

知識転移グラフによる最適な半教師あり学習の探索

Exploring optimized semi-supervised learning using knowledge transfer graphs

村本 佳隆
Yoshitaka Muramoto

平川 翼
Tubasa Hirakawa

山下 隆義
Takayoshi Yamashita

藤吉 弘亘
Hironobu Fujiyoshi

中部大学
Chubu University

Π -model is a consistency-based, semi-supervised learning (SSL) method that can be derived from other conventional methods by devising main components such as data augmentations and models. Also, FixMatch combines conventional data augmentation methods with pseudo-labeling to achieve higher accuracy. The structures of these SSL methods were designed by humans and may not be the best learning method. In this paper, we aim to explore a new SSL method that contains the conventional methods. We introduce consistency loss, pseudo-labeling, and other main components of conventional methods into the knowledge transfer graph that contains mutual learning, and explore the graph structure to obtain the new SSL method from various SSL methods. From the explore and evaluation experiments using various datasets such as CIFAR-100, we confirmed that our method is more accurate than the conventional SSL methods.

1. はじめに

半教師あり学習法の分野で一貫性に基づいた代表的な手法として Π -model [Laine 17] がある。 Π -model は、データ拡張を工夫することで Virtual Adversarial Training (VAT) [Miyato 19] や Unsupervised Data Augmentation (UDA) [Xie 20], モデルを工夫することで Temporal Ensembling [Laine 17] や Mean Teacher [Tarvainen 17], というように主要な構成要素を工夫することで他の従来法へと派生する。派生手法のうち、擬似ラベリングを導入した手法として FixMatch [Sohn 20] がある。 FixMatch は、弱変換で得た擬似ラベルに対して、強変換で得た信頼度の低い推測値が一貫するように学習する。そのため、従来法で個別に行うような、一貫性に基づいた学習と擬似ラベリングを上手く組み合わせることで正則化効果を強めた。しかし、これら半教師あり学習の従来法における構成は人が設計したものであり、最適な学習法であるとは限らない。

本研究では、従来法を内包しつつ新たな半教師あり学習法の探索を目的とする。 FixMatch に焦点を当て、一貫性に基づいた学習法と擬似ラベリング手法を構成要素に分解し、グラフで統一的に表現する。提案手法では、知識転移グラフ [Minami 20] に一貫性損失や擬似ラベリングなど従来法の構成要素を導入し、グラフ構造の探索により高精度な半教師あり学習法を獲得する。実験では、CIFAR-10 と CIFAR-100 を用いて、従来法を内包する知識転移グラフを最適化し、獲得した新しく高精度な半教師あり学習法について考察する。

2. 関連研究

Yang らのサーベイ論文 [Yang 21] を参考にすると半教師あり学習法は、Generative methods, Consistency regularization methods, Graph-based methods, Pseudo-labeling methods, Hybrid methods の大きく 5 つに分類できる。 Hybrid に分類

連絡先:

村本 佳隆 : yoshitaka@mprg.cs.chubu.ac.jp
平川 翼 : hirakawa@mprg.cs.chubu.ac.jp
山下 隆義 : takayoshi@isc.chubu.ac.jp
藤吉 弘亘 : fujiyoshi@isc.chubu.ac.jp

される FixMatch に基づいて、Consistency regularization と Pseudo-labeling と Hybrid の 3 つについて述べる。

2.1 Consistency regularization methods

Consistency regularization methods は、ラベルなしデータを活用する正則化を行うことで、学習データに対する推測が一貫するように学習する方法である。代表的な手法として、Laine ら [Laine 17] が提案した Π -model がある。 Π -model は、それぞれ異なる摂動を付与した 2 つの入力データに対して、ネットワークが一貫した推測をするように学習する。 Laine らはさらに、時間方向のアンサンブルを用いて Π -model の計算コストと精度の双方を改善する Temporal Ensembling を提案した。 Tarvainen ら [Tarvainen 17] は、中間表現をもつ教師ネットワークにより目標値を生成する Mean Teacher を提案した。 Miyato ら [Miyato 19] は、敵対的な単一ベクトルを入力データに付与する VAT を提案した。 Zhanghan ら [Zhanghan 19] は、2 つのネットワークがそれぞれ一貫性に基づいた学習を行い、教師と生徒の関係性を更新しつつ蒸留 [Hinton 14] を行う Dual Student を提案した。 Xie ら [Xie 20] は、RandAugment [Cubuk 19] などの強力なデータ拡張を用いて正則化を行う UDA を提案した。

2.2 Pseudo-labeling methods

Pseudo-labeling methods は、ネットワーク出力をもとに、ラベルなしデータに対して擬似的な正解情報を付与する学習法である。代表的な手法として、Lee ら [Lee 13] が提案した Pseudo-Label がある。 Pseudo-Label は、事前にラベルありデータで学習したネットワークを用いて、推測クラスをもとに one-hot ラベルをラベルなしデータに付与する。ラベルなしデータに対する擬似ラベルの更新を行いつつ、ラベルありデータと擬似ラベルありデータの混合データセットに対する教師あり学習を繰り返すことで学習を行う。また Lee らは Pseudo-Label の同論文内において、one-hot による擬似ラベルは常に正しいとは限らないため、学習過程を阻害する確認バイアスがあると述べている。

2.3 Hybrid methods

Hybrid methods は、半教師あり学習法を分類した時に複数のカテゴリに該当する学習法である。代表的な手法とし

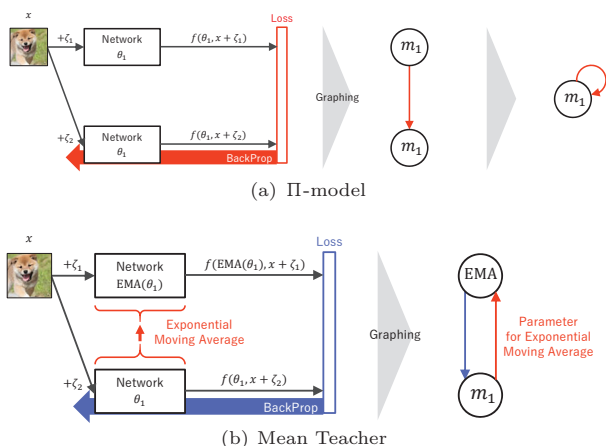


図 1: Consistency regularization methods のグラフ表現

て, Sohn ら [Sohn 20] が提案した FixMatch がある. FixMatch は, 2つの入力データのうち一方に正則化効果のため RandAugment[Cubuk 19] などの強力なデータ拡張による強変換, もう一方には左右反転や平行移動による弱変換を適用し, 弱変換時に生成する擬似ラベルと強変換時の推測値が一貫するように学習する. 擬似ラベルは, 閾値を推測値が越えた場合にのみ生成することで, 擬似ラベリングによる確認バイアスを抑制する. また FixMatch は, Π -model や UDA, Pseudo-Label で個々の手法が行っていた一貫性正則化と擬似ラベリングを上手く共存させて精度を向上させた学習法である.

3. 提案手法

FixMatch が一貫性正則化と擬似ラベリングを上手く共存させている学習法であることから, 従来法の組み合わせによる高精度化が可能である. そこで, 半教師あり学習法に対して従来法を内包しつつ統一的に表現することで, 新たな半教師あり学習法を探索する. 従来法として Consistency regularization methods と Pseudo-labeling methods, Hybrid をそれぞれ主要な構成要素に分解し, ノードとエッジによりグラフ化する. ノードはネットワークモデル, エッジは誤差計算と誤差逆伝播による知識転移の方向を表す. 探索時は, 従来法のグラフ表現をもとに新しい機構として, 一貫性損失, 指数移動平均 (EMA) モデル, PseudoLoss, Threshold Gate を知識転移グラフに導入し, グラフ構造の最適化を行う.

3.1 Consistency regularization のグラフ表現

Consistency regularization methods の代表的な手法として Π -model に加えて, モデル要素が異なる Mean Teacher をそれぞれグラフで表現する.

Π -model の学習の流れに対するグラフ表現を図 1(a) に示す. $f(\theta, x)$ はパラメータ θ を持つネットワークに画像 x を入力した時の推測確率を表す. 正則化のため 1 枚の画像 x に対して異なる摂動を付与した 2 枚の画像 $x + \zeta_1, x + \zeta_2$ をネットワークに入力し, それぞれの推測確率 $f(\theta_1, x + \zeta_1), f(\theta_1, x + \zeta_2)$ の誤差を最小化するように一貫性損失で学習する. 一貫性損失 \mathcal{L}_{con} を式 (1) に示す.

$$\mathcal{L}_{con}(x) = \mathbb{E}_x \mathcal{R}(f(\theta_1, x + \zeta_1), f(\theta_1, x + \zeta_2)) \quad (1)$$

ここで, \mathcal{R} は二乗誤差や交差エントロピーなどの距離関数である. Π -model は, 誤差の算出に用いるネットワークに対して, 誤差逆伝播で更新するネットワークが同一である. そのため, パラメータ θ_1 をもつネットワークモデルをノード m_1 と

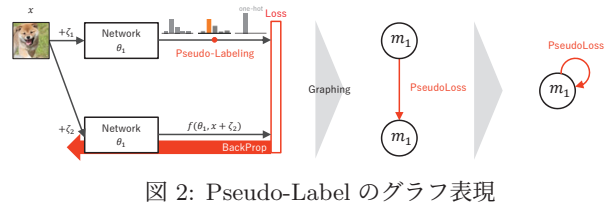


図 2: Pseudo-Label のグラフ表現

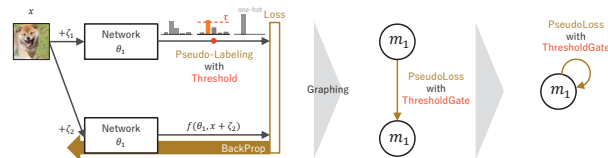


図 3: FixMatch のグラフ表現

して, m_1 から m_1 への知識転移としてグラフに表現できる. また, 始点と終点がノード m_1 で同一であるため, 2つのノードをまとめて, 始点と終点が同じノードにあるエッジで一貫性損失を表現する.

Mean Teacher の学習の流れに対するグラフ表現を図 1(b) に示す. Π -model に対して Mean Teacher は, 2つの入力のうち一方の入力に対して EMA モデルが推測する点が異なり, それぞれの推測確率 $f(\text{EMA}(\theta_1), x + \zeta_1), f(\theta_1, x + \zeta_2)$ の誤差を最小化するように一貫性損失で学習する. EMA モデルのパラメータ $\text{EMA}(\theta_1)$ の更新を式 (2) に示す.

$$\text{EMA}(\theta_{1,t}) = \alpha \text{EMA}(\theta_{1,t-1}) + (1 - \alpha) \theta_{1,t} \quad (2)$$

ここで, α は平滑化係数を表すハイパーパラメータ, $\theta_{1,t}$ は学習ステップ t における θ_1 の値である. Mean Teacher は, θ_1 が誤差逆伝播, 指数移動平均モデルのパラメータ $\text{EMA}(\theta_1)$ が θ_1 の EMA で更新する. そのため, EMA モデルを表すノードを用いて, EMA モデルと m_1 による双方向の知識転移としてグラフに表現する.

3.2 Pseudo-labeling のグラフ表現

Pseudo-labeling methods の代表的な手法として Pseudo-Label をグラフで表現する. Pseudo-Label の学習の流れに対するグラフ表現を図 2 に示す. Pseudo-Label は, $f(\theta_1, x + \zeta_1)$ の推測クラスが 1 となるように one-hot ベクトルを生成し, 擬似的に入力画像のラベル y' とする. y' と $f(\theta_1, x + \zeta_2)$ の交差エントロピー誤差を最小化するように学習する. Pseudo-Label の誤差関数 \mathcal{L}_{pse} を式 (3) に示す.

$$\mathcal{L}_{pse}(x) = -\mathbb{E}_x \sum_c y'_c \log f_c(\theta_1, x + \zeta_2) \quad (3)$$

ここで, C はクラス数である. Pseudo-Label は, 擬似ラベルと推測確率が一致するよう誤差を計算して学習する. そのため, Pseudo-Label の誤差関数を PseudoLoss としてエッジに表現し, m_1 から m_1 への知識転移としてグラフに表現できる.

3.3 Hybrid のグラフ表現

Hybrid methods の代表的な手法として FixMatch をグラフで表現する. FixMatch の学習の流れに対するグラフ表現を図 3 に示す. FixMatch は, 擬似ラベルに推測確率が一致するように学習する. 擬似ラベルは学習序盤などネットワーク性能が不十分な状態で生成すると, 学習を阻害する可能性がある. そのため, 推測確率が閾値 τ を越える場合のみ擬似ラベルを利用することで損失値を制御する. 入力 a を \mathcal{L}_{pse} として, 擬似ラベリングに対する損失値の制御をゲート関数 $G^{\text{Threshold}}(a)$ で表し, 式 (4) に計算方法を示す.

$$\begin{aligned}
 G^{\text{Threshold}}(a) &= \mathbb{1}(\max f(x) > \tau) \cdot a \\
 &= \mathbb{1}(\max f(x) > \tau) \cdot \mathcal{L}_{\text{pse}}(x)
 \end{aligned}
 \tag{4}$$

FixMatch の誤差関数は、PseudoLoss で得た損失を Through-Gate で制御するエッジで表現する。また、疑似ラベル生成時に使用する摂動 ζ_1 に対して ζ_2 を RandAugment などの強い摂動とすることで、さらに正則化効果を高めることができる。

3.4 グラフ最適化による半教師あり学習法の探索

ここでは、これまでに述べたグラフを統一的に表現する知識転移グラフに拡張し、グラフ構造の最適化により新しい半教師あり学習法を探索する。損失に対して Gate 関数で重み付けすることで損失を制御する。Gate 関数として Through Gate, Cutoff Gate, Linear Gate, Correct Gate の 4 つがある。Through gate は、入力されたサンプルごとの損失情報をそのまま通す。Cutoff gate は、損失情報を通さない。Linear gate は学習序盤には損失の重みを小さくし、学習が進むにつれて重みを大きくする。Correct gate はソースノードの正解したサンプルの損失情報のみを通す。グラフ構造の最適化により新しい半教師あり学習法を探索する。エッジでは、最適化したい評価対象ノードを除くノードを補助ノードとして、評価対象のノードの精度が最大化するように補助ノードとエッジをハイパーパラメータサーチにより探索する。探索空間の大きさは、ノード数を N 、ネットワークモデルの種類数を M 、Gate 関数の種類数を G 、誤差計算の種類数を L とすると、 $N = 1$ の時 $M^{N-1}G^{N(N+1)}L^{N^2}$ 、 $N > 1$ の時 $(M^{N-1}G^{N(N+1)}L^{N^2})/(N-1)$ である。例として、 $N = 2, M = 3, G = 4, L = 2$ の場合約 20 万通り、 $N = 2, M = 3, G = 4, L = 2$ の場合約 700 億通りという非常に膨大なパターンが存在する。

最適化法としてランダムサーチと枝刈りを組み合わせた ASHA [Li 18] を用いる。ASHA は、ランダムサーチによって提案されたパラメータを用いて、学習途中の既定の epoch 数でネットワークを評価し、過去の試行と比較した時に既定の割合を下回る順位であれば枝刈りを行うアルゴリズムである。本論文では、 $A = 4$ として、 $1, 4, 16, \dots, A^k$ エポック目で評価対象ノードの評価を行い、過去の試行と比較して全体の上位 $1/A$ を下回ったら終了し、新たなパラメータで学習する。この試行回数の合計が事前に設定した回数になるまで繰り返す。このアルゴリズムを並列かつ非同期的に実行することで、計算効率を高めつつ精度の高いパラメータを探索することができる。

4. 評価実験

従来法を内包する知識転移グラフから ASHA を用いてグラフ構造を探索し、その中で最適だったグラフ構造および新しい半教師あり学習法を評価する。データセットは CIFAR-10, CIFAR-100 を用いる。学習回数は 200 epoch、試行回数は 4500 回、評価対象ノードは ResNet32、optimizer は momentumSGD、momentum は 0.9 である。ノード数は 2, 3 である。CIFAR-100 のラベルありデータ数は 2,000, 4,000, 6,000, 8,000, 10,000、CIFAR-10 のラベルありデータ数は 1,000, 4,000 である。ノードの探索空間は、ResNet18, WideResNet の 28-2 と 28-6 に加えて EMA モデルの 4 種である。エッジに関して、損失計算の探索空間は KL-divergence に加えて PseudoLoss の 2 種、Gate 関数の探索空間は Through Gate, Linear Gate, Cutoff Gate に加えて Threshold Gate の 4 種である。

4.1 評価結果

知識転移グラフの探索によって得た新しい学習法に対して、CIFAR-100, CIFAR-10 で評価した時の精度をそれぞれ表 1 に示す。従来法の結果は 5 回試行した時の正解率の平均値と標準偏差である。表 1 より、ラベル数がいずれの場合においても従来法に比べて最適化によって得たグラフ構造の精度が高く、ノード数が 2 から 3 になると更に精度が向上していることがわかる。これは、従来法を内包する知識転移グラフが新しく高精度なグラフを含み、ノード数が増えて更に多様なグラフ構造から探索することの有効性を表している。

4.2 最適化された半教師あり学習のグラフ構造

CIFAR-100 を用いた知識転移グラフの探索で獲得した学習法のグラフ構造について、代表的なものを図 4 に示す。ノード数 3 では、ラベルありデータ数が 2,000 と少ない図 4(a) の場合に蒸留や Mean Teacher を内包し、ラベルありデータ数が 10,000 と多い図 4(b) の場合に疑似ラベリングを活用していることから、ラベル数が増えるに従って低エントロピーな確率分布を用いたグラフ構造が選ばれる傾向にある。また、図 4(a) では Π -model-Mean Teacher-蒸留、図 4(b) では Pseudo-Label-Mean Teacher-蒸留を組み合わせたようなグラフ構造を獲得している。さらには、Threshold Gate で知識を厳選しつつ EMA モデルを生成して蒸留を行うような従来法が混在するグラフ構造を獲得している。

5. おわりに

本論文では、半教師あり学習の従来法に用いられる機構を知識転移グラフに導入し、知識転移グラフを半教師あり学習法に拡張した。実験では、従来法を内包する知識転移グラフの探索により新しく高精度な学習方法、従来法を混在したような学習方法を獲得した。ハイパーパラメータの組み合わせ数に対して、探索する組み合わせ数を増やすことでより高精度なグラフ構造を獲得できる可能性がある。今後は、ベイズ最適化の導入、自己教師あり学習への拡張について検討する。

6. 謝辞

この成果は、国立研究開発法人新エネルギー・産業技術総合開発機構 (NEDO) の委託業務 (JPNP18002) の結果得られたものである。

参考文献

- [Minami 20] Minami, S., *et al.*: Knowledge Transfer Graph for Deep Collaborative Learning, *ACCV* (2020).
- [Laine 17] Laine, S., *et al.*: Temporal Ensembling for Semi-Supervised Learning, *ICLR* (2017).
- [Miyato 19] Miyato, T., *et al.*: Virtual Adversarial Training: A Regularization Method for Supervised and Semi-Supervised Learning, *TPAMI*, Vol. 41, pp. 1979–1993 (2019).
- [Xie 20] Xie, Q., *et al.*: Unsupervised Data Augmentation for Consistency Training, *NeurIPS*, Vol. 33, pp. 6256–6268 (2020).
- [Tavainen 17] Tavainen, A., *et al.*: Mean teachers are better role models: Weight-averaged consistency targets improve semi-supervised deep learning results, *NeurIPS*, Vol. 30, pp. 1195–1204 (2017).

表 1: CIFAR-100 および CIFAR-10 を用いた精度比較 [%]

データセット	CIFAR-100						CIFAR-10		
	ラベルありデータ数	2,000	4,000	6,000	8,000	10,000	all	1,000	4,000
Supervised		20.85	32.25	41.56	50.38	53.61	69.93	55.42	75.94
Π -model		29.54	41.98	50.69	53.44	55.98	-	54.41	77.54
Mean Teacher		31.28	43.10	48.85	49.98	54.52	-	53.45	82.50
Ours(2 ノード)		40.96	49.45	54.69	60.65	61.87	-	63.78	85.08
Ours(3 ノード)		42.55	54.60	56.99	62.49	62.79	-	82.45	87.03

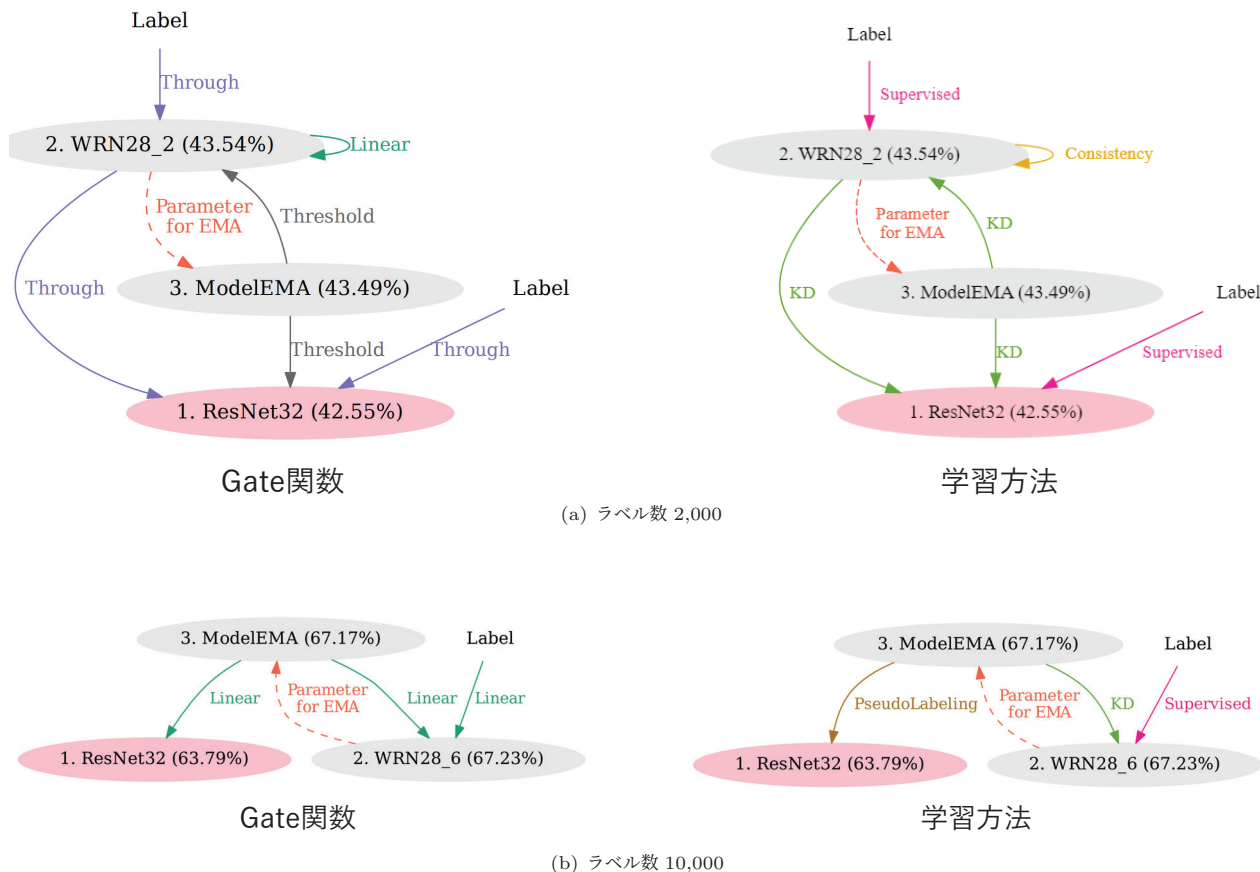


図 4: CIFAR-100 を用いた探索で獲得した 3 ノードのグラフ構造 (評価対象ノード: 赤色)

[Sohn 20] Sohn, K., *et al.*: FixMatch: Simplifying Semi-Supervised Learning with Consistency and Confidence, *NeurIPS*, Vol. 33, pp. 596–608 (2020).

[Yang 21] Yang, X., *et al.*: A Survey on Deep Semi-supervised Learning, *arXiv preprint, arxiv:2103.00550* (2021).

[Zhanghan 19] Zhanghan, K., *et al.*: Dual Student: Breaking the Limits of the Teacher in Semi-supervised Learning, *ICCV*, pp. 6728–6736 (2019).

[Hinton 14] Hinton, G., *et al.*: Distilling the Knowledge in a Neural Network, *NeurIPS* (2014).

[Lee 13] Lee, D., *et al.*: Pseudo-label: The simple and efficient semi-supervised learning method for deep neural networks, *ICML* (2013).

[Cubuk 19] Cubuk, E., *et al.*: RandAugment: Practical automated data augmentation with a reduced search space, *NeurIPS*, Vol. 33, pp. 18613–18624 (2019).

[Li 18] Li, L., *et al.*: Massively parallel hyperparameter tuning. *arXiv preprint, arXiv:1810.05934* (2018).