# Review 17: CoMatch: Semi-supervised Learning with Contrastive Graph Regularization

**Paper: https://arxiv.org/abs/2011.11183v2**

פינת הסוקר:

המלצת קריאה ממייק: מאוד מומלץ.

בהירות כתיבה: בינונית פלוס

רמת היכרות עם כלים מתמטיים וטכניקות של ML/DL הנדרשים להבנת מאמר: הבנת העקרונות של למידה ניגודית (contrastive learning) וידע בסיסי בגרפים

יישומים פרקטיים אפשריים: הפקה של ייצוגים חזקים של דאטה עבור משימות של unsupervised/semisupervised learning

פרטי מאמר:

פורסם בתאריך: 21.03.21, בארקיב.

הוצג בכנס: לא הצלחתי לאתר

תחומי מאמר:

(Semi-Supervised Learning (SmSL

(Self-Supervised Learning (SSL

כלים מתמטיים, מושגים וסימונים:

(Self-Supervised Contrastive Learning (SSCL

SSL/SmSL מבוסס על מינימיזציה של אנטרופיה

SmSL המבוסס על גרף של דמיונות

פסאודו לייבלים (תוצאת הרצת רשת סיווג על דאטה לא מתויג)

יישור התפלגות (distribution alignment) עבור פסאודו לייבלים

תמצית מאמר:

המאמר משלב 4 גישות פופולריות מעולמות של SSL ו- SmSL:

רגולריזציה על בסיס עקביות:

שיטה זו מבוססת על הנחה שההסתברויות של לייבל עבור דוגמא נתונה לפני ואחרי אוגמנטציה, אמורות להיות קרובות. למשל בדומיין של התמונות ההגיון מאחורי גישה זו הינו מאוד פשוט וטבעי: מכיוון שאוגמנטציה איננה משנה את התוכן של תמונה אלא רק את סגנונה, היא לא אמורה להשפיע על התפלגות פלט המסווג. עקרון זה ניתן לתרגם למשל למינימיזציה של קרוס-אנטרופי או מרחק ריבועי בין החיזויים של הדוגמה המקורית לגרסה שלה לאחר אוגמנטציה.

מינימיזציה של אנטרופיה של פלט המסווג:

כאן אנחנו רוצים לבנות מסווג שמוציא "חיזויים בטוחים" לדוגמאות מהדאטהסט כלומר כאלו שלייבל אחד מקבל הסתברות גבוה משמעותית מכל האחרות. זה כמובן שקול למינימיזציה של אנטרופיה של פלט המסווג. ניתן להשיג את זה בין השאר ע"י מינימיזציה של פלט הרשת עבור דוגמאות לא מתויגות (בצורה מפורשת) או ע"י בנייה של פסאודו לייבלים בעלי אנטרופיה נמוכה על דוגמאות לא מתויגות ואימון של המסווג עליהן.

(Self-Supervised Contrastive Learning (SSCL:

הנחת היסוד בגישה זו אומרת שייצוג חזק של דאטה(במרחב במימד נמוך) מסוגל להפריד בין זוגות של הדוגמאות דומות לבין זוגות של דוגמאות רנדומליות. אחת הצורות הפופולריות של פונקצית מטרה במאמרי SSCL נקראת InfoNCE. ניתן להראות כי ככל שלוס InfoNCE קטן יותר, המידע הדדי בין הדוגמא במרחב המקורי לבין ייצוגה במרחב ממימד נמוך עולה. זה כמובן מצביע על אובדן פחות אינפורמציה בין הדאטה המקורי לבין ייצוגה כלומר הייצוג יהיה פחות לוסי ומייצג את הדאטה בצורה מדויקת יותר. חשוב לציין שהאימון מתבצע במרחב הייצוג ולא במרחב המקורי, כלומר הלוס מחושב על ייצוגים במרחב ממימד נמוך. לוס InfoNCE לוקח זוג של דוגמאות קרובות (למשל שתי אוגמנטציות של אותה דוגמא) ומספר דוגמאות רנדומליות ומנסה למקסם את היחס בין אקספוננט של דמיון של הזוג הקרוב לסכום הדמיונות בינו לבין דוגמאות רנדומליות.

SmSL המבוססים על גרף של דמיונות:

כאן בונים גרף של דמיונות של דוגמאות מהדאטהסט כאשר קודקודים של דוגמאות קרובות (תחת איזושהי מטריקה - במרחב המקורי או במרחב של לייבלים) מחוברים עם קשת במשקל גבוה, כאשר הקודקודים של דוגמאות רחוקות מחוברים בקשתות בעלות משקל נמוך או לא מחוברות כלל. לאחר מכן מאמנים ייצוגים של דאטה במרחב מימד נמוך תוך כדי התחשבות ב״טופולוגיה של הגרף״. במילים אחרות דוגמאות קרובות אחת לשנייה (מבחינת הגרף) יאומנו לקבל ייצוגים קרובים.

הסבר של רעיונות בסיסיים:

המאמר מציע שיטה, הנקראת CoMatch, שלמעשה בנויה על שילוב של 4 גישות אלו. CoMatch מנצלת את הייצוג של דוגמאות במרחב לטנטי (מימד נמוך) Z ובמרחב הלייבלים Q ומבצעת אימון בהתבסס על שני גרפים של דמיונות הנבנים בהתבסס על קשרים בין דוגמאות במרחבים אלו. נציין כי Q הינו מרחב הפלטים של רשת הסיווג כלומר הוא מכיל וקטורי הסתברויות של הלייבלים.

אז איך זה בעצם נעשה? קודם כל בואו נבין את המבנה של פונקציה הלוס של CoMatch.

פונקצית לוס:

נתחיל מזה שנזכר CoMatch הינה שיטה של SmSL כלומר יש לנו דאטהסט עם דוגמאות מתויגות הנקרא X, והדאטהסט של דוגמאות לא מתויגות U. נסמן את הגרף שנבנה מעל המרחב הלטנטי Z ב-G\_emb ,והגרף על מרחב לייבלים Q יסומן ב-G\_lab. עכשיו נוכל לעבור לתיאור הרעיונות העיקריים של המאמר:

המאמר מציע לאמן 3 רשתות:

הרשת המקודדת f שבונה ייצוג מקדים של הדאטה, המשמש גם כשלב מקדים לבניית של הייצוג z גם לפעולת סיווג עצמה.

רשת, הבונה ייצוג במרחב הלטנטי Z שמופעלת אחרי f, המסומנת ע" g (פולטת ייצוגים מנורמלים).

רשת סיווג h שמטרתה להוציא וקטור הסתברויות של לייבלים (גם מופעלת אחרי f).

כעת נתאר פונקציית לוס, המוצעת במאמר. היא מורכבת מ-3 חלקים:

L\_x: קרוס-אנטרופי לוס רגיל על דוגמאות מתויגות. כאן הלוס מחושב על דוגמאות מתויגות שעברו אוגמנטציה חלשה. הלוס מחושב בין החיזוי של הדוגמא לאחר אוגמנטציה לבין הלייבל של התמונה המקורית.

L\_ucls: קרוס אנטרופי לוס בין פסאודו לייבלים של דוגמא לא מתויגת לבין החיזוי עבור אותה דוגמא לאחר אוגמנטציה חזקה. נציין כי רק פסאודו לייבלים מעל סף מסוים נלקחים בחשבון בחישוב הלוס במטרה לא לקנוס את המודל על הדוגמאות שלא הצלחנו לבנות להם פסאודו לייבל "אמין", כלומר בעל אנטרופיה נמוכה (FixMatch). על איך בונים את הפסאודו לייבלים האלו נדון בפרק הבא.

L\_uctr: הלוס הקונטרסטי (בסגנון InfoNCE) הבנוי על גרפי הדמיונות על מרחבי Z ו- Q. נסביר את המבנה של לוס זה בהמשך.

כעת בואו נתעמק באיך בונים את הפסאודו לייבלים q\_b הנחוצים לחישוב של L\_ucls.

יצירה של פסאודו לייבליים:

קודם כל עבור דוגמאות מתויגות הפסאודו לייבל מוגדר בתור לייבל האמיתי (ground-truth) שלהן. על כל דוגמא לא מתויגת מפעילים אוגמנטציה חלשה ומחשבים את ההתפלגות החזויה של הלייבלים עבור כל אחת מהדוגמאות. לאחר מכן מבצעים יישור התפלגות (DA) שמיועד למנוע מהתפלגות הלייבלים לקרוס לתת-קבוצה של הלייבלים. בשביל כך מחשבים ממוצע נע p\_av (על פני האיטרציות של אימון) על כל החיזויים של הדוגמאות הלא מתויגות. למעשה p\_av המהווה שערוך של שכיחות הלייבלים בדאטהסט. לאחר מכן מחלקים את וקטור ההסתברויות החזויות p\_w של כל דוגמא ב-p\_av. נציין שלהדביל מ-ReMixMatch, וקטור שכיחויות הלייבלים הנגזר מהדוגמאות המתויגות לא נלקח בחשבון כאן.

כעת מחשבים גם את הייצוגים הלטנטיים z\_w של הדוגמאות ע״י העברתם דרך הרשת המקודדת f ורשת הייצוג g. שומרים z\_w יחד עם וקטורי התפלגות החזויים p\_w במאגר של דוגמאות B. עתה נסביר איך מאמנים רשת סיווג h, המשערכת פסאודו לייבל q\_b (התפלגות מעל מרחב הלייבלים) של דוגמה לא מתויגת. כדי לאמן את h, המאמר מנסח בעיית אופטימיזציה עם פונקצית מטרה המורכבת מסכום קמור (עם מקדמים המסתכמים ל-1) של שני מחוברים. בפועל לכל באטץ' יש לנו סכום קמור של:

סכום הריבועים של המרחקים של פלט הרשת המסווגת h (התפלגות מעל לייבלים) עבור דוגמא u\_w לבין הפלטים עבור כל הדוגמאות u\_wk מ-B, כאשר כל מרחק כזה ממושקל בדמיון המנורמל a\_k בין הייצוג z\_w של u\_w לבין הייצוג הלטנטי של u\_wk. המטרה של איבר זה לקרב את התפלגויות של פסאודו לייבלים עבור דוגמאות קרובות במרחב הייצוג. כאן דמיון בין הייצוגים מוגדר כאקספוננט של המכפלה הפנימית בין הייצוגים (המנורמל בסכום של של כל הדמיוניות עבור הדוגמאות מ B).

מרחק ריבועי בין חיזוי עבור דוגמה p\_w לבין q\_b (כדי לא לשנות את התפלגות פסאודו לייבלים יותר מדי)

לבעיית אופטימיזציה זו יש פתרון מדויק וזה למעשה סכום ממושקל של p\_w ו- p\_wk כאשר המקדם לפני p\_wk הוא הדמיון a\_k.

החלק האחרון בפאזל שטרם התייחסנו אליו הינו הלוס L\_uctr, המבוסס על גרפי דמיון מעל מרחבי ייצוגים Z והלייבלים Q.

מבנה של L\_uctr: לכל באטץ' בונים גרף G\_lab מעל מרחב Q כאשר משקל הקשת בין דוגמאות (קודקודים) מוגדר ע״י הדמיון (מכפלה פנימית) בין הפסאדו לייבלים של הדוגמאות (משקל של קשת עצמית מוגדרת להיות 1). אם ערכו של דמיון הוא קטן מסף מינימלי, הקודקודים של דוגמאות אלו לא מחוברים. לאחר מכן בונים גרף G\_emb מעל מרחב הייצוגים. משקל קשת עצמית של קודקוד המתאים לדוגמא u ב-G\_emb מוגדר כדמיון בין הייצוג של שתי אוגמנטציות חזקות של u (הדמיון הוא המכפלה הפנימית בין הייצוגים). הקשת בין כל זוג אחר של קודקודים מוגדרת כדמיון בין הייצוג של הדוגמא, המתאימה לקודקוד הראשון (לאחר אוגמנטציה חזקה) לבין הייצוג של הדוגמא מהקודקוד השני. לאחר מכן מנרמלים את הקשתות עבור שני הגרפים.

ועכשיו בא הקטע המגניב של המאמר (לפחות בעיניי) וזה בניית הלוס המשלב את שני הגרפים האלו. מאמנים את את ייצוגי הדוגמאות שמהם נבנה גרף G\_emb, כך שהוא (הגרף!!) יהיה כמה שיותר דומה מבחינת משקלי הקשתות ל-G\_lab. לוס זה מורכב משני חלקים:

הלוס ניגודי (contrastive) בין הקשתות העצמיות של G\_lab. בדומה ללוסים ניגודיים דומים הוא דוחף את המודל לתת ייצוגים דומים לאוגמנטציות שונות של אותה דוגמא.

החלק השני של הלוס "דוחף" ייצוגים של לדוגמאות עם פסאודו לייבלים דומים, להיות דומים (!!) (כלומר גורמים לקשת ביניהם ב- G\_lab להיות בעלת משקל גבוה). לדעתי זו אחת הנקודות הכי חשובות במאמר וגם הסיבה העיקרית לכך ש-CoMatch הצליחה להגיע לביצועים טובים.

הישגי מאמר:

המאמר מראה שיפור בביצועים בכמה משימות SmSL קלאסיות מעל שיטות עכשוויות כמו FixMatch ו- MixMatch.

דאטהסטים: CIFAR100, STL10.

נ.ב. המאמר מציע שילוב אלגנטי של 4 שיטות אימון מעולם SmSL. מאוד אהבתי את השילוב של גרפי דמיון מעל מרחבי ייצוג ומרחב הלייבלים בחישוב של הלוס הניגודי. עם זאת המאמר הראה את עליונות של CoMatch רק על שני דאטהסטים יחסית קלים. הייתי רוצה לראות את ביצועיה של גישה זאת לדאטהסטים יותר מורכבים ומקווה שזה יבוא בהמשך.