Exploit Duality

Exploit Duality

What is Duality?

Duality란 무엇일까요? 우리가 보통 기계학습을 통해 학습하는 것은 어떤 도메인의 데이터 X를 받아서, 다른 도메인의 데이터 Y로 맵핑(mapping)해주는 함수를 근사(approximation)하는 것이라 할 수 있습니다. 따라서 대부분의 기계학습에 사용되는 데이터셋은 두 도메인 사이의 데이터로 구성되어있기 마련입니다.

Task($D_1 \rightarrow D_2$)	Domain 1	Domain 2	Task($D_1 \leftarrow D_2$)
기계번역	source 언어 문장	target 언어 문장	기계번역
음성인식	음성 신호	텍스트(transcript)	음성합성
이미지 분류	이미지	class	이미지 합성
요약	본문(content) 텍스트	제목(title) 텍스트	본문 생성

위와 같이 두 도메인 사이의 데이터의 관계를 배우는 방향에 따라서 음성인식이 되기도 하고, 음성합성이 되기도 합니다. 이러한 두 도메인 사이의 관계를 duality라고 우리는 정의 합니다. 대부분의 기계학습 문제들은 이와 같이 duality를 가지고 있는데, 특히 기계번역은 각 도메인의 데이터 간에 정보량의 차이가 거의 없는 것이 가장 큰 특징이자 장점 입니다. 따라서 duality를 가장 적극적으로 활용할 수 있습니다.

CycleGAN

먼저 좀 더 이해하기 쉬운 duality의 활용 예로, 컴퓨터 비전(Computer Vision)쪽 논문[Zhu at el.2017]을 설명 해 볼까 합니다. Cycle GAN은 아래와 같이 unparalleled image set이 여러개 있을 때, $Set\ X$의 이미지를 $Set\ Y$의 이미지로 합성/변환 시켜주는 방법 입니다. 사진을 전체 구조는 유지하되 모네의 그림풍으로 바꾸어 주기도 하고, 말과 얼룩말을 서로 바꾸어 주기도 합니다. 겨울 풍경을 여름 풍경으로 바꾸어주기도 합니다.

아래에 이 방법을 도식화 하여 나타냈습니다. $Set\ X$와 $Set\ Y$ 모두 각각 Generator(G, F)와 Discriminator(D_X, D_Y)를 가지고 있어서, min/max 게임을

Figure 1: Dr. Rico Sennrich

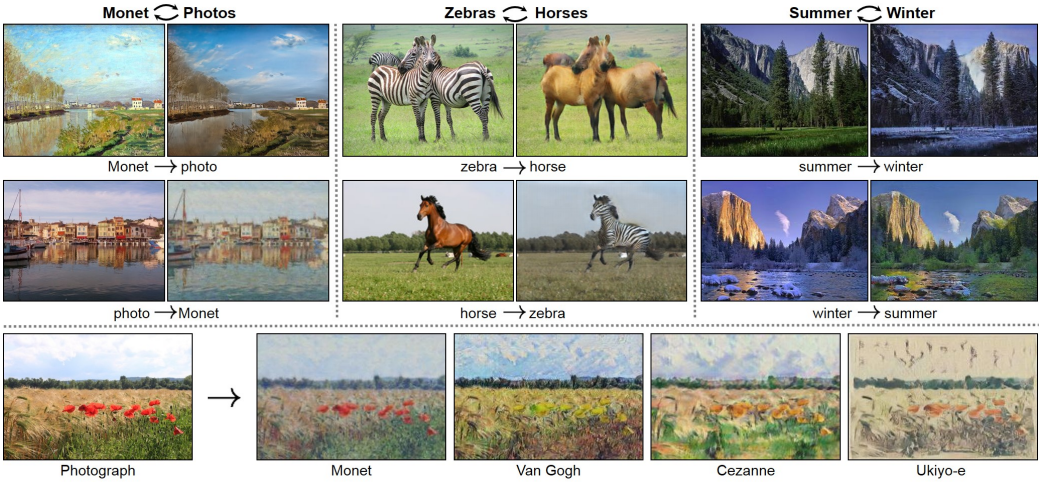


Figure 2: Cycle GAN – image from web

수행합니다.

G는 x를 입력으로 받아 $\hat{y}$으로 변환 해 냅니다. 그리고 D_Y는 $\hat{y}$ 또는 y를 입력으로 받아 합성 유무($Real/Fake$)를 판단 합니다. 마찬가지로 F는 y를 입력으로 받아 $\hat{x}$으로 변환 합니다. 이후에 D_X는 $\hat{x}$ 또는 x를 입력으로 받아 합성 유부를 판단 합니다.

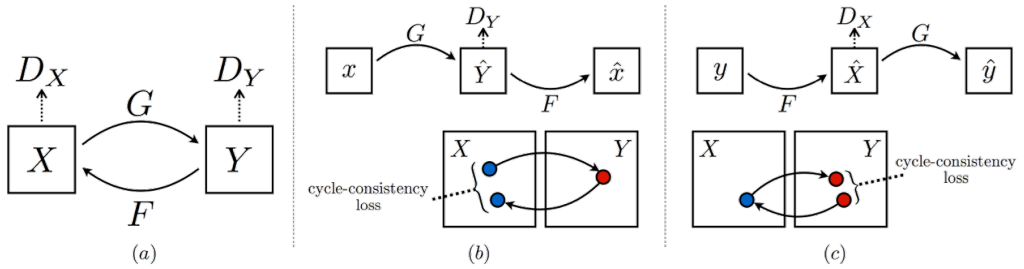


Figure 3: (a) Our model contains two mapping functions $G : X \rightarrow Y$ and $F : Y \rightarrow X$, and associated adversarial discriminators D_Y and D_X. D_Y encourages G to translate X into outputs indistinguishable from domain Y, and vice versa for D_X and F. To further regularize the mappings, we introduce two *cycle consistency losses* that capture the intuition that if we translate from one domain to the other and back again we should arrive at where we started: (b) forward cycle-consistency loss: $x \rightarrow G(x) \rightarrow F(G(x)) \approx x$, and (c) backward cycle-consistency loss: $y \rightarrow F(y) \rightarrow G(F(y)) \approx y$

Figure 3:

이 방식의 핵심은 $\hat{x}$나 $\hat{y}$를 합성 할 때에 기존의 Set X, Y에 속하는 것 처럼 만들어내야 한다는 것 입니다. 이것을 기계번역에 적용 시켜 보면 어떻게 될까요?

Dual Supervised Learning

이번에 소개할 방법은 Dual Supervised Learning (DSL) [Xia et al.2017] 입니다. 이 방법은 기존의 Teacher Forcing의 문제로 생기는 어려움을 강화학습을 사용하지 않고, Daulity로부터 regularization term을 이끌어내어 해결하였습니다.

베이즈 정리(Bayes Theorem)에 따라서 우리는 아래의 수식이 언제나 성립함을 알고 있습니다.

$$P(Y|X) = \frac{P(X|Y)P(Y)}{P(X)}$$
$$P(Y|X)P(X) = P(X|Y)P(Y)$$

따라서 위의 수식을 따라서, 우리의 데이터셋을 통해 훈련한 모델들은 아래와 같은 수식을 만족해야 합니다.

$$P(x)P(y|x;\theta_{x\to y}) = P(y)P(x|y;\theta_{y\to x})$$

이 전제를 우리의 번역 훈련을 위한 목표에 적용하면 다음과 같습니다.

$$objective1 : \min_{\theta_{x\to y}} \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} \ell_1(f(x_i;\theta_{x\to y}), y_i),$$
$$objective2 : \min_{\theta_{y\to x}} \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} \ell_1(g(y_i;\theta_{y\to x}), x_i),$$
$$s.t.\ P(x)P(y|x;\theta_{x\to y}) = P(y)P(x|y;\theta_{y\to x}), \forall x, y.$$

위의 수식을 해석하면, 목표(objective1)은 베이즈 정리에 따른 제약조건을 만족함과 동시에, ℓ_1을 최소화(minimize) 하도록 해야 합니다. ℓ_1은 번역함수 f에 입력 x_i를 넣어 나온 반환값과 y_i 사이의 손실(loss)를 의미 합니다. 마찬가지로, ℓ_2도 번역함수 g에 대해 같은 작업을 수행하고 최소화하여 목표(objective2)를 만족해야 합니다.

$$\mathcal{L}_{duality} = ((\log \hat{P}(x) + \log P(y|x;\theta_{x\to y})) - (\log \hat{P}(y) + \log P(x|y;\theta_{y\to x}))^2$$

그러므로 우리는 $\mathcal{L}_{duality}$와 같이 베이즈 정리에 따른 제약조건의 양 변의 값의 차이를 최소화(minimize)하도록 하는 MSE 손실함수(loss function)을 만들 수

있습니다. 위의 수식에서 우리가 동시에 훈련시키는 신경망 네트워크 파라미터를 통해 $\log P(y|x;\theta_{x\to y})$와 $\log P(x|y;\theta_{y\to x})$를 구하고, 단방향(monolingual) corpus를 통해 별도로 이미 훈련시켜 놓은 언어모델을 통해 $\log \hat{P}(x)$와 $\log \hat{P}(y)$를 근사(approximation)할 수 있습니다.

이 부가적인 제약조건의 손실함수를 기존의 목적함수(objective function)에 추가하여 동시에 minimize 하도록 하면, 아래와 같이 표현 할 수 있습니다.

$$\theta_{x\to y} \leftarrow \theta_{x\to y} - \gamma\nabla_{\theta_{x\to y}}\frac{1}{n}\sum_{j=1}^{m}[\ell_1(f(x_i;\theta_{x\to y}),y_i) + \lambda_{x\to y}\mathcal{L}_{duality}]$$

$$\theta_{y\to x} \leftarrow \theta_{y\to x} - \gamma\nabla_{\theta_{y\to x}}\frac{1}{n}\sum_{j=1}^{m}[\ell_2(g(y_i;\theta_{y\to x}),x_i) + \lambda_{y\to x}\mathcal{L}_{duality}]$$

여기서 λ는 Lagrange multipliers로써, 고정된 값의 hyper-parameter 입니다. 실험 결과 $\lambda = 0.01$ 일 때, 가장 좋은 성능을 나타낼 수 있었습니다.

Table 2. Summary of some existing En→Fr translations

Model	Brief description	BLEU
NMT[1]	*standard NMT*	33.08
MRT[2]	*Direct optimizing BLEU*	34.23
DSL	*Refer to Algorithm 1*	**34.84**

[1] (Jean et al., 2015); [2] (Shen et al., 2016)

Figure 4:

위의 테이블과 같이 기존의 Teacher Forcing 아래의 cross entropy 방식([1]번)과 Minimum Risk Training(MRT) 방식([2]번) 보다 더 높은 성능을 보입니다.

이 방법은 강화학습과 같이 비효율적이고 훈련이 까다로운 방식을 벗어나서 regularization term을 추가하여 강화학습을 상회하는 성능을 얻어낸 것이 주목할 점이라고 할 수 있습니다.

Dual Unsupervised Learning

Dual Learning for Machine Translation

공교롭게도 CycleGAN과 비슷한 시기에 나온 논문[Xia at el.2016]이 있습니다. NLP의 특성상 CycleGAN처럼 직접적으로 gradient를 전달해 줄 수는 없었지만 기본적으로는 아주 비슷한 개념입니다. 짝이 없는 단방향(monolingual) corpus를 이용하여 성능을 극대화 하고자 하였습니다.

즉, monolingual sentence(s)에 대해서 번역을 하고 그 문장(s_{mid})을 사용하여 복원을 하였을 때($\hat{s}$) 원래의 처음 문장으로 돌아올 수 있도록(처음 문장과의 차이를 최소화 하도록) 훈련하는 것입니다. 이때, 번역된 문장 s_{mid}는 자연스러운 해당 언어의 문장이 되었는가도 중요한 지표가 됩니다.

위에서 설명한 알고리즘을 따라가 보겠습니다. 이 방법에서는 $Set\ X$, $Set\ Y$ 대신에 $Language\ A$, $Language\ B$로 표기하고 있습니다. $G_{A\to B}$의 파라미터 θ_{AB}와 $F_{B\to A}$의 파라미터 θ_{BA}가 등장합니다. 이 $G_{A\to B}, F_{B\to A}$는 모두 parallel corpus에 의해서 pre-training이 되어 있는 상태 입니다. 즉, 기본적인 저성능의 번역기 수준이라고 가정합니다.

우리는 기존의 policy gradient와 마찬가지로 아래와 같은 파라미터 업데이트를 수행해야 합니다.

$$\theta_{AB} \leftarrow \theta_{AB} + \gamma \nabla_{\theta_{AB}} \hat{\mathbb{E}}[r]$$
$$\theta_{BA} \leftarrow \theta_{BA} + \gamma \nabla_{\theta_{BA}} \hat{\mathbb{E}}[r]$$

$\hat{\mathbb{E}}[r]$을 각각의 파라미터에 대해서 미분 해 준 값을 더해주는 것을 볼 수 있습니다. 이 reward의 기대값은 아래와 같이 구할 수 있습니다.

$$r = \alpha r_{AB} + (1-\alpha) r_{BA}$$
$$r_{AB} = LM_B(s_{mid})$$
$$r_{BA} = \log P(s|s_{mid};\theta_{BA})$$

위와 같이 k개의 sampling한 문장에 대해서 각기 방향에 대한 reward를 각각 구한 후, 이를 선형 결합(linear combination)을 취해줍니다. 이때, s_{mid}는 sampling한 문장을 의미하고, LM_B를 사용하여 해당 문장이 $languageB$의 집합에 잘 어울리는지를 따져 reward로 리턴합니다. 여기서 기존의 cross entropy를 사용할 수 없는 이유는

Algorithm 1 The dual-learning algorithm

1: **Input**: Monolingual corpora D_A and D_B, initial translation models Θ_{AB} and Θ_{BA}, language models LM_A and LM_B, hyper-parameter α, beam search size K, learning rates $\gamma_{1,t}, \gamma_{2,t}$.
2: **repeat**
3: $t = t + 1$.
4: Sample sentence s_A and s_B from D_A and D_B respectively.
5: Set $s = s_A$. ▷ *Model update for the game beginning from A.*
6: Generate K sentences $s_{mid,1}, \ldots, s_{mid,K}$ using beam search according to translation model $P(.|s; \Theta_{AB})$.
7: **for** $k = 1, \ldots, K$ **do**
8: Set the language-model reward for the kth sampled sentence as $r_{1,k} = LM_B(s_{mid,k})$.
9: Set the communication reward for the kth sampled sentence as $r_{2,k} = \log P(s|s_{mid,k}; \Theta_{BA})$.
10: Set the total reward of the kth sample as $r_k = \alpha r_{1,k} + (1 - \alpha) r_{2,k}$.
11: **end for**
12: Compute the stochastic gradient of Θ_{AB}:

$$\nabla_{\Theta_{AB}} \hat{E}[r] = \frac{1}{K} \sum_{k=1}^{K} [r_k \nabla_{\Theta_{AB}} \log P(s_{mid,k}|s; \Theta_{AB})].$$

13: Compute the stochastic gradient of Θ_{BA}:

$$\nabla_{\Theta_{BA}} \hat{E}[r] = \frac{1}{K} \sum_{k=1}^{K} [(1 - \alpha) \nabla_{\Theta_{BA}} \log P(s|s_{mid,k}; \Theta_{BA})].$$

14: Model updates:

$$\Theta_{AB} \leftarrow \Theta_{AB} + \gamma_{1,t} \nabla_{\Theta_{AB}} \hat{E}[r], \Theta_{BA} \leftarrow \Theta_{BA} + \gamma_{2,t} \nabla_{\Theta_{BA}} \hat{E}[r].$$

15: Set $s = s_B$. ▷ *Model update for the game beginning from B.*
16: Go through line 6 to line 14 symmetrically.
17: **until** convergence

Figure 5:

monlingual sentence이기 때문에 번역을 하더라도 정답을 알 수 없기 때문입니다. 또한 우리는 다수의 단방향(monolingual) corpus를 갖고 있기 때문에, LM은 쉽게 만들어낼 수 있습니다.

$$\nabla_{\theta_{AB}} \hat{\mathbb{E}}[r] = \frac{1}{K} \sum_{k=1}^{K} [r_k \nabla_{\theta_{AB}} \log P(s_{mid,k}|s;\theta_{AB})]$$
$$\nabla_{\theta_{BA}} \hat{\mathbb{E}}[r] = \frac{1}{K} \sum_{k=1}^{K} [(1-\alpha) \nabla_{\theta_{BA}} \log P(s|s_{mid,k};\theta_{BA})]$$

이렇게 얻어진 $\mathbb{E}[r]$를 각 파라미터에 대해서 미분하게 되면 위와 같은 수식을 얻을 수 있고, 상기 서술한 파라미터 업데이트 수식에 대입하면 됩니다. 비슷한 방식으로 $B \rightarrow A$를 구할 수 있습니다.

Table 1: Translation results of En↔Fr task. The results of the experiments using all the parallel data for training are provided in the first two columns (marked by "Large"), and the results using 10% parallel data for training are in the last two columns (marked by "Small").

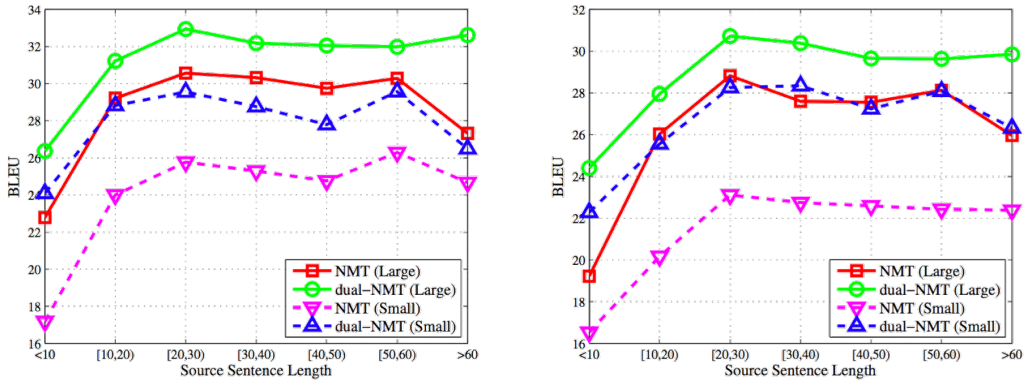
	En→Fr (Large)	Fr→En (Large)	En→Fr (Small)	Fr→En (Small)
NMT	29.92	27.49	25.32	22.27
pseudo-NMT	30.40	27.66	25.63	23.24
dual-NMT	**32.06**	**29.78**	**28.73**	**27.50**

Figure 6:

위의 테이블은 이 방법의 성능을 비교한 결과 입니다. Pseudo-NMT는 이전 챕터에서 설명하였던 back-translation을 의미합니다. 그리고 그 방식보다 더 좋은 성능을 기록한 것을 볼 수 있습니다.

또한, 위 그래프에서 문장의 길이와 상관 없이 모든 구간에서 baseline NMT를 성능으로 압도하고 있는 것을 알 수 있습니다. 다만, 병렬(parallel) corpus의 양이 커질수록 단방향(monolingual) corpus에 의한 성능 향상의 폭이 줄어드는 것을 확인할 수 있습니다.

이 방법은 강화학습과 Duality를 접목하여 적은 양의 병렬(parallel) corpus와 다수의 단방향(monolingual) corpus를 활용하여 번역기의 성능을 효과적으로 끌어올리는 방법을 제시하였다는 점에서 주목할 만 합니다.



(a) En→Fr (b) Fr→En

Figure 1: BLEU scores w.r.t lengths of source sentences

Figure 7:

Dual Transfer Learning for NMT with Marginal Distribution Regularization

Dual Supervised Learning (DSL)은 베이즈 정리에 따른 수식을 제약조건으로 사용하였다면, 이 방법[Wang et al.2017]은 Marginal 분포(distribution)의 성질을 이용하여 제약조건을 만듭니다.

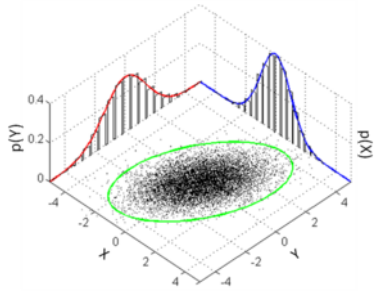


Figure 8: Marginal Distribution from Wikipedia

$$P(y) = \sum_{x \in \mathcal{X}} P(x, y) = \sum_{x \in \mathcal{X}} P(y|x)P(x)$$

Marginal 분포는 결합확률분포(joint distribution)를 어떤 한 variable에 대해서 합

또는 적분 한 것을 이릅니다. 이것을 조건부확률로 나타낼 수 있고, 여기서 한발 더 나아가 기대값 표현으로 바꿀 수 있습니다. 그리고 이를 K번 샘플링 하도록 하여 Monte Carlo로 근사 표현 할 수 있습니다.

$$P(y) = \sum_{x \in \mathcal{X}} P(y|x;\theta)P(x) = \mathbb{E}_{x \sim P(x)} P(y|x;\theta)$$
$$\approx \frac{1}{K} \sum_{i=1}^{K} P(y|x^i;\theta),\ x^i \sim P(x)$$

이제 위의 수식을 기계번역에 적용해 보도록 하겠습니다. 우리에게 아래와 같이 N개의 source 문장 x, target 문장 y으로 이루어진 양방향 corpus $\mathcal{B}$, S개의 target 문장 y로만 이루어진 단방향 corpus $\mathcal{M}$이 있다고 가정 해 보겠습니다.

$$\mathcal{B} = \{(x^n, y^n)\}_{n=1}^{N}$$
$$\mathcal{M} = \{y^s\}_{s=1}^{S}$$

그럼 우리는 아래의 목적함수(objective function)을 최대화(maximize)하는 동시에 marginal 분포에 따른 제약조건 또한 만족시켜야 합니다.

$$Objective : \sum_{n=1}^{N} \log P(y^n|x^n;\theta),$$
$$s.t.\ P(y) = \mathbb{E}_{x \sim P(x)} P(y|x;\theta), \forall y \in \mathcal{M}.$$

위의 수식을 DSL과 마찬가지로 Lagrange multipliers와 함께 기존의 손실함수(loss function)에 추가하여 주기 위하여 $S(\theta)$와 같이 표현합니다.

$$\mathcal{S}(\theta) = [\log \hat{P}(y) - \log \mathbb{E}_{x \sim \hat{P}(x)} P(y|x;\theta)]^2$$

$$\mathcal{L}(\theta) = -\sum_{n=1}^{N} \log P(y^n|x^n;\theta) + \lambda \sum_{s=1}^{S} [\log \hat{P}(y) - \log \mathbb{E}_{x \sim \hat{P}(x)} P(y|x;\theta)]^2$$

이때, DSL과 유사하게 $\hat{P}(x)$와 $\hat{P}(y)$가 등장합니다. $\hat{P}(y)$는 단방향(monolingual) corpus로 만든 언어모델(language model)을 통해 확률값을 구합니다. 위의 수식에

따르면 $\hat{P}(x)$를 통해 source 문장 x를 샘플링(sampling)하여 네트워크 θ를 통과시켜 $P(y|x;\theta)$를 구해야겠지만, 아래와 같이 좀 더 다른 방법으로 접근합니다.

$$
\begin{aligned}
P(y) = \mathbb{E}_{x\sim\hat{P}(x)} P(y|x;\theta) &= \sum_{x\in\mathcal{X}} P(y|x;\theta)\hat{P}(x) \\
&= \sum_{x\in\mathcal{X}} \frac{P(y|x;\theta)\hat{P}(x)}{P(x|y)} P(x|y) \\
&= \mathbb{E}_{x\sim P(x|y)} \frac{P(y|x;\theta)\hat{P}(x)}{P(x|y)} \\
&= \frac{1}{K}\sum_{i=1}^{K} \frac{P(y|x_i;\theta)\hat{P}(x_i)}{P(x_i|y)}, x_i \sim P(x|y)
\end{aligned}
$$

위와 같이 target 문장 y를 반대 방향 번역기($y \rightarrow x$)에 넣어 K개의 source 문장 x를 샘플링(sampling)하여 $P(y)$를 구합니다. 이 과정을 다시 하나의 손실함수(loss function)으로 표현하면 아래와 같습니다.

$$
\mathcal{L}(\theta) \approx -\sum_{n=1}^{N} \log P(y^n|x^n;\theta) + \lambda \sum_{s=1}^{S} [\log \hat{P}(y^s) - \log \frac{1}{K}\sum_{i=1}^{K} \frac{\hat{P}(x_i^s)P(y^s|x_i^s\theta)}{P(x_i^s|y^s)}]^2
$$

Table 1: BLEU scores on En→Fr and De→En translation tasks. Δ means the improvement over the basic NMT model, which only used bilingual data for training. The basic model for En→Fr is the RNNSearch model (Bahdanau, Cho, and Bengio 2015), and for De→En is a two-layer LSTM model. Note that all the methods for the same task share the same model structure.

System	En→Fr	Δ	De→En	Δ
Basic model	29.92		30.99	
Representative semi-supervised NMT systems				
Shallow fusion-NMT (Gulcehre et al. 2015)	30.03	+0.11	31.08	+0.09
Pseudo-NMT (Sennrich, Haddow, and Birch 2016)	30.40	+0.48	31.76	+0.77
Dual-NMT (He et al. 2016a)	32.06	+2.14	32.05	+1.06
Our dual transfer learning system				
This work	**32.85**	**+2.93**	**32.35**	**+1.36**

Figure 9:

위의 테이블과 같이, 이 방법은 앞 챕터에서 소개한 기존의 단방향 corpus[Gulcehre et al.2015][Sennrich et al.2016]를 활용한 방식들과 비교하여 훨씬 더 나은 성능의 개선을 보여주었으며, 바로 앞서 소개한 Dual Learning[He et al.2016a]보다도 더 나은 성능을 보여줍니다. 마찬가지로, 불안정하고 비효율적인 강화학습을 사용하지 않고도 더 나은 성능을 보여준 것은 주목할 만한 성과라고 할 수 있습니다.

Appendix: Importance Sampling

$$\begin{aligned}\mathbb{E}_{X\sim p}[f(x)] &= \int_x f(x)p(x)dx \\ &= \int_x \Big(f(x)\frac{p(x)}{q(x)}\Big)q(x)dx \\ &= \mathbb{E}_{X\sim q}[f(x)\frac{p(x)}{q(x)}],\end{aligned}$$

$$\forall q \text{ (pdf) s.t.} q(x) = 0 \implies p(x) = 0$$

$$w(x) = \frac{p(x)}{q(x)}$$

$$\begin{aligned}\mathbb{E}_{X\sim q}[f(x)\frac{p(x)}{q(x)}] &\approx \frac{1}{K}\sum_{i=1}^{K} f(x_i)\frac{p(x_i)}{q(x_i)} \\ &= \frac{1}{K}\sum_{i=1}^{K} f(x_i)w(x_i)\end{aligned}$$

$$\text{where } x_i \sim q$$