Анализ смещения распределений в контрастивном обучении

Лидия Троешестова Роман Исаченко

Московский физико-технический институт

3 мая 2023 г.

Цель

Исследовать влияние смещения распределения p_x^+ в задаче построения представлений без учителя.

Проблема

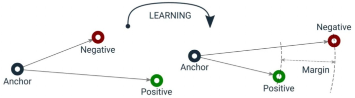
Наличие смещения в распределениях классов приводит к некорректным представлениям объектов.

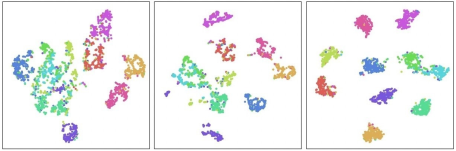
Идея

Учесть смещения распределений классов путем построения несмещенной функции потерь.

$$L^N_{\text{Unbiased}}(f) = \mathbb{E}_{\substack{\mathbf{x}\sim p, \mathbf{x}^+\sim p_x^+, \\ \mathbf{x}^-\sim p_x^-}} \left[-\log \frac{\exp(\text{sim}_f(\mathbf{x}, \mathbf{x}^+))}{\exp(\text{sim}_f(\mathbf{x}, \mathbf{x}^+) + \sum_{i=1}^N \exp(\text{sim}_f(\mathbf{x}, \mathbf{x}^-)} \right]$$

- $p_x^+(\mathbf{x}')$ — вероятность взять $\mathbf{x}'$ как позитивный объект для $\mathbf{x}$.
- $p_x^-(\mathbf{x}')$ — вероятность взять $\mathbf{x}'$ как негативный объект для $\mathbf{x}$.
- τ^+ — вероятность 1 класса;
- $\tau^- = 1 - \tau^+$ — вероятность любого другого класса
- $p(\mathbf{x}') = \tau^+ p_x^+(\mathbf{x}') + \tau^- p_x^-(\mathbf{x}')$





Biased | Debiased M=8 | Unbiased

Найти $L^N_{\text{DebiasedPos}}$, минимизирующее $\lim\limits_{N\to\infty} \left| L^N_{\text{DebiasedPos}}(f) - L^N_{\text{Unbiased}}(f) \right|$.

$$L^N_{\text{Unbiased}}(f) = \mathbb{E}_{\substack{\mathbf{x}\sim p, \mathbf{x}^+\sim p_x^+, \\ \mathbf{x}^-\sim p_x^-}} \left[-\log \frac{\exp(\text{sim}_f(\mathbf{x}, \mathbf{x}^+))}{\exp(\text{sim}_f(\mathbf{x}, \mathbf{x}^+)) + \sum_{i=1}^N \exp(\text{sim}_f(\mathbf{x}, \mathbf{x}^-))} \right]$$

- Ching-Yao Chuang, Joshua Robinson, Lin Yen-Chen, Antonio Torralba, Stefanie Jegelkah (2020)
  Debiased Contrastive Learning
- Prannay Khosla, Piotr Teterwak, Chen Wang, Aaron Sarna, Yonglong Tian, Phillip Isola, Aaron Maschinot, Ce Liu, Dilip Krishnan (2021)
  Supervised Contrastive Learning
- CTing Chen, Simon Kornblith, Mohammad Norouzi, Geoffrey Hinton (2020)
  A Simple Framework for Contrastive Learning of Visual Representations
- Sohn, Kihyuk (2016)
  Improved Deep Metric Learning with Multi-class N-pair Loss Objective
- Florian Schroff, Dmitry Kalenichenko, James Philbin (2015)
  FaceNet: A Unified Embedding for Face Recognition and Clustering

Обозначим $h(\mathbf{x}, \widetilde{\mathbf{x}}) := e^{f(\mathbf{x})^T f(\widetilde{\mathbf{x}})}$.

Лемма

При $N \to \infty$:

$$L^N_{Unbiased}(f) \longrightarrow \mathbb{E}_{\substack{\boldsymbol{x}\sim p \\ \boldsymbol{x}^- \sim p_x^-}} \left[-\log \frac{R}{R + N\mathbb{E}_{\boldsymbol{x}^- \sim p_x^-} h(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}^-)} \right],$$

где

$$R = \frac{1}{\tau^+} \left(\mathbb{E}_{\boldsymbol{x}' \sim p} h(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}') - \tau^- \mathbb{E}_{\boldsymbol{x}^- \sim p_x^-} h(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}^-) \right).$$

$$\tilde{L}^N_{\text{DebiasedPos}}(f) = \mathbb{E}_{\substack{\mathbf{x}\sim p \\ \mathbf{x}^- \sim p_x^-}} \left[-\log \frac{\mathbb{E}_{\mathbf{x}' \sim p} h(\mathbf{x}, \mathbf{x}') - \tau^- \mathbb{E}_{\mathbf{x}^- \sim p_x^-} h(\mathbf{x}, \mathbf{x}_i^-)}{\mathbb{E}_{\mathbf{x}' \sim p} h(\mathbf{x}, \mathbf{x}') + (N\tau^+ - \tau^-) \mathbb{E}_{\mathbf{x}^- \sim p_x^-} h(\mathbf{x}, \mathbf{x}_i^-)} \right]$$

Оценим неизвестные матожидания эмпирически:

$$P_{\text{emp}}(\mathbf{x}, \{\mathbf{u}_i\}_{i=1}^N, \mathbf{v}) = \frac{1}{N+2} \left(\sum_{i=1}^N h(\mathbf{x}, \mathbf{u}_i) + h(\mathbf{x}, \mathbf{v}) + h(\mathbf{x}, \mathbf{x}) \right); \; P^-_{\text{emp}}(\mathbf{x}, \{\mathbf{u}_i\}_{i=1}^N) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N h(\mathbf{x}, \mathbf{u}_i).$$

Учет ошибок первого рода

$$\tilde{L}^N_{\text{DebiasedPos}}(f) = \mathbb{E}_{\substack{\mathbf{x}\sim p \\ \mathbf{x}^-\sim p_x^-}} \left[-\log \frac{\mathbb{E}_{\mathbf{x}'\sim p} h(\mathbf{x}, \mathbf{x}') - \tau^- \mathbb{E}_{\mathbf{x}^-\sim p_x^-} h(\mathbf{x}, \mathbf{x}_i^-)}{\mathbb{E}_{\mathbf{x}'\sim p} h(\mathbf{x}, \mathbf{x}') + (N\tau^+ - \tau^-) \mathbb{E}_{\mathbf{x}^-\sim p_x^-} h(\mathbf{x}, \mathbf{x}_i^-)} \right]$$

Финальная оценка:

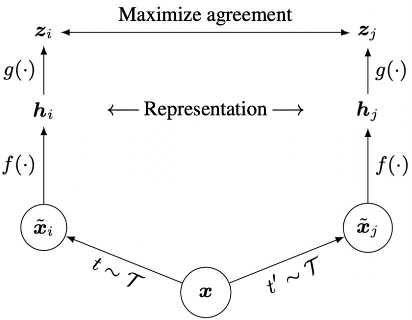
$$L^N_{\text{DebiasedPos}}(f) = \mathbb{E}_{\substack{\mathbf{x}\sim p \\ \{\mathbf{u}_i\}_{i=1}^N \sim p_x^{-N} \\ \mathbf{v}\sim p_x^+}} \left[-\log \frac{P_{\text{emp}} - \tau^- P^-_{\text{emp}}}{P_{\text{emp}} + (N\tau^+ - \tau^-) P^-_{\text{emp}}} \right].$$

Теорема

Для произвольного представления f и произвольного $\delta > 0$ существует достаточно большое N, что

$$|\tilde{L}^N_{DebiasedPos}(f) - L^N_{DebiasedPos}(f)| \leq \left[\left(1 + \frac{\tau^-}{\tau^+} + \delta\right) \sqrt{\frac{\pi}{2N}} + \left(1 + \frac{1}{\tau^+}\right) \sqrt{\frac{\pi}{2N+2}} \right] e^{3/2}$$

Использование SimCLR
CTing Chenet al., 2020



- $\mathcal{T}-$ семейство аугментаций (color distortion, Gaussian blur)
- Семплируются 2 аугментации $t, t' \sim \mathcal{T}$, применяются к каждому объекту.
- Обучаем сеть-энкодер $f(\cdot)$ и MLP сеть-проекцию $g(\cdot)$, максимизируя соответствие представлений.

Цель эксперимента

Сравнить качество представлений при использовании 3 функций потерь: Contrastive, DebiasedNeg и DebiasedPos.

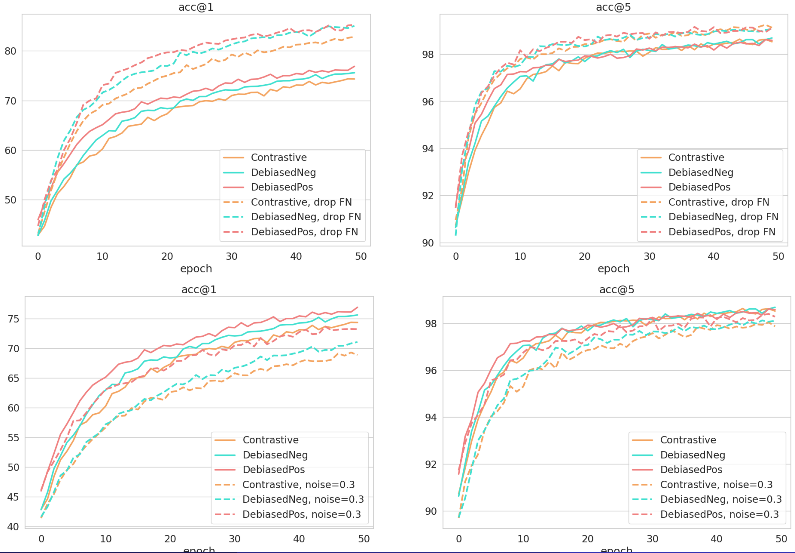
Обучение

- Обучаем SimCLR с энкодером ResNet-18 и оптимизатором Adam, 50 эпох с размером батча 512.
- Фиксируем выученные представления изображений из CIFAR10 на обучающей выборке.

Валидация

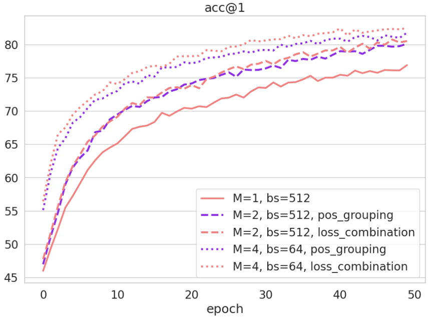
На тестовой выборке классифицируем объект, применяя top-K к банку представлений, считаем top-1 и top-5 accuracy.

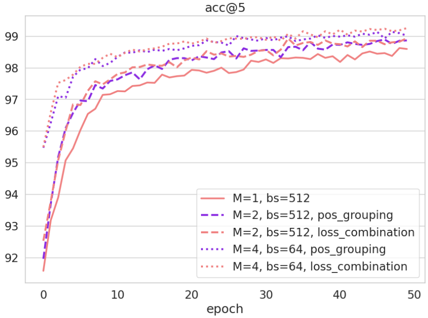
Функция потерь DebiasedPos устойчива к шуму и имеет превосходство на ранних эпохах.



Способы агрегации по M:

1. *pos-grouping*: внутри оценки $P_{\text{emp}}(\mathbf{x}, \{\mathbf{u}_i\}_{i=1}^N, \{\mathbf{v}_j\}_{j=1}^M)$ вместо $h(\mathbf{x}, \mathbf{v})$ используем $\frac{1}{M}\sum\limits_{j=1}^{M} h(\mathbf{x}, \mathbf{v}_j)$.
2. *loss-combination*: для каждой пары позитивных объектов считаем $L^N_{\text{DebiasedPos}}(f)$ и берем среднее по всем значениям функции потерь.



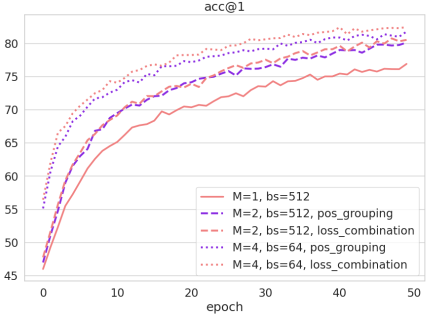


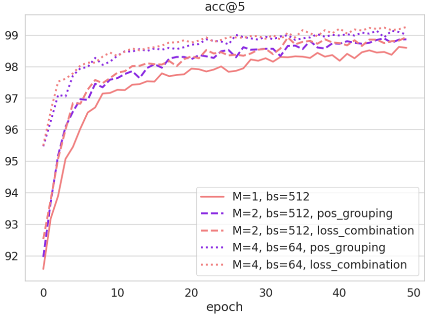
При увеличении M точность значительно возрастает, причем *loss-combination* лучше, чем *pos-grouping*.

Увеличение кол-ва позитивных объектов M

Method	M	bs	Training time (min)	acc@1	acc@5
-	1	512	122.85	76.76	98.61
pos-grouping	2	512	**181.87**	80.1	98.86
loss-combination	2	512	192.82	**80.5**	**98.93**
pos-grouping	4	64	**278.88**	81.75	99.01
loss-combination	4	64	308.25	**82.44**	**99.25**

Есть trade-off между производительностью и точностью.





- При верности предположения о правильности негативных объектов функция потерь DebiasedPos работает корректно.

- DebiasedPos более устойчив к шумным датасетам: когда увеличена доля ошибок I рода, DebiasedPos имеет большое преимущество в точности.

- При увеличенном кол-ве позитивных объектов точность для всех рассмотренных функций потерь возрастает.

- Способ агрегации *pos-grouping* менее затратный, а *loss-combination* более точный.