목충협

2023.05.26



발표자



- 목충협 (Chunghyup Mok)
 - ✓ 고려대학교 산업경영공학
 - ✓ Data Mining & Quality Analytics Lab.
 - ✓ 석박통합과정(2019.03~)
- 관심분야
 - ✓ Anomaly detection
 - ✓ Self-supervised learning
 - ✓ Contrastive learning
- E-mail: mokch@korea.ac.kr

Contents

1. Contrastive learning

- Definition
- Class discrimination
- Instance discrimination

2. Contrastive Learning for Anomaly detection

- Classification-based anomaly detection for general data
- Learning and evaluating representations for deep one-class classification
- CSI: Novelty Detection via Contrastive Learning on Distributionally Shifted Instances



Definition

A contrast is a great difference between two or more things which is clear when you compare them.

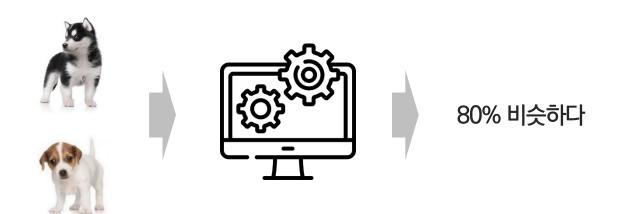
Contrast : 여러 대상들을 비교할 때 나타나는 명확한 차이

Contrastive Learning: 여러 대상들의 명확한 차이를 활용하는 학습

Definition

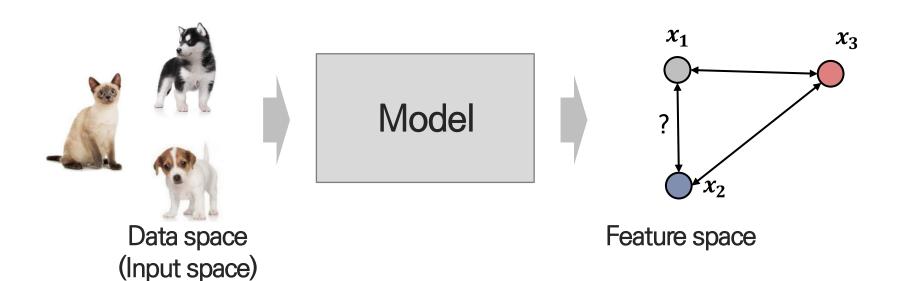
데이터간 유사도를 정의하고 모델에 학습하는 방식

학습된 모델은 주어진 데이터들의 차이를 나타낼 수 있다



Definition

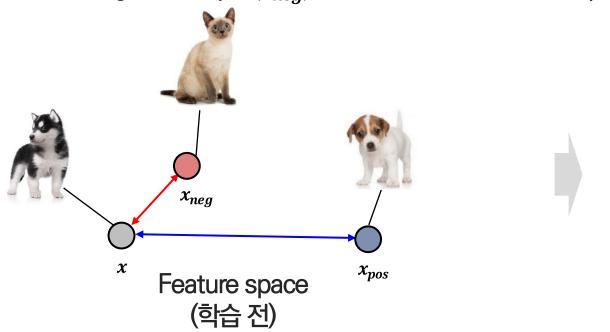
- ❖ Feature space에서의 거리 정의 (distance)
 - 1. Non-negativity: $f(x_1, x_2) \ge 0$
 - 2. Identity of Discernible : $f(x_1, x_2) = 0 \iff x_1 = x_2$
 - 3. Symmetry: $f(x_1, x_2) = f(x_2, x_1)$
 - 4. Triangle inequality: $f(x_1, x_3) \le f(x_1, x_2) + f(x_2, x_3)$

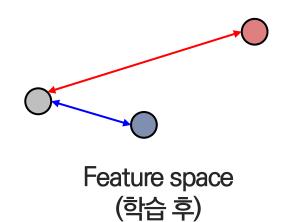


Definition

❖ 데이터간 유사도 정의

- Anchor (x) : 기준이 되는 sample
- Positive sample (x_{pos}) : anchor와 유사한 sample
- Negative sample (x_{neg}) : anchor와 유사하지 않은 sample





- ❖ 데이터의 클래스를 활용하는 contrastive learning
 - 1. Triplet loss
 - 2. N-pair loss
 - 3. Supervised contrastive loss
- ❖ 데이터간 유사도 정의
 - Positive sample (x_{pos}) : anchor와 같은 class에 속하는 sample
 - Negative sample (x_{neg}) : anchor와 다른 class에 속하는 sample

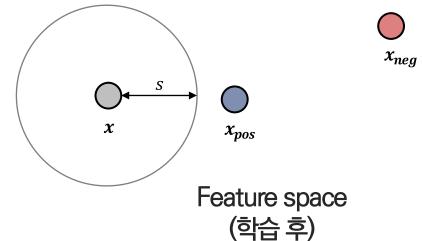
Class Discrimination

- Triplet loss (CVPR, 2015)
 - Anchor와 하나의 positive sample과 가까워지도록
 - Anchor와 하나의 negative sample과 멀어지도록
 - 한 점으로 모이지 않기 위해 최소 거리 s (margin) 설정

$$\mathcal{L}_{triplet}(x, x_{pos}, x_{neg}) = \sum_{x \in X} \max(\|f(x) - f(x_{pos})\|^2 - \|f(x) - f(x_{neg})\|^2 - s, 0)$$

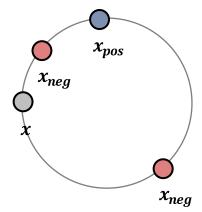


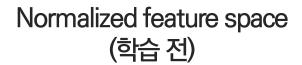
Feature space (학습 전)

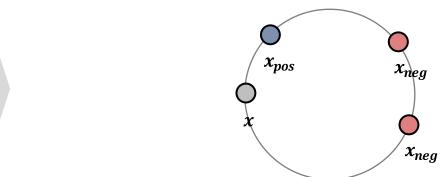


- ❖ N-pair loss (NeurIPS, 2016)
 - 기존의 triplet loss를 확장하여 여러 개의 negative sample들을 고려
 - Normalized feature space에서 cosine similarity 사용

$$\mathcal{L}_{N-pair}(x, x_{pos}, \{x_{neg}^i\}) = -\sum_{x \in X} log \frac{\exp(f(x)f(x_{pos}))}{\exp(f(x)f(x_{pos})) + \sum_{i} \exp(f(x)f(x_{neg}))}$$





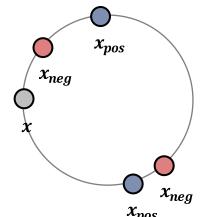


Normalized feature space (학습 후)

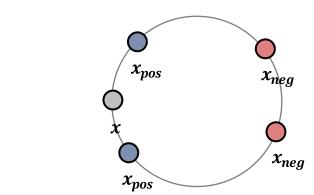
Class Discrimination

- Supervised contrastive learning (NeurlPS, 2020)
 - 기존의 N-pair loss를 확장하여, 여러 개의 positive sample들에 대해 고려
 - Positive / negative 기준은 class

$$\mathcal{L}_{supcon}(x, \{x_{pos}^i\}, \{x_{neg}^j\}) = -\sum_{x \in X} \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} log \frac{\exp(f(x)f(x_{pos}^i)/\tau)}{\exp(f(x)f(x_{pos}^i)/\tau) + \sum_{j} \exp(f(x)f(x_{neg}^j)/\tau)}$$

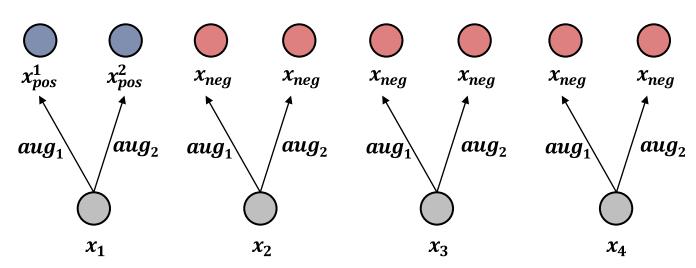


Normalized feature space (학습 전)



Normalized feature space (학습 후)

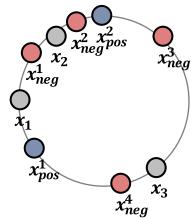
- ❖ 데이터의 클래스를 활용하지 않는 contrastive learning
 - SimCLR loss InfoNCE (ICML, 2020)
- ❖ Augmentation 활용하여 유사도 정의
 - Augmentation으로 positive/negative sample을 정의
 - Positive sample: 같은 sample로 augmented 된 sample
 - Negative sample: 다른 sample로 augmented 된 sample



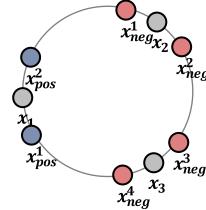
Instance Discrimination

- ❖ SimCLR (ICML, 2020)
 - Positive sample: 같은 sample로 augmented 된 sample
 - Negative sample: 다른 sample로 augmented 된 sample

$$\mathcal{L}_{simCLR}(x_{pos}^{1}, x_{pos}^{2}, \{x_{neg}^{j}\}) = -\sum_{x \in X} log \frac{\exp(f(x_{pos}^{1})f(x_{pos}^{2})/\tau)}{\sum_{i} \exp(f(x_{pos}^{1})f(x_{neg}^{i})/\tau)}$$



Normalized feature space (학습 전)



Normalized feature space (학습 후)

- ❖ Contrastive learning의 효과
 - 정확도와 강건함을 높일 수 있음
 - → 기존의 cross entropy의 경우 label noise에 취약함
- ❖ 기존의 cross entropy loss에 추가하여 사용
 - 더 좋은 representation learning을 위해 혼합하여 사용
 - → Cross entropy loss + triplet loss / simCLR
- ❖ 사전학습 방식으로 사용
 - 적절한 augmentation과 같이 활용하면 기존의 지도학습보다 더 좋은 성능을 보임
 - → Supervised contrastive learning

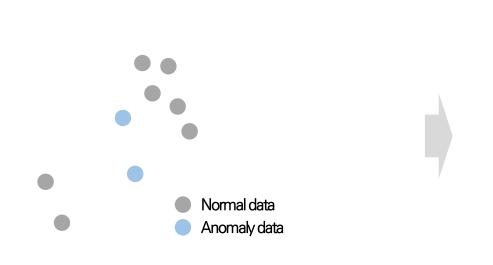


Anomaly Detection

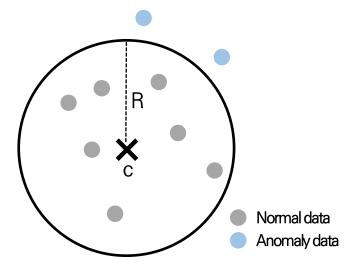
- ❖ 심각한 데이터 불균형
 - 많은 양의 정상 데이터와 극소수의 이상 데이터로 구성됨
- ❖ 레이블 없음
 - 레이블이 제한적이거나 없을 수 있음
- ❖ 이상 데이터의 다양성
 - 하나의 클래스로 정의할 수 없음
- ❖ 사전 지식의 부족
 - 학습 단계에 없었던 새로운 이상 데이터가 나타날 수 있음

Deep one-class classification

- Representation for anomaly detection
 - 정상 데이터는 하나의 중심점(c)에 모이도록 학습
 - 중심점으로부터 일정 거리(R) 이상 떨어져 있는 경우 혹은 밀도가 낮은 경우 이상으로 판단
 - → SVDD / OCSVM 과 유사한 방식



Feature space (학습 전)



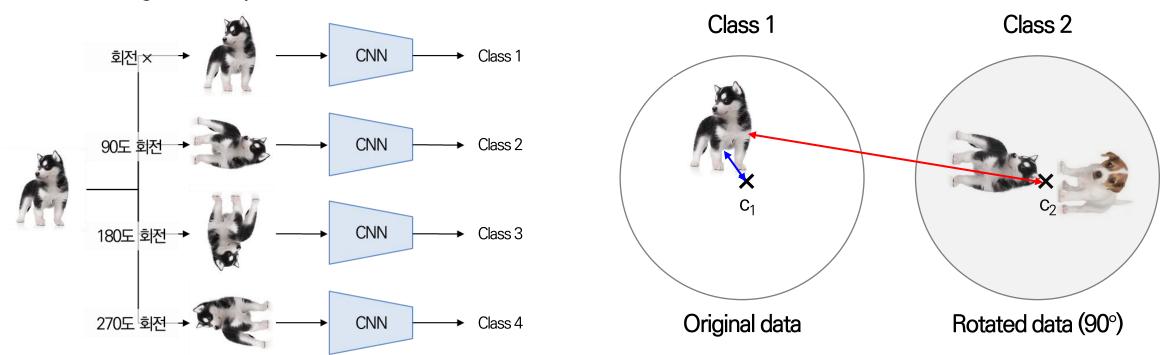
Feature space (학습 후)

- Classification-based anomaly detection for general data GOAD (ICLR 2020)
 - Augmentation을 이용하여 새로운 클래스(class 2, 3, 4) 생성
 - → Class 정보를 활용하는 contrastive learning 적용

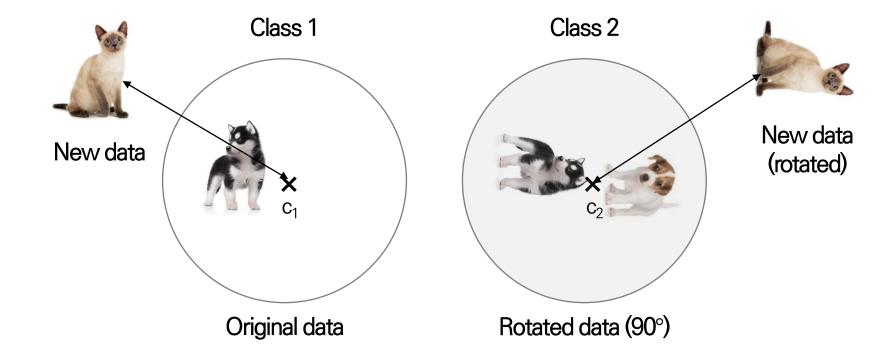
Class 1 Class 2 Class 3 Class 4

Original data Rotated data (90°) Rotated data (180°) Rotated data (270°)

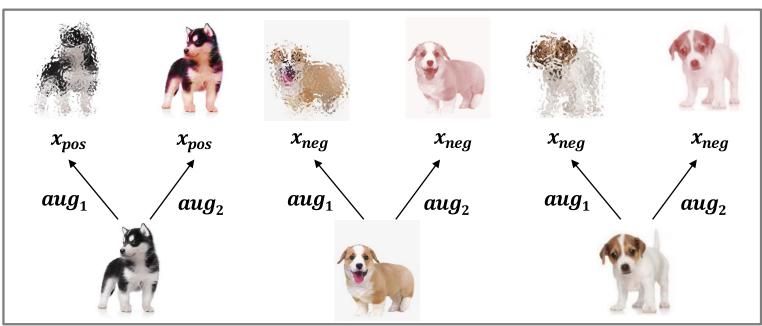
- Classification—based anomaly detection for general data GOAD (ICLR 2020)
 - Cross entropy loss + triplet loss
 - Positive sample : 해당 클래스의 중심점
 - Negative sample: 다른 클래스 중 가장 가까운 클래스의 중심점

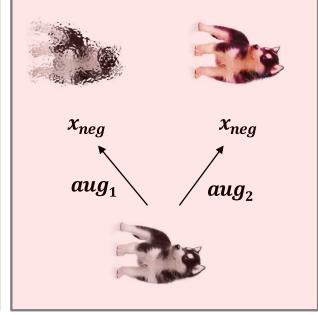


- Classification-based anomaly detection for general data GOAD (ICLR 2020)
 - 새로운 데이터가 들어오면, 동일한 augmentation을 적용함
 - 각 class의 중심점과의 거리를 이용하여 이상 탐지 진행



- Learning and evaluating representations for deep one-class classification (ICLR, 2021)
 - 2-stage framework 제안
 - 1. Anomaly detection에 적합한 representation을 학습
 - → SimCLR에 negative sample을 추가하여 학습에 사용

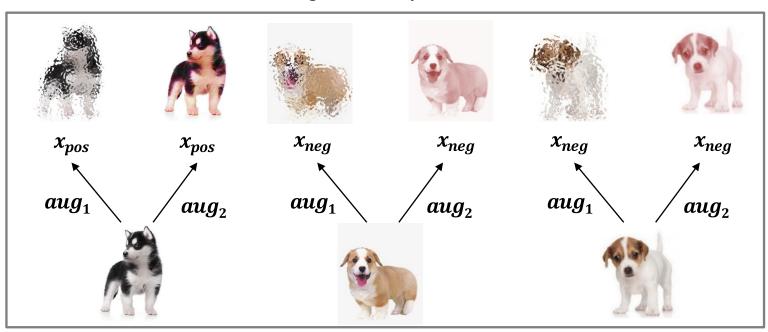


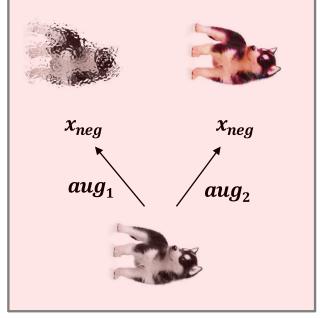


SimCLR

추가된 negative sample

- ❖ Learning and evaluating representations for deep one—class classification (ICLR, 2021)
 - 2-stage framework 제안
 - 1. Anomaly detection에 적합한 representation을 학습
 - → SimCLR에 negative sample을 추가하여 학습에 사용





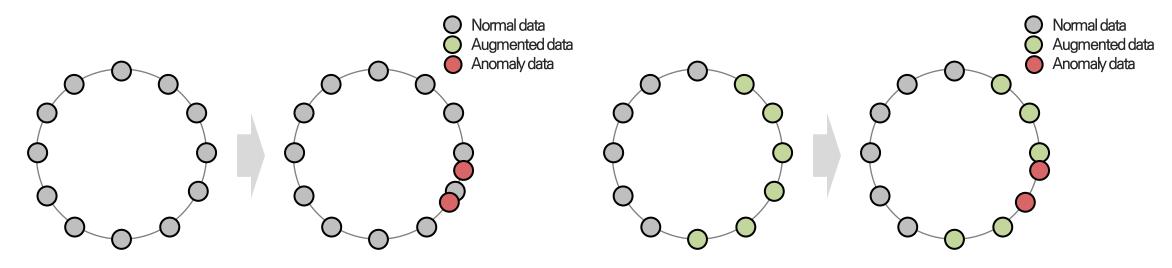
SimCLR

추가된 negative sample



Instance Discrimination

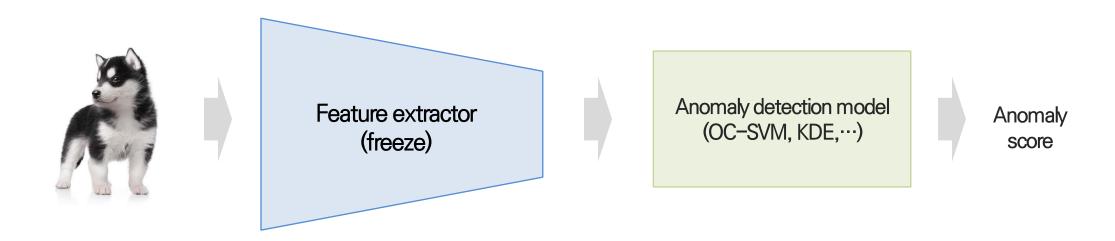
- Learning and evaluating representations for deep one-class classification (ICLR, 2021)
 - 2-stage framework 제안
 - 1. Anomaly detection에 적합한 representation을 학습
 - → SimCLR에 negative sample을 추가하여 학습에 사용



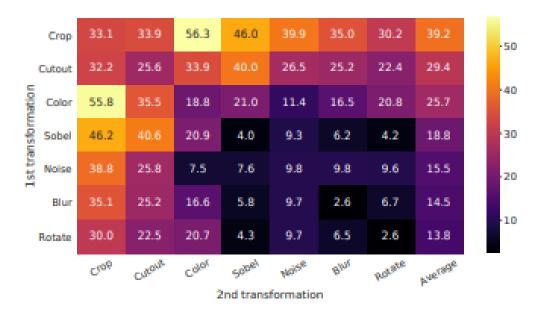
SimCLR 로 학습된 feature space

Negative sample을 추가하여 학습된 feature space

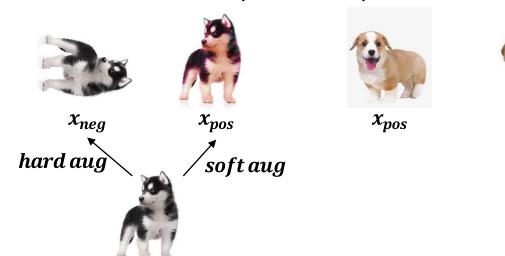
- Learning and evaluating representations for deep one-class classification (ICLR, 2021)
 - 2-stage framework 제안
 - 1. Anomaly detection에 적합한 representation을 학습
 - → SimCLR에 negative sample을 추가하여 학습에 사용
 - 2. 간단한 anomaly detection 모델을 사용하여 이상 탐지



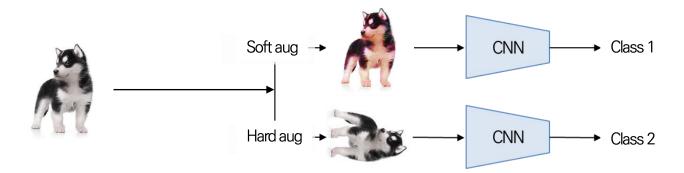
- CSI: Novelty Detection via Contrastive Learning on Distributionally Shifted Instances (NeurIPS 2020)
 - One-class OOD detection
 - 1. Augmentation의 종류에 따라 positive / negative sample 정의
 - → SimCLR에서 augmentation을 적용했을 때, 성능이 향상하는 경우 positive sample로 정의
 - → SimCLR에서 augmentation을 적용했을 때, 성능이 감소하는 경우 negative sample로 정의



- CSI: Novelty Detection via Contrastive Learning on Distributionally Shifted Instances (NeurIPS 2020)
 - One-class OOD detection
 - 1. Augmentation의 종류에 따라 positive / negative sample 정의
 - → SimCLR에서 augmentation을 적용했을 때, 성능이 향상하는 경우 positive sample로 정의
 - → SimCLR에서 augmentation을 적용했을 때, 성능이 감소하는 경우 negative sample로 정의
 - 2. 나머지 정상 샘플들을 positive sample로 정의



- CSI: Novelty Detection via Contrastive Learning on Distributionally Shifted Instances (NeurIPS 2020)
 - One-class OOD detection
 - SimCLR loss + Cross entropy loss



Summary & conclusion

- ❖ Contrastive learning은 강건하고 좋은 representation을 학습할 수 있다.
- ❖ Positive / negative sample을 잘 정의하면 anomaly detection 에도 적용할 수 있다.
 - Hard augmentation → negative sample
 - Normal sample / soft augmentation → positive sample
- ❖ Augmentation에 의존적이기 때문에, augmentation을 적용하기 힘든 데이터에는 적용하기 어렵다.

감사합니다.