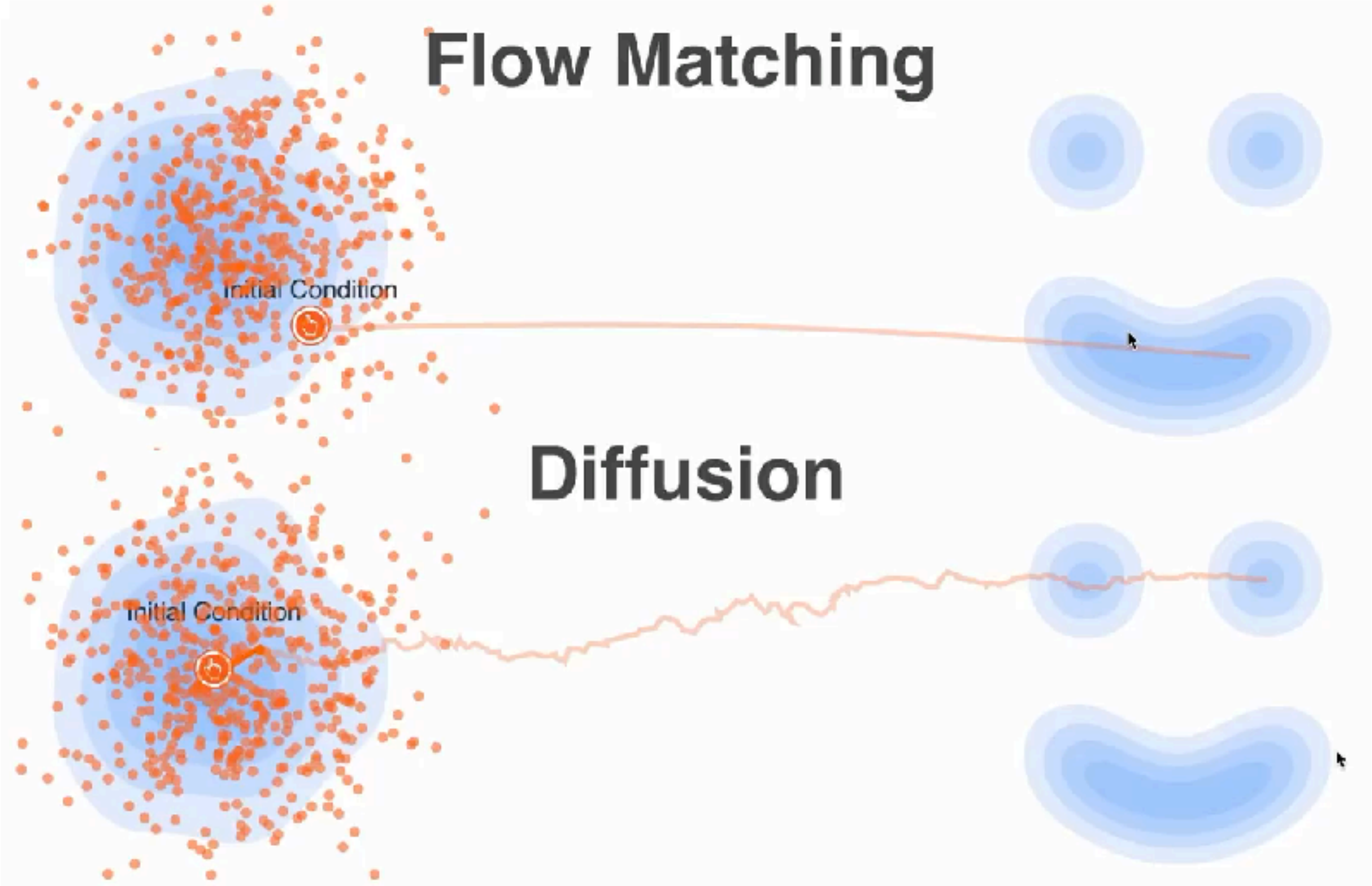
Előretekintés

Forrás: Y. Song





Forrás: A. Helbling

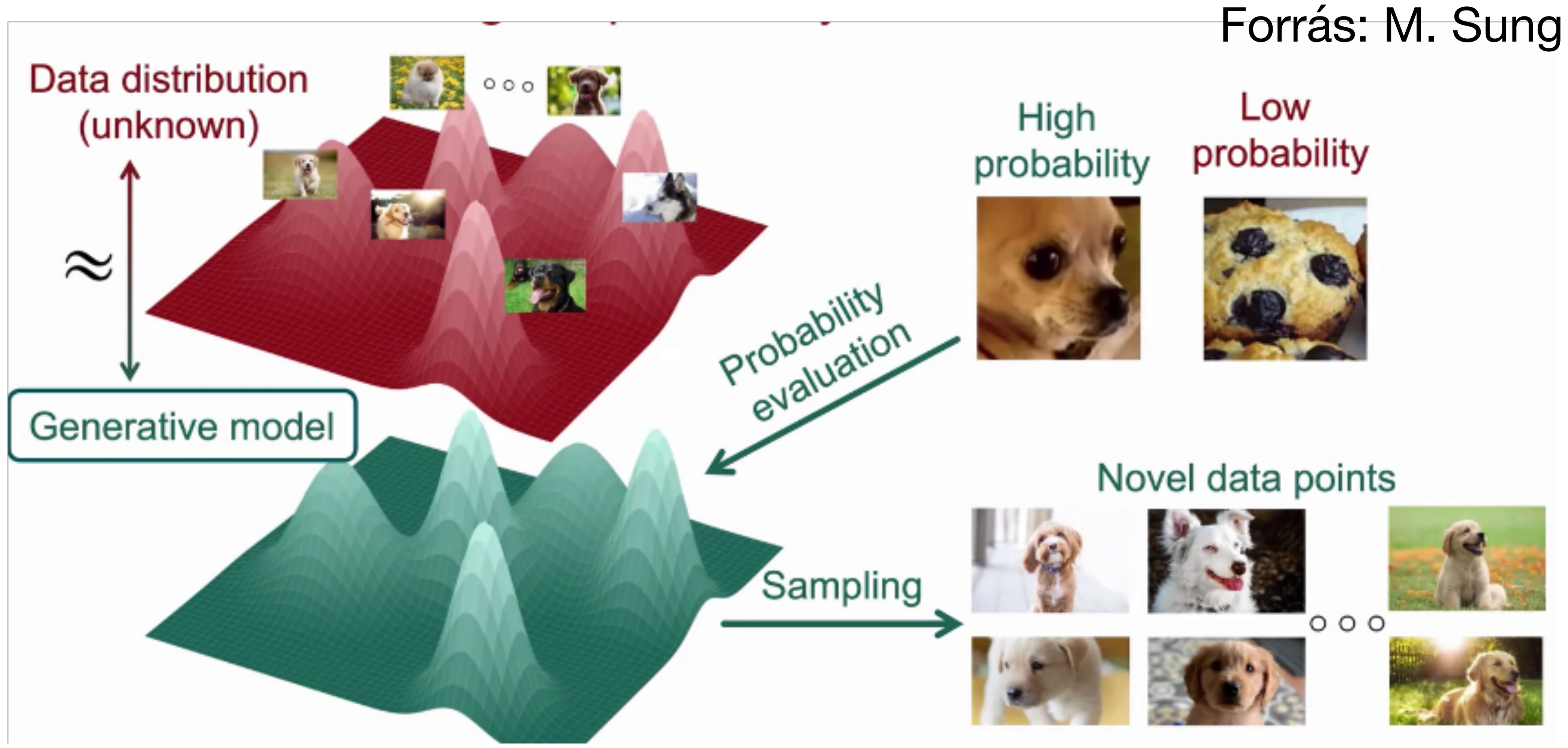


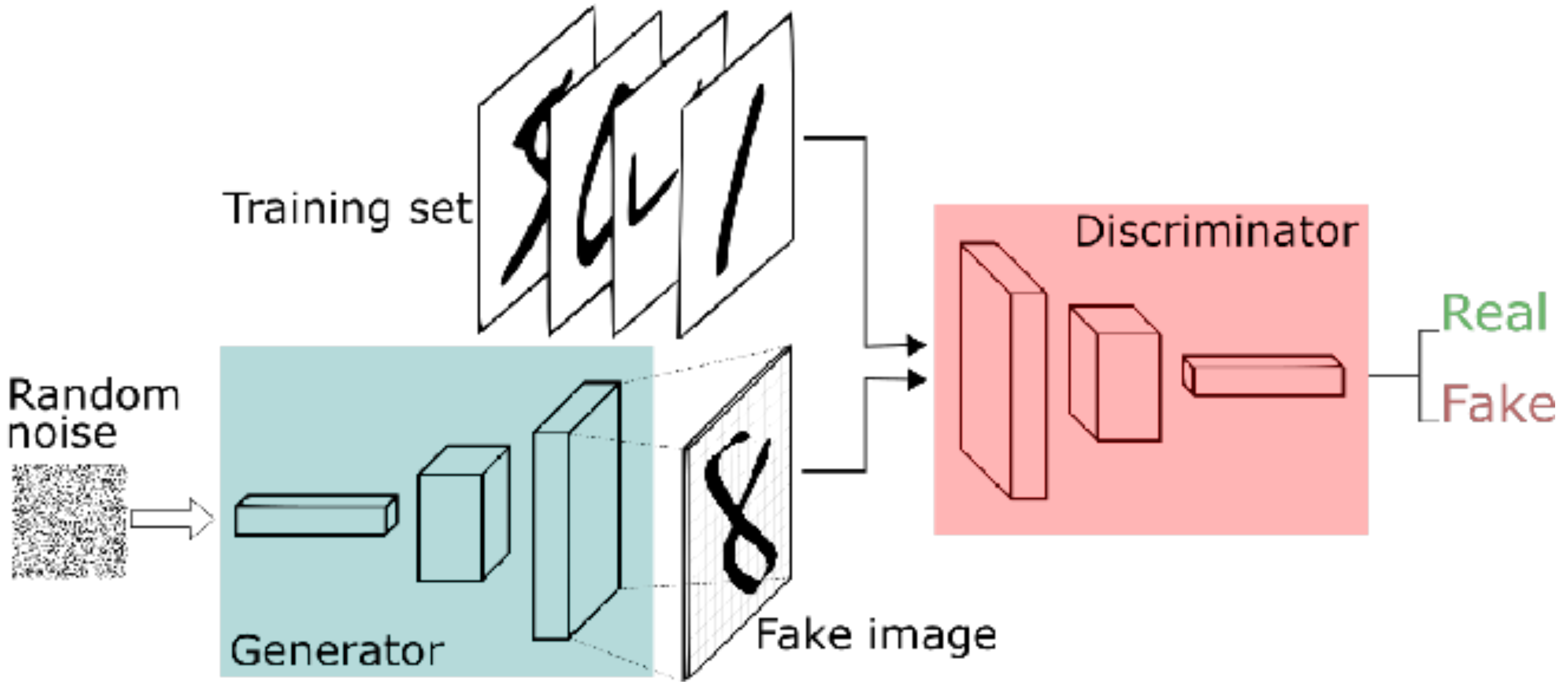
<u>A kurrens diffúziós & folyam-alapú generatív modellek ODE / SDE technikákra épülnek!</u>

Következő előadás:
Generatív modellezés alapjai

- Generatív modell fogalma
- Generatív modellek kiértékelése
- AE, VAE, GAN

Forrás: M. Sung





Forrás: K. Crane