輪講

Probabilistic Machine Learning

19.2.4 – 19.3 (19.3.6除く)

澤田 桂都
戸田研究室 M2
2024/11/08

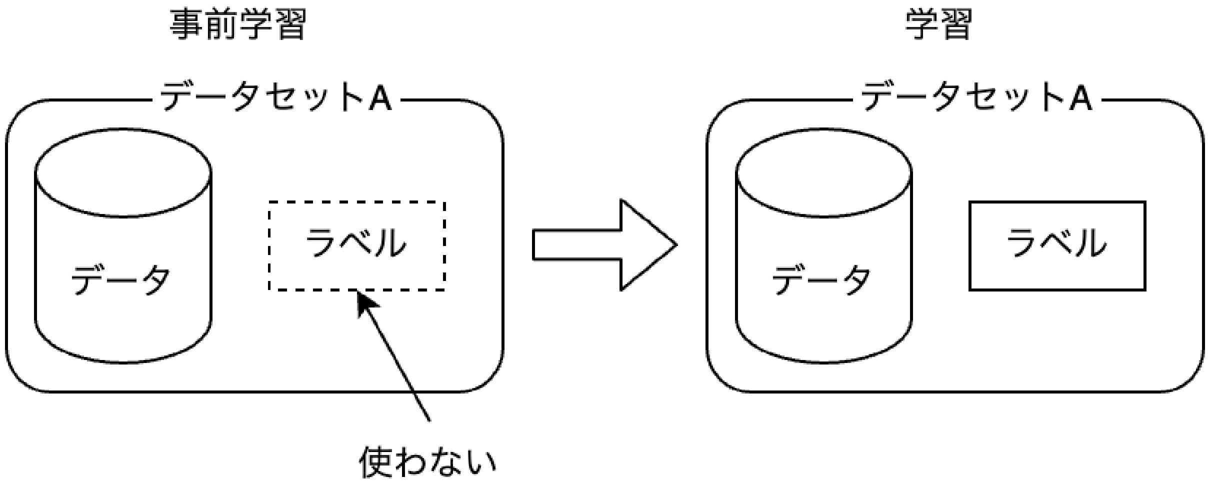
目次(1)

19 Learning with Fewer Labeled Examples

目次(2)

19.2.4 Unsupervised pre-training (self-supervised learning)

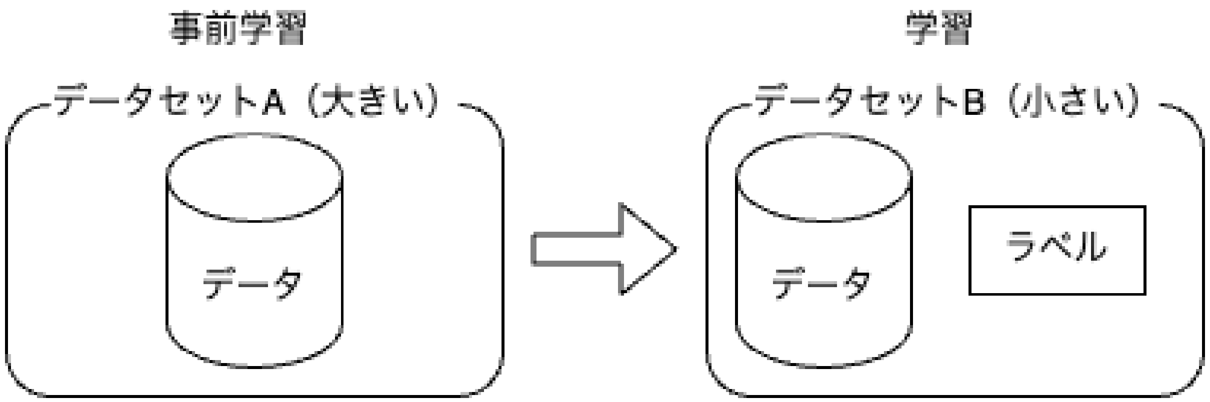
教師なし事前学習



同一のラベル付きデータセットを使った事前学習が一般的 (2000年代)

- 事前学習: ラベルを使わずに教師なし学習
- 本番の学習: ラベルを使って教師あり学習

自己教師あり事前学習



- 事前学習: 大きなラベルなしデータセットで事前学習
- 本番の学習: 小さなラベル付きデータセットでfine-tuning

→ 主要な3つの枠組みについて紹介（19.2.4.1 - 19.2.4.3）

1. 入力xを$x = (x_h, x_v)$に分割
2. モデルがx_vからx_hを推測するように学習
   - 定式化: $\hat{x}_h = f(x_v, x_h = 0)$

NLP分野では「穴埋めタスク」として知られる

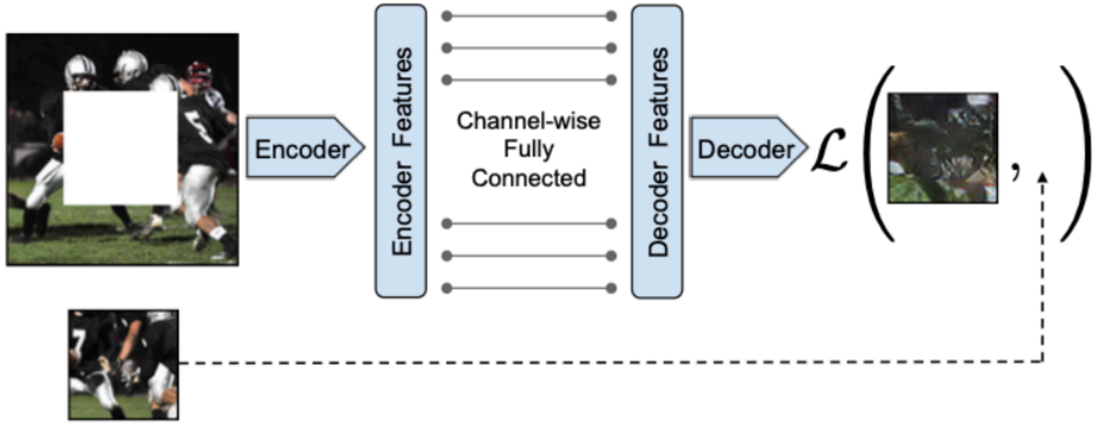
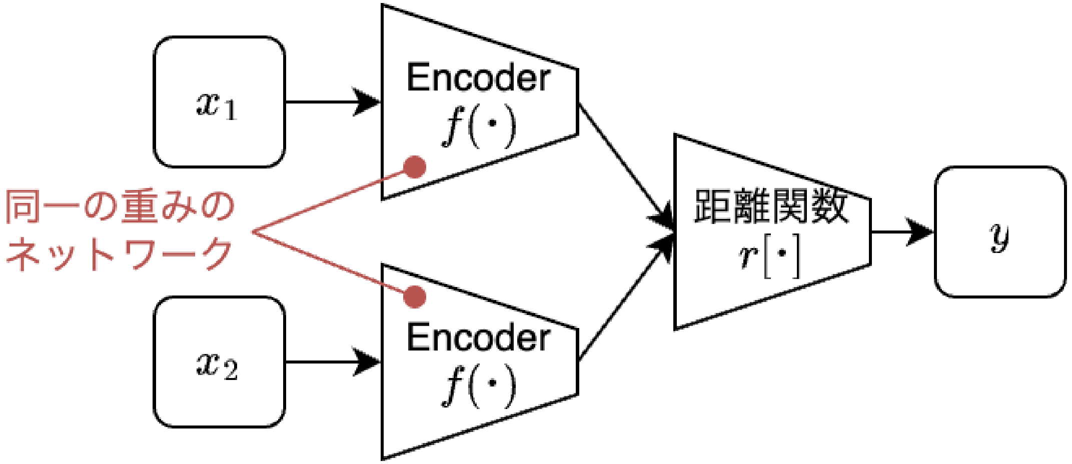


Figure 19.4 (a) 画像タスクでのContext-encoderに対する適用

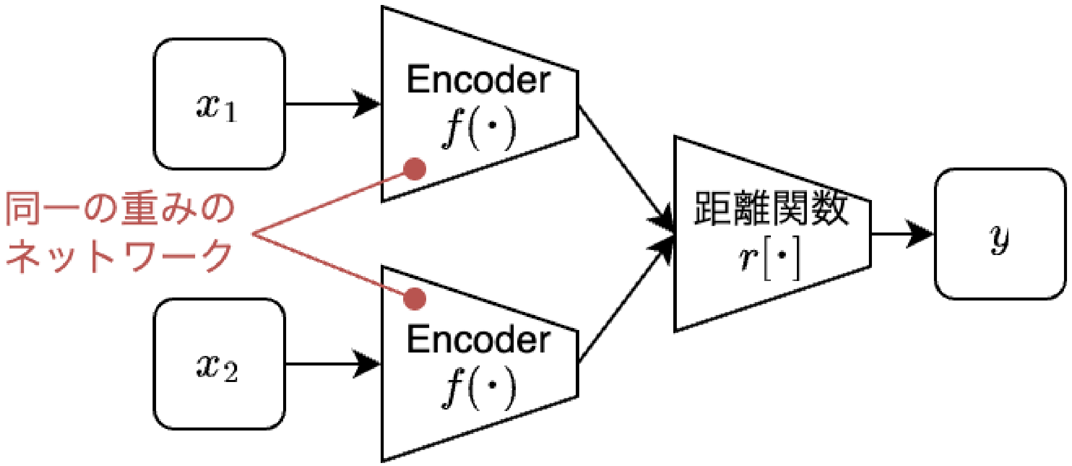
Siamese Network

1. 2つの入力x_1, x_2に対して同一のネットワークを使って特徴量を抽出
2. 特徴量感の距離からx_1, x_2が同じクラスに属するかどうかを判定
    - 距離関数にはニューラルネットワークを使うこともある



Siamese Networkの構造

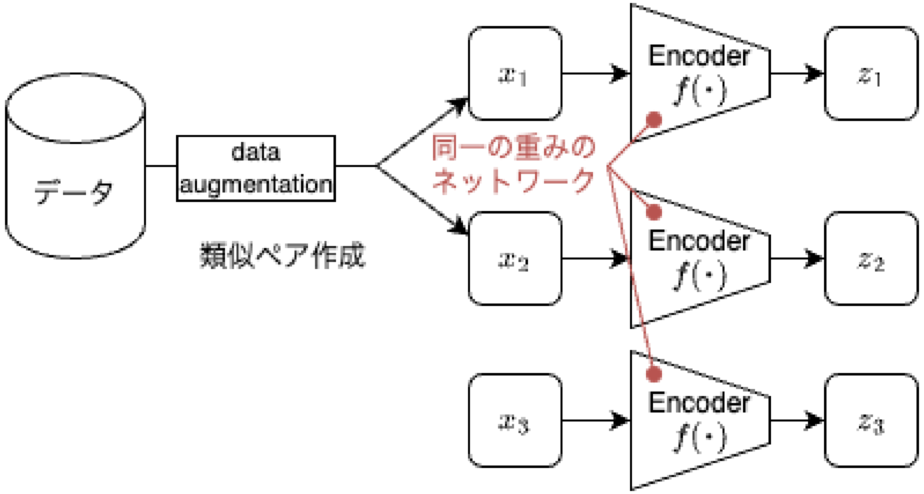
1. 入力のペア(x_1, x_2)を作成
   - 例: x_2はx_1に回転処理を加えたもの ($x_2 = t(x_1)$)
2. Siamese Networkに両者を入力して得た出力 y で事前学習
   - $p(y|r[f(x_1), f(x_2)])$
   - 例: yが回転角度になるように学習



Siamese Networkの構造（再掲）

19.2.4.3 Contrastive tasks

- data augmentation (19.1)によって意味が似たデータペアを作成
- 埋め込み空間での両者の距離が，無関係なペアより近くなるよう学習



$d[z_1, z_2] < d[z_1, z_3]$
となるように学習

※ Deep Metric Learning (16.2.2) との違い

- DMLでは，外部から与えられる類似度ラベルを使う
- Contrastive tasksでは，ラベルなしデータから類似したペアを作成

19.2.4.4 SimCLR (Contrastive tasksの例1)

SimCLR: **Sim**ple **C**ontrastive **L**earning of visual **R**epresentations
転移学習と半教師あり学習でSoTAを達成

1. $x_1 = t_1(x), x_2 = t_2(x)$ をデータxから作成
    - これらは意味的に等価な，xの "view"
    - 例: 画像の回転，切り抜きなど
2. xと意味的に異なる "negative" サンプル $x_1^-, \dots, x_n^- \in N(x)$ をデータセットからサンプリング
3. $F: \mathbb{R}^D \to \mathbb{R}^E$を，$x$に対する類似度を基準に学習
    - D: 入力データの次元，E: 埋め込み空間の次元

19.2.4.4 SimCLR (Contrastive tasksの例1)

- 類似するviewの類似度を最大化&異なるviewの類似度を最小化
  $J = F(t_1(x))^T F(t_2(x)) - \log \sum_{x_i^- \in N(x)} \exp[F(x_i^-)^T F(t_1(x))]$
  (19.7)

※ 元論文に上式の記載がなく，出元や意図が不明

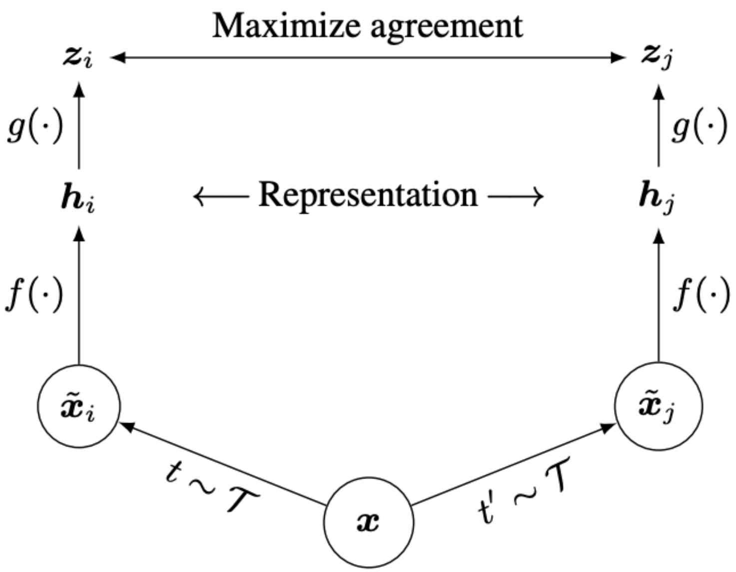


Figure 19.5 (a)

- $F(x) = g(r(x))$と仮定
- $h = r(x)$ はfine-tuningで使用

19.2.4.4 SimCLR (Contrastive tasksの例1)

条件付きのエネルギーベースモデル（energy based model: EBM）

- $p(x_2|x_1) = \frac{\exp[-\epsilon(x_2|x_1)]}{Z(x_1)}$ (19.8)
    - $\epsilon(x_2|x_1) = -F(x_2)^T F(x_1)$: エネルギー関数
    - $Z(x) = \int \exp[-\epsilon(x^-|x)]dx^- = \int \exp[F(x^-)^T F(x)]dx^-$:正則化定数（統計力学における分配関数） ← (19.8) 分子の積分
- $\log(p(x_2|x_1)) = F(x_2)^T F(x_1) - \log \int \exp[F(x^-)^T F(x)]dx^-$
    - (19.8)の対数尤度を取ると，(19.7)と同じ形になる
    - $F(t_1(x))^T F(t_2(x)) - \log \sum_{x_i^- \in N(x)} \exp[F(x_i^-)^T F(t_1(x))]$ (19.7)
    - 積分を"negative"サンプルから得られるモンテカルロ上界で置換
    - → Contrastive Learningは条件付きエネルギーベース生成モデルの最尤推定と解釈可能

SimCLR の鍵

random cropによるdata augmentation

- (b)全体像から局所的な箇所の推定
- (c)画像の隣り合った部分の推定
- トリミング後に同じサイズになるようにリサイズ

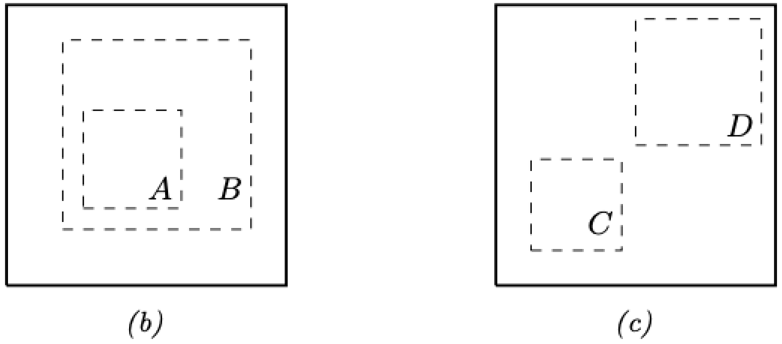


Figure19.5 (b), (c)

19.2.4.5 CLIP (Contrastive tasksの例2)

CLIP: **C**ontrastive **L**anguage-**I**mage **P**re-training
web上のテキストx_i-画像y_iのペア40億個を使った表現学習

ポイント:

- y_iに対応するテキストx_iの正確な推定は困難
- ある画像y_iに対して，x_i, x_jのどちらが適するかの判定は比較的容易
- あるテキストx_iに対して，y_i, y_jのどちらが適するかの判定も容易

19.2.4.5 CLIP (Contrastive tasksの例2)

損失関数

$$J = \frac{1}{2}\left[\sum_{i=1}^{N} \mathrm{CE}(\mathbf{L}_{i,:}, \mathbf{l}_i) + \sum_{j=1}^{N} \mathrm{CE}(\mathbf{L}_{:,j}, \mathbf{l}_j)\right]$$

- 画像の埋め込み$f_I(x_i)$，
  テキストの埋め込み$f_T(y_i)$に対して
  $L_{ij} = \frac{f_I(x_i)}{\mathrm{Norm}(f_I(x_i))} \frac{f_T(y_i)}{\mathrm{Norm}(f_T(y_i))}$
- ラベルiに対するone-hot表現 $\mathbf{l}_i$
- f_I: ResNetとvision transformer
- f_T: text transformer

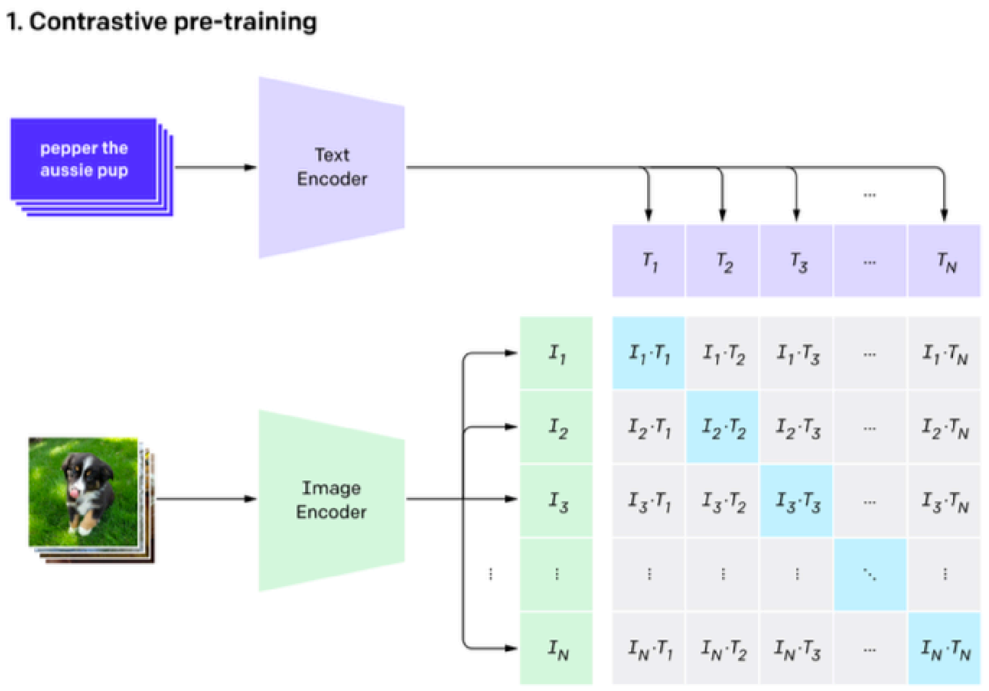
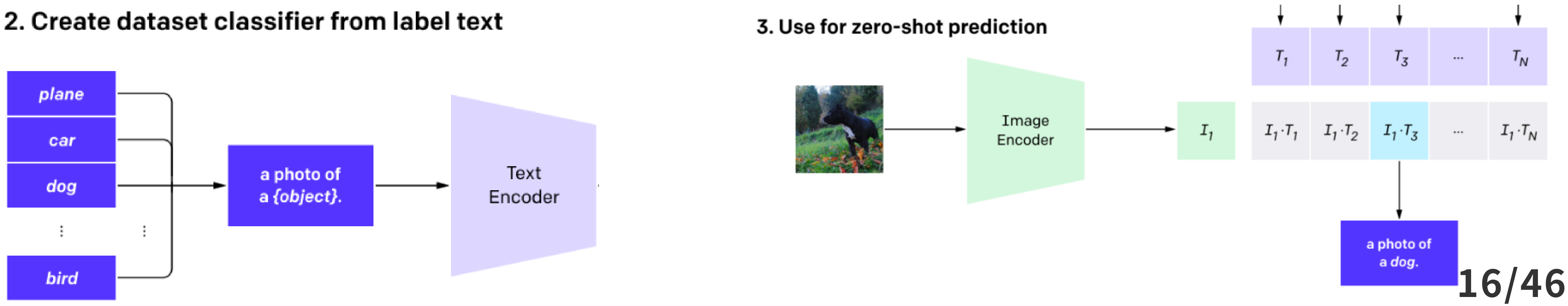


Figure 19.7 (a)

学習後のzero-shot分類 (Figure19.7 (b))

- データセット中のK個のクラスラベルを実際のテキスト y_k に変換
- 正規化埋め込み $I \propto f_I(x), T_k \propto f_T(y_k)$ を計算
- softmaxにより確率を計算
  - $p(y=k|x) = \mathrm{softmax}([\mathbf{I}^T\mathbf{T}_1, ..., \mathbf{I}^T\mathbf{T}_k])_k$



19.2.4.5 CLIP (Contrastive tasksの例2)

長所

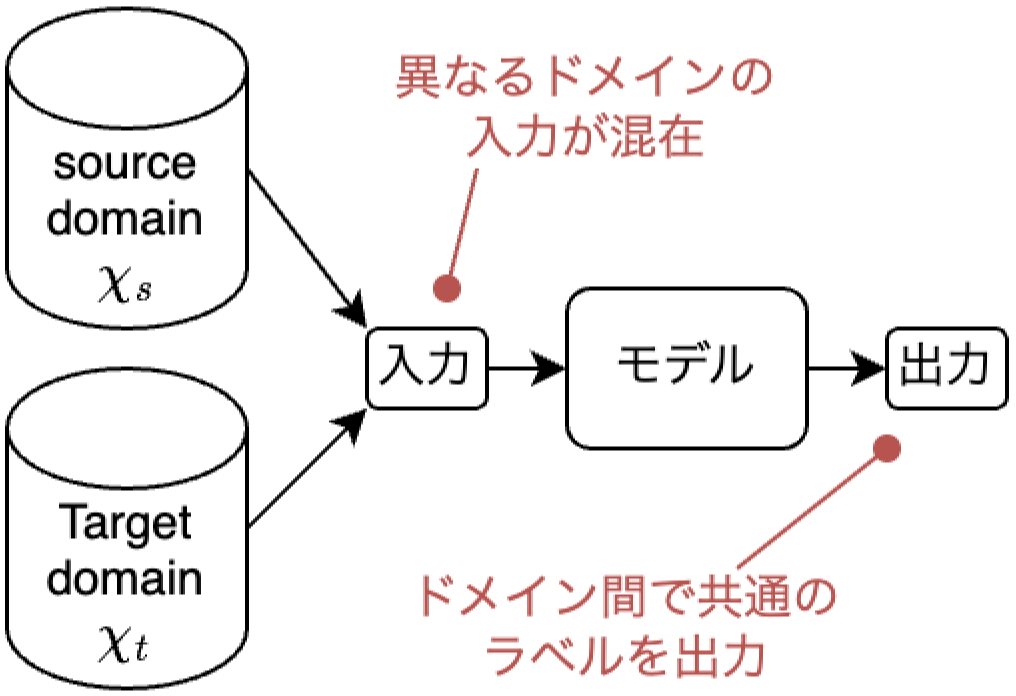
- 教師あり手法（ImageNetデータセットの分類など）と同等の性能
  - 汎化性能と分布の変化への頑健性 → 詳細: 元論文

短所

- ラベルからテキストの変換形式に敏感→**prompt engineering**が必要
  - 例: 食品分類の場合は "a photo of guacamole, a type of food"などの形式が必要
  - 曖昧性排除のためのテキスト"a type of food" などを人手で付与

19.2.5 Domain adaptation

問題設定: 2つのドメインの入力に対して，共通のラベルを出力



- 転移学習における「双対性」
- 例: CG画像と現実の画像，商品レビューと映画レビュー

19.2.5 Domain adaptation

目標: ソースドメインで学習・ターゲットドメインでfine-tuning
→ (Unsupervised) **domain adaptation** ((教師なし)ドメイン適合)

手法

- 入力がソースかターゲットか区別できない状況下でソース分類器を学習
  - **domain adversarial learning** (ドメイン敵対的学習)
  - **gradient sign reverse trick** によって実装可能
    - 損失関数の符号によって目的関数の最大化/最小化を切り替え
  - GANと関連アリ

19.2.5 Domain adaptation

目的関数

$$\min_{\phi} \max_{\theta} \frac{1}{N_s+N_t} \sum_{n \in \mathcal{D}_s, \mathcal{D}_t} \ell(d_n, f_\theta(\boldsymbol{x}_n)) + \frac{1}{N} \sum_{m \in \mathcal{D}_s} \ell(y_m, g_\phi(f_\theta(\boldsymbol{x}_m)))$$

- $N_s = |\mathcal{D}_s|, N_t = |\mathcal{D}_t|, d_n \in \{s, t\}, f : \chi_s \cup \chi_t \mapsto \mathcal{H}, g : \mathcal{H} \mapsto \mathcal{Y}_t$
- source domainのラベルyの分類をするタスクの損失を最小化
- domain d の分類をする補助タスクの損失を最大化
- $\min_{\phi} \max_{\theta}$ の切り替えのために符号の反転
  - gradient sign reverse trick

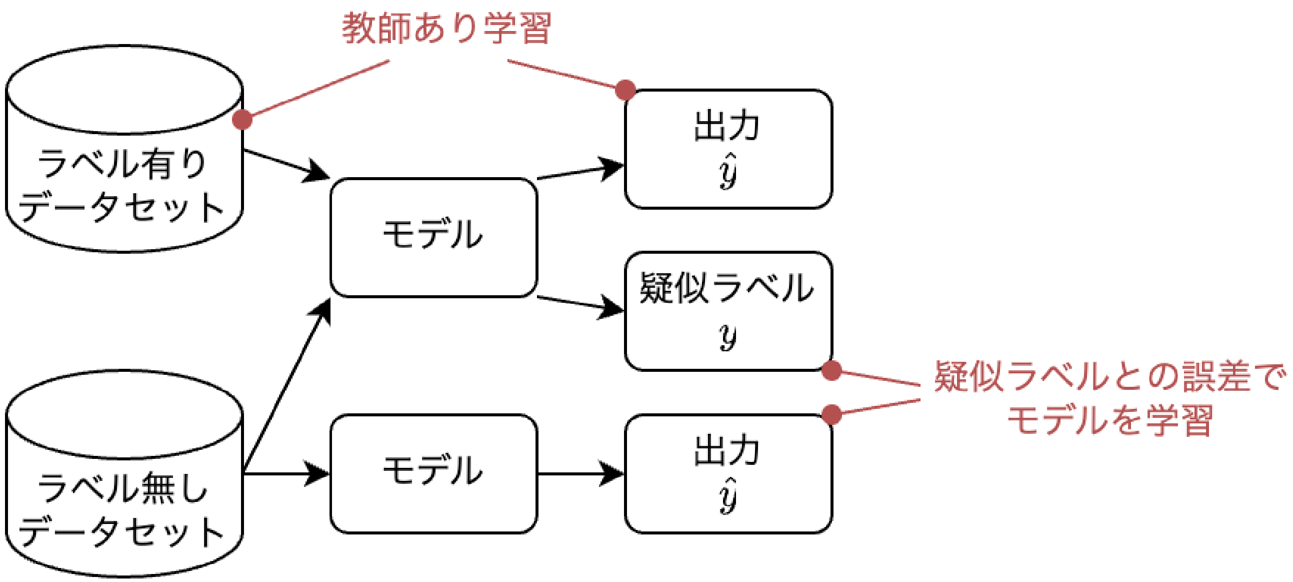
多くの機械学習の成功例は教師ありの設定
←大規模なラベル付きデータセットが必要: $x, y \sim p(x, y)$が利用可能

半教師あり学習

- 目標
  - ラベル無しデータから，データ分布の高次な構造を学習
  - 僅かなラベル付きデータでタスクごとの詳細を学習
    - ラベル無しデータセットの一部にラベル付けすることが多い
- 仮定
  - $x \sim p(x)$ が利用可能と仮定
  - より多くのデータを入手可能
    - 実際，ラベル無しデータは容易に入手可能

自己学習[Scu65; Agr70; McL75] (元論文)

1. ラベル無しデータに対してモデルを使って予測
2. 予測結果をラベルとして扱い，その後の学習を行う
   - このラベルは正しいとは限らない**擬似的な**もの



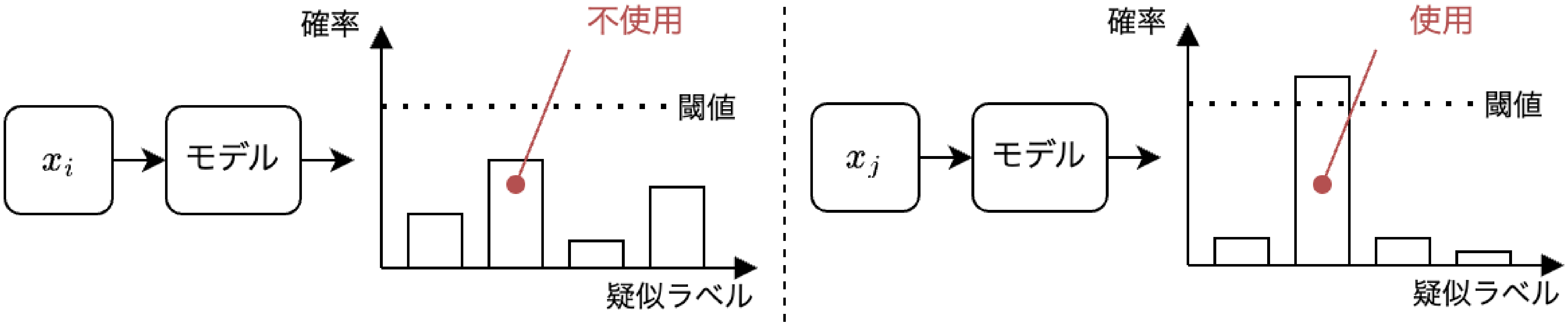
自己学習のイメージ

19.3.1 Self-training and pseudo-labeling

- 2つの手法
  - オフライン
    1. ラベル無しデータセット全体に疑似ラベルを予測
    2. ラベル付きデータと，ラベル無しデータ（疑似ラベルアリ）に対して収束するまで学習
    3. 適切な解が見つかるまで1, 2を反復
  - オンライン
    - ラベル無しデータからランダムに選ばれたものに継続的にラベルを予測
- 比較
  - オンライン: 古いラベルで学習してしまう
  - オンライン: 常に再ラベリングするため計算コスト↑

確証バイアス

- 誤った疑似ラベルに対して学習すると，無効な解を学習
- 対策: 「選択メトリック」のヒューリスティック
  - 正しいラベルのみを保持しようとさせる
  - 例: 多クラス分類において，一定以上の確率を持つ疑似ラベルのみを保持



背景: 自己学習ではモデル出力のエントロピーが低くなる
　→ つまり出力の信頼度が高くなる
ラベル無しデータに対してクロスエントロピーを適用した
オンライン学習で明白

→オンライン自己学習の損失を$p(y = c^* | x) = 1, p(y \neq c^* | x) = 0$と
　置換すると，(19.16)と等価になる

$\mathcal{L} = -\max_c \log p_\theta(y = c | \boldsymbol{x})$ (19.16)
　※オンライン自己学習の損失の言及なし. 尤度最大化のこと?

19.3.2 Entropy minimization

オンライン自己学習におけるhard & soft

- hard: $\mathrm{argmax} p_\theta(y|\boldsymbol{x})$ との間のクロスエントロピーを最小化
- soft: $p_\theta(y|\boldsymbol{x})$との間のクロスエントロピーを最小化

これらのいいとこ取りをする方法: 温度パラメータの導入

- 出力確率を$1/T$乗に上げて再正規化
- $T \to 0$ではhardと等価
- $T = 1$で softと等価
- **ミックスマッチ法**の基礎

hard vs soft 損失関数の比較

上から順に，エントロピー，クロスエントロピー
確率を$1/2$乗して正規化したエントロピー

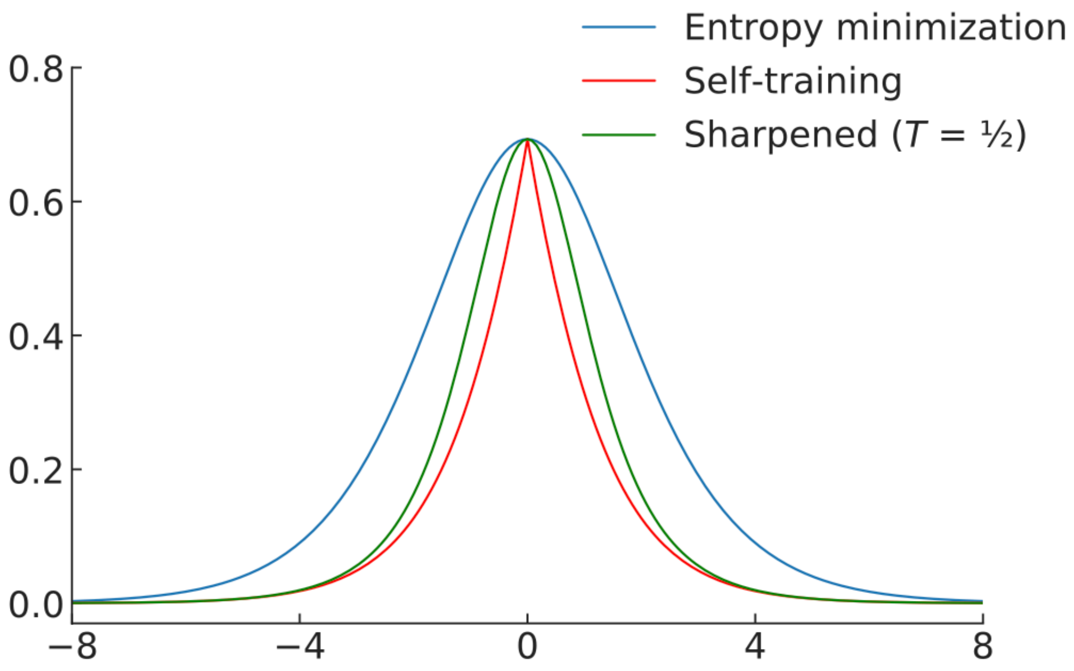
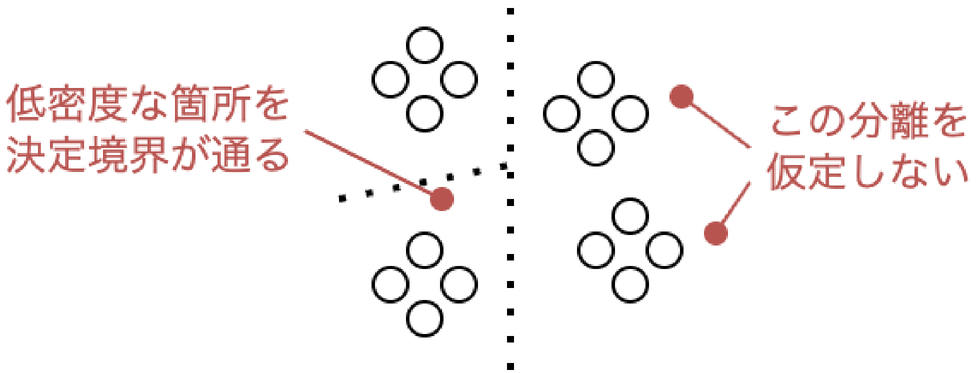


Figure 19.9

19.3.2.1 The cluster assumption

半教師あり学習の仮定:
「クラス間決定境界はデータ多様体の低密度な箇所にあるべき」
→ 異なるクラスのデータを分離する仮定は無い



半教師あり学習における**クラスタ仮定**（エントロピー最小化もこれ）

- ラベルなしデータを使ってデータ多様体の形状を推定
- 決定境界をデータ点から遠ざけると解釈可能

19.3.2.1 The cluster assumption

エントロピー最小化がクラスタ仮定に基づく背景

(a): 決定境界が高密度領域を通過 & 高エントロピー
←単純なモデル or 正則化されたモデル
(b) 低密度領域を通過 & ほとんどのデータで低エントロピー

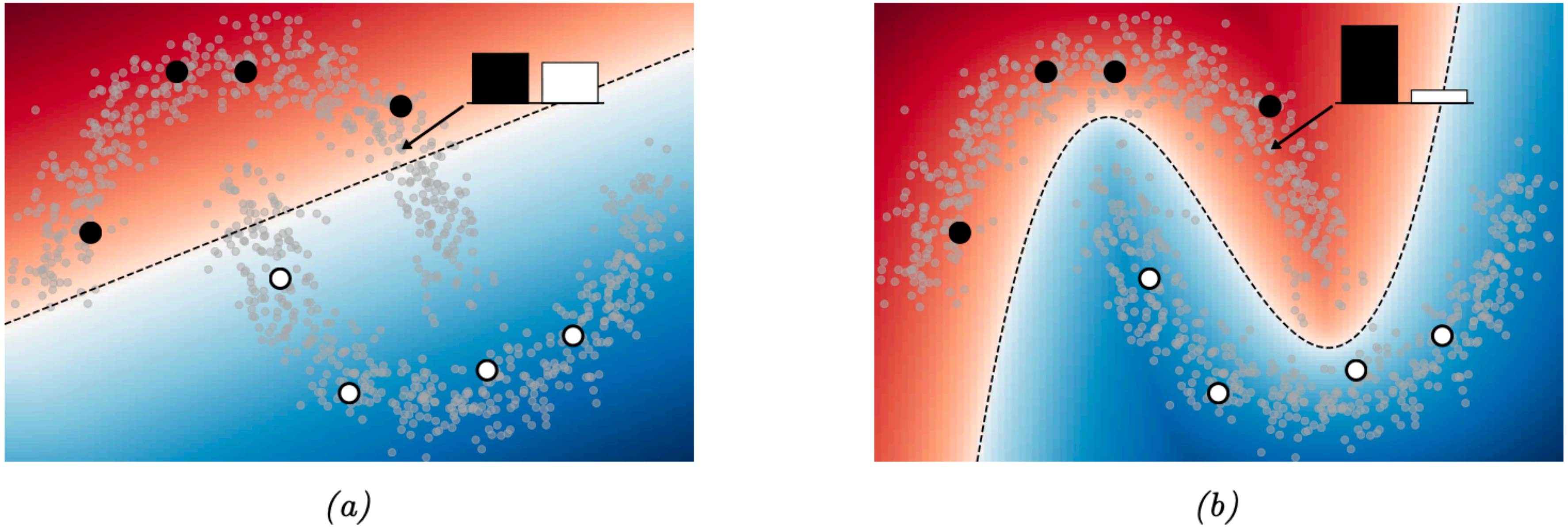


Figure 19.10. 色の濃さが分類確率を示す．グラフは，ある点の分類確率

エントロピー最小化の別の解釈: 入出力間の相互情報量の最大化

相互情報量 $\mathcal{I}(y;\boldsymbol{x}) = \int p(\boldsymbol{x})d\boldsymbol{x} \int p(y|\boldsymbol{x})\log\frac{p(y|\boldsymbol{x})}{\int p(\boldsymbol{x})p(y|\boldsymbol{x})d\boldsymbol{x}}dy$

- $\int p(\boldsymbol{x})d\boldsymbol{x}$: 期待値
- $\int p(y|\boldsymbol{x})\log\frac{p(y|\boldsymbol{x})}{\int p(\boldsymbol{x})p(y|\boldsymbol{x})d\boldsymbol{x}}dy$: すべてのクラスについて合計

$\rightarrow \mathcal{I}(y;\boldsymbol{x}) = \mathbb{E}_{\boldsymbol{x}}[\sum_{i=1}^{L} p(y_i|\boldsymbol{x})\log\frac{p(y_i|\boldsymbol{x})}{\mathbb{E}_{\boldsymbol{x}}[p(y|\boldsymbol{x})]}]$

$$= \mathbb{E}_{\boldsymbol{x}}[\sum_{i=1}^{L} p(y_i|\boldsymbol{x})\log p(y_i|\boldsymbol{x})] - \sum_{i=1}^{L}\mathbb{E}_{\boldsymbol{x}}[p(y_i|\boldsymbol{x})\log\mathbb{E}_{\boldsymbol{x}}[p(y_i|\boldsymbol{x})]]$$

目的関数へ

情報量の最大化 = 負の情報量の最小化

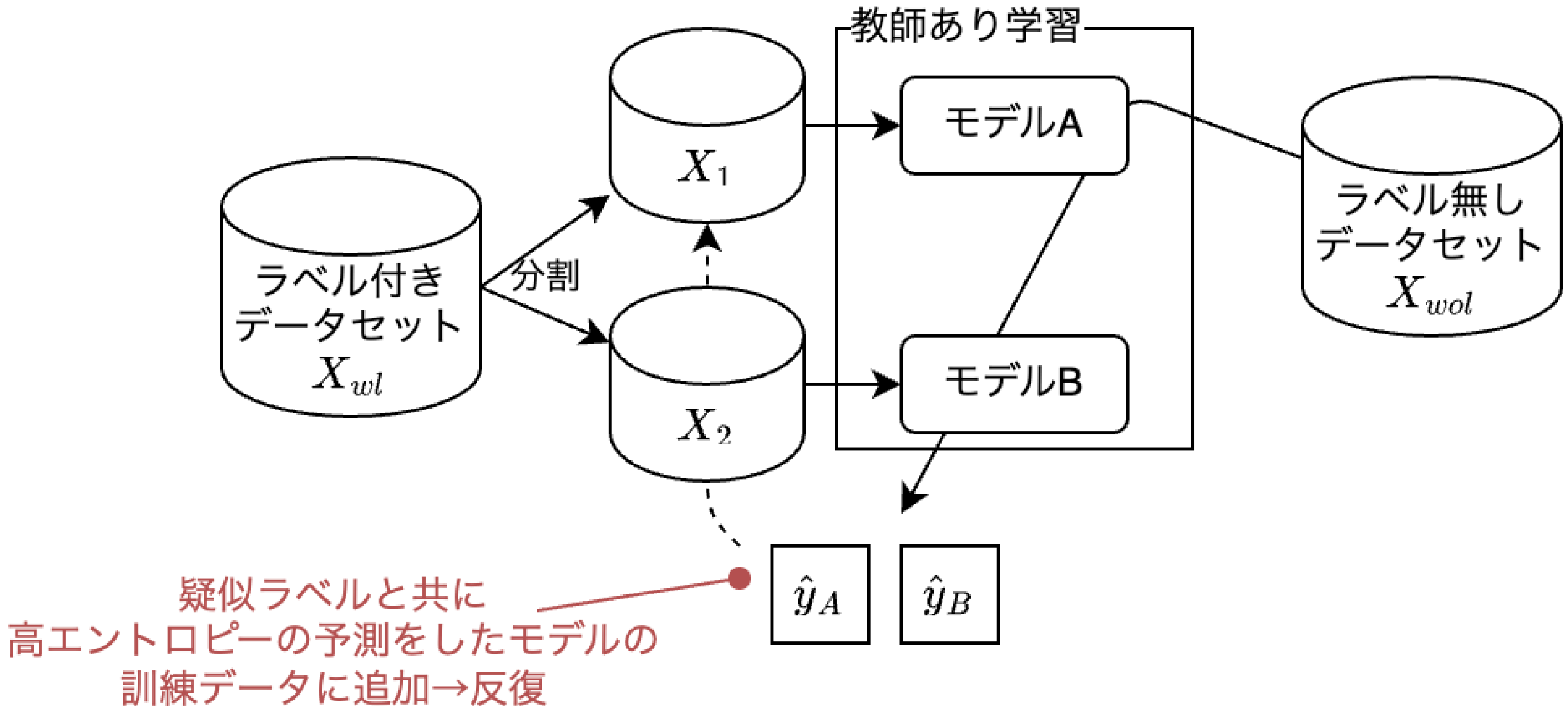
$$-\mathcal{I}(y;\boldsymbol{x})$$

$$= -\mathbb{E}_{\boldsymbol{x}}[\sum_{i=1}^{L} p(y_i|\boldsymbol{x})\log p(y_i|\boldsymbol{x})] + \sum_{i=1}^{L} \mathbb{E}_{\boldsymbol{x}}[p(y_i|\boldsymbol{x})\log \mathbb{E}_{\boldsymbol{x}}[p(y_i|\boldsymbol{x})]]$$

- 第一項: 期待値におけるエントロピー最小化
- 第二項: 予測されたクラスにおけるエントロピー最大化
  - モデルがクラスを当確率で予測するように促す ← 使い所に注意

Co-training （共訓練）

少量のラベル付きデータセットと大量のラベルなしデータセットを使い
2つのモデルを同時に共同で訓練



Co-trainingの問題

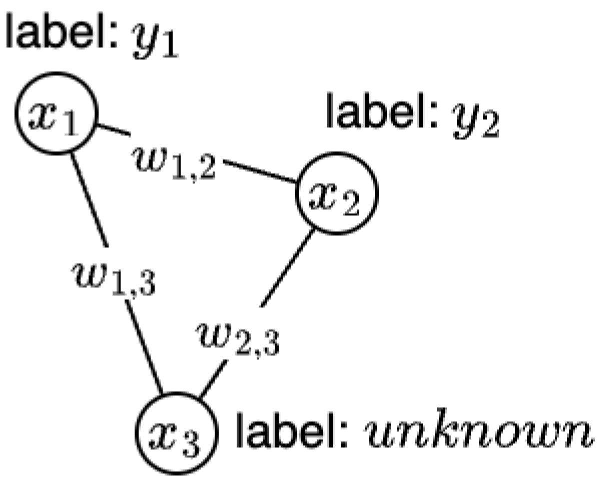
多くの問題で正しくない可能性がある仮定
「データに2つの情報があるが独立した分割がある」に基づく

回避策: **Tri-Training アルゴリズム**

- 分割数とモデル数を3つに増やす
- 異なるモデル3つを最初に訓練
- 2つのモデルが同じ疑似ラベルを推定した場合に，他のモデルの訓練データに追加
- 以下，通常のCo-trainingと同様に繰り返し

Label propagation （ラベル伝搬）

- ラベル割り当てのための半教師あり学習手法
- 2つのデータが類似した時, 同じラベルを持つと仮定（**多様体仮定**）
- ノードがデータとラベル，エッジがノード間類似度のグラフを利用
  - ノード間類似度 $w_{i,j} > 0$，ラベルは既知と未知両方含む



19.3.4 Label propagation on graphs

1. グラフを構築（M個のラベル付きデータとN個のラベルなしデータ）
2. wをもとに遷移行列$\mathbf{T}$を構築（$(M+N)\times(M+N)$）
   - $\mathbf{T}_{i,j}$: ノードiのラベルがノードjに伝播する確率
3. クラス数Cに対して行列$\mathbf{Y}$を作成（$(M+N)\times C$）
   - i行目が，そのデータのラベルの確率
4. 以下を$\mathbf{Y}$の更新が収束するまで反復
   1. $\mathbf{Y}\leftarrow\mathbf{TY}$ に更新
   2. $\mathbf{Y}_{i,c}\leftarrow\mathbf{Y}_{i,c}/\sum_k\mathbf{Y}_{i,k}$ で正規化
   3. ラベル付きデータに対する$\mathbf{Y}$を$[0,1]$に置換

特徴

- **transductive learning**の一種
  - 汎化モデルの学習ではあく，ラベル無しのデータセットへのラベル付け
- 単純な距離尺度に基づくラベリングの問題を克服
  - 単純な例: データ間の距離にユークリッド距離を使用
  - 高次のデータでは，距離がデータ間の関連を反映しない可能性アリ
  - 類似度の重みは問題ごとの固有の特性に従って任意に設定可能[Zhu05]
  - 深層学習への応用事例アリ [BRR18; Isc+19]

19.3.5 Consistency regularization

- データまたはモデルに摂動を加えても出力の変化は僅か: 「一貫性」
- モデル出力の疑似ラベルを利用 → ラベル無しデータに適用可能
- 半教師あり学習の損失関数設計に利用
- CV分野での例
  - 入力画像を回転させる，ノイズを加えるなど
  - ネットワークにドロップアウトを加える，重みにノイズを加えるなど

1. $\boldsymbol{x}' \sim q(\boldsymbol{x}'|\boldsymbol{x})$ をサンプル
   - $q(\boldsymbol{x}'|\boldsymbol{x})$は入力に確率的な変形を与える分布
2. 損失関数の最小化
   - 教師あり学習: $||p_\theta(y|\boldsymbol{x}) - p_\theta(y|\boldsymbol{x}')||^2$
     - $p_\theta(y|\boldsymbol{x})$は固定することが一般的
   - 半教師あり学習（ラベルありデータM個，ラベル無しデータN個）： $-\sum_{i=1}^{M} \log p_\theta(y = y_i|\boldsymbol{x}_i) + \lambda \sum_{j=1}^{N} ||p_\theta(y|\boldsymbol{x}_j) - p_\theta(y|\boldsymbol{x}'_j)||^2$
     - λ: ラベルあり/無しの重要度を調整するハイパラ

前ページの損失関数↓の重要ポイント

$$-\sum_{i=1}^{M} \log p_\theta(y = y_i | \boldsymbol{x}_i) + \lambda \sum_{j=1}^{N} ||p_\theta(y|\boldsymbol{x}_j) - p_\theta(y|\boldsymbol{x}'_j)||^2$$

- λの選択
  - 大きすぎると確証バイアスに似た現象が発生
  - $\lambda = 0$から始め，徐々に大きくすることが一般的
- $q(\boldsymbol{x}\prime|\boldsymbol{x})$の選択
  - $\boldsymbol{x}$のラベルを変えない分布であるべき
  - 「入力を大きく破壊するがラベルが不変の変形」が効果的 [Xie+19; Ber+19a; Soh+20]

19.3.5 Consistency regularization

「入力を大きく破壊するがラベルが不変の変形」 をざっくり紹介

- AutoAugment (10/25 19.1.1にて)
  - 探索モデルによって最適な変形のパラメータを探索
- Cutout
  - 画像中にランダムに矩形のマスクを配置
- FixMatch
  - 複数の変換のパラメータと重みを用意
  - 変換によるモデルの予測ラベルの変化を計算
  - それに応じて重みを更新

などなど…

virtual adversarial training

- data augmentationには，その手法が適切か判断する専門知識が必要
- → 解析的に変換を発見し，モデル出力を変化させる接道を発見

1. 摂動 δを多変量正規分布からサンプルした$\boldsymbol{d}$で初期化
2. $\boldsymbol{\delta} \leftarrow \nabla_{\boldsymbol{\delta}} D_{\mathrm{KL}}(p_\theta(y|\boldsymbol{x})||p_\theta(y|\boldsymbol{x}+\boldsymbol{\delta}))|_{\boldsymbol{\delta}=\xi\boldsymbol{d}}$
   - ξは $10^{-6}程度の小さな定数
   - $\boldsymbol{\delta} = \mathrm{argmax}_{\boldsymbol{\delta}} D_{\mathrm{KL}}(p_\theta(y|\boldsymbol{x})||p_\theta(y|\boldsymbol{x}+\boldsymbol{\delta}))$ を目指す

- 摂動の強度を表すハイパラ ϵを使って $\boldsymbol{x}' = \boldsymbol{x} + \epsilon\frac{\delta}{||\delta||_2}$ で変換→正則化

19.3.5 Consistency regularization

一貫性正則化の注意点(1/2)

目的関数の幾何学的な特性・SGDの軌跡に影響

- 異なるepochでのパラメータ間のL2距離＞＞目的関数となる
- **stochastic weight averaging** [Izm+18] の導入
  - 影響の回避&半教師あり学習でSoTA達成
  - 学習中のパラメータを一定期間過去のものまで平均 → 損失関数が滑らかに

一貫性正則化の注意点(2/2)

摂動の有無によるモデル出力の差の指標

- L2距離の2乗
  - モデル出力にsoftmax関数を施す時，摂動の有無による乖離が大きくなると損失の勾配が0に近づく
  - 予測値が非常に不安定なときにモデルが更新されないという利点
- KLD
  - スケールがラベル付きデータに使われるクロスエントロピー損失と同じ
  - 直感的にハイパラλのチューニング可能

L2距離（青）の2乗とKLD（橙）の比較

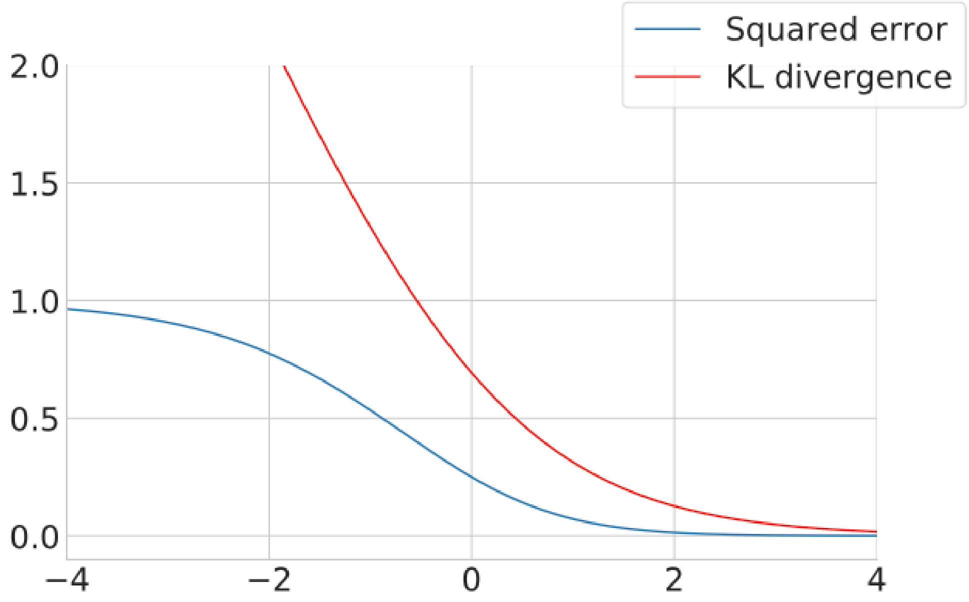


Figure 19.11

- L2は両端で傾きが0に近づく → 大きな誤りでモデル更新が起きない

19.3.7 Combining self-supervised and semi-supervised learning

自己教師あり学習と半教師あり学習の組み合わせの事例[Che+20c]

- SimCLR (19.2.4.4) を利用
- ラベル無しデータに自己教師ありで表現学習(T)
- 少量のラベル付きデータを使って転移学習によるfine-tuning
- 元のもとのラベル無しデータで生徒モデル(S)に知識蒸留
    - softmaxの出力について温度パラメータ $\tau > 0$を導入 (**ラベル平滑化**)

$$\mathcal{L}(T) = -sum_{\mathbf{X}_i \in \mathcal{D}} [\sum_y p^T(y|\boldsymbol{x}_i; \tau \log p^S(y|\boldsymbol{x}_i; \tau)]$$

19.3.7 Combining self-supervised and semi-supervised learning

- 通常はSはTより小規模なモデルを瑠葉
  - 複雑なモデルTの表現能力を，軽量なSに引き継ぎたい
- SとTが同じ構造の場合 → **自己学習** (19.3.1)

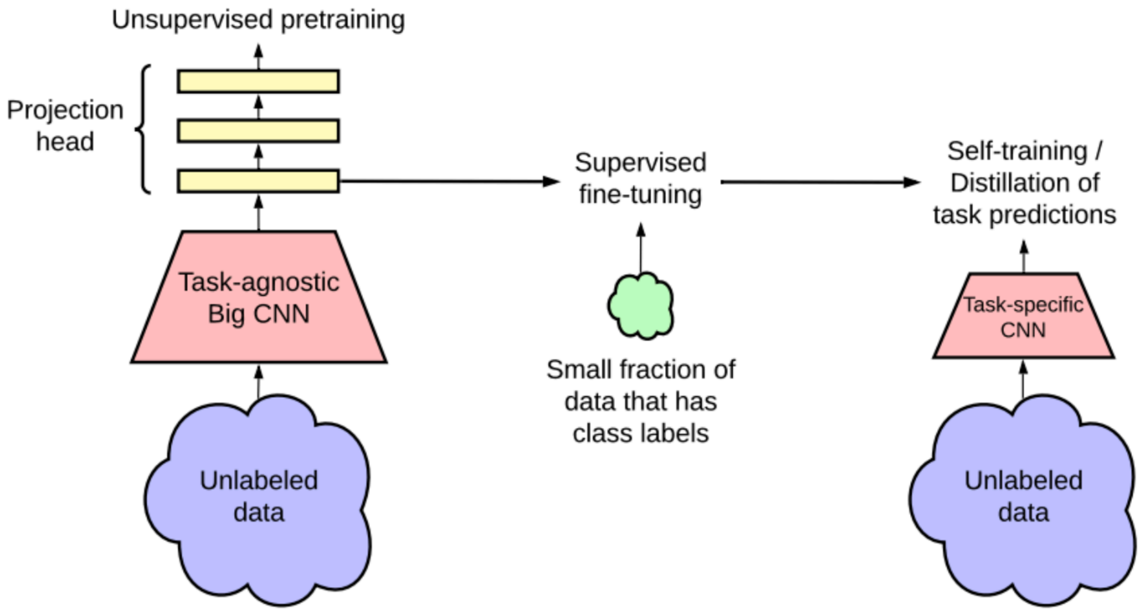


Figure 19.13