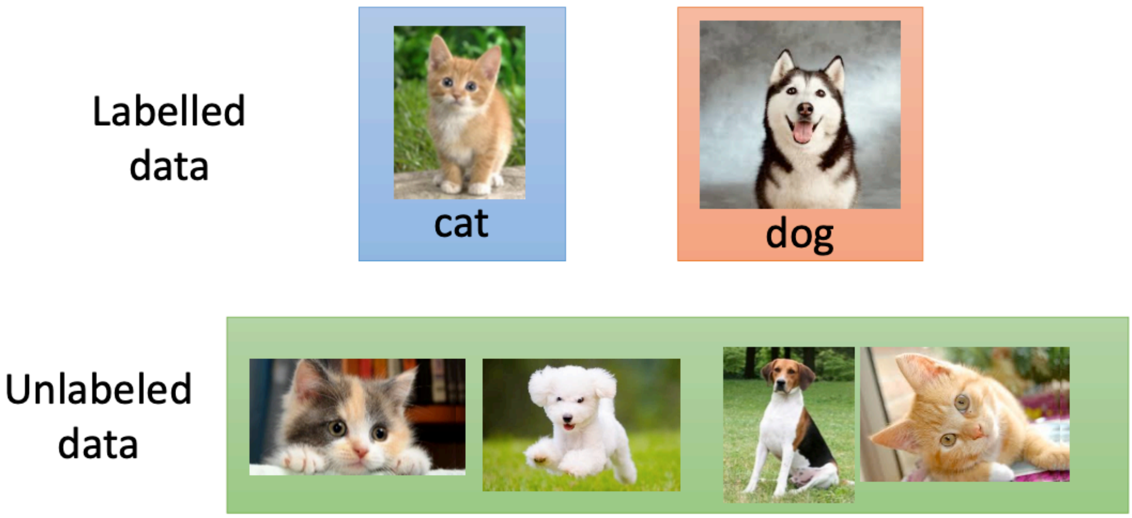
Introduction

- Supervised learning: $\{(x^r, \hat{y}^r)\}_{r=1}^{R}$
  - E.g.x^r: image,$\hat{y}^r$: class labels
- Semi-supervised learning: $\{(x^r, \hat{y}^r)\}_{r=1}^{R}$, $\{x^u\}_{u=R}^{R+U}$
  - A set of unlabeled data, usually U >> R
  - Transductive learning: unlabeled data is the testing data
  - Inductive learning: unlabeled data is not the testing data
- Why semi-supervised learning?
  - Collecting data is easy, but collecting "labelled" data is expensive
  - We do semi-supervised learning in our lives

对于猫狗分类问题，如果只有一部分data有label，还有其他很大一部分data是unlabeled，那么我们可以认为unlabeled data对我们网络的训练是无用的吗?



(Image of cats and dogs without labeling)

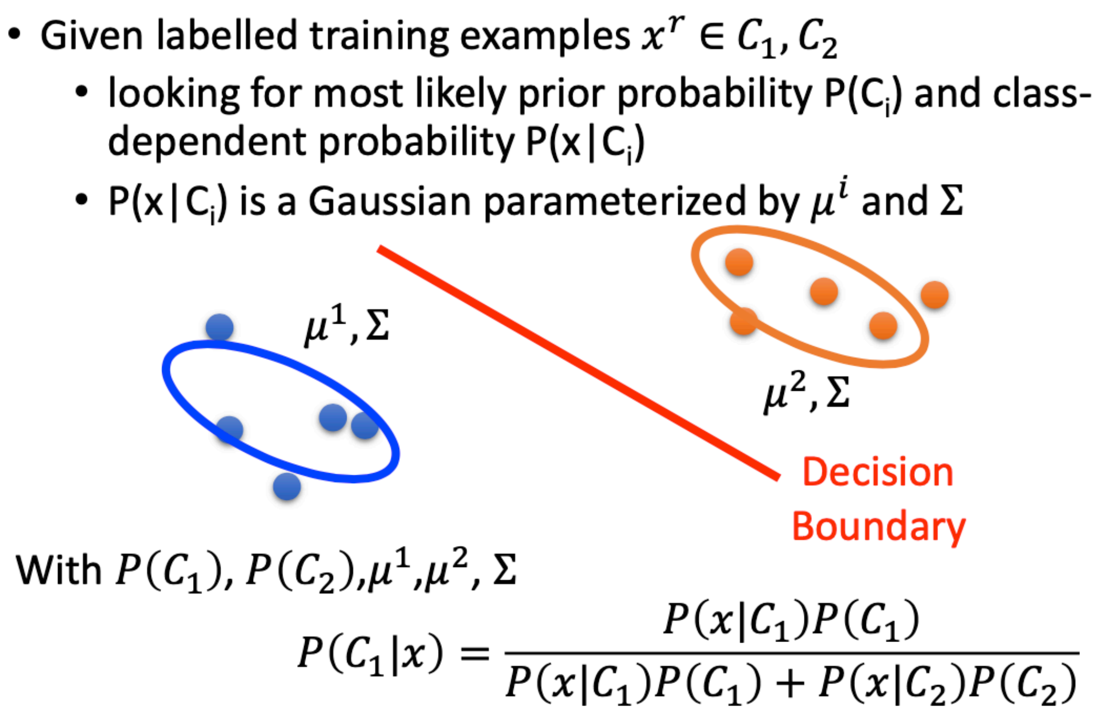
Q：Why semi-supervised learning helps？

A：如图所示，图中灰色圆点表示unlabeled data，其他圆点表示labeled data。如果没有unlabeled data，此时可以用一条竖直的线将猫狗进行分类，boundary为竖直的那条线；但unlabeled data的分布也可以告诉我们一些信息，对我们的训练也是有帮助的，有了unlabeled data，此时的boundary为斜直线

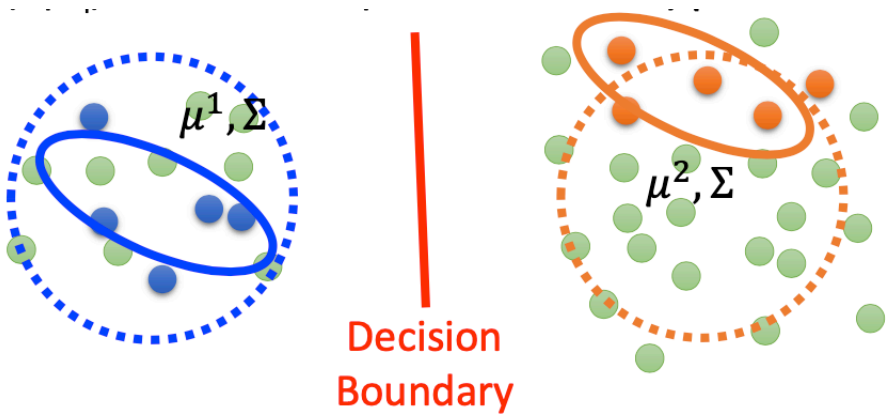
Semi-supervised Learning for Generative Model

Intuitive

不考虑unlabeled data，只有labeled data



如果把unlabeled data也考虑进来，此时的boundary 也发生了变化



The unlabeled data x^u help re-estimate $P(C_1)$, $P(C_2)$, μ^1,μ^2, Σ

Formulation

- Initialization: $\theta = \{P(C_1), P(C_2), \mu^1, \mu^2, \Sigma\}$

E

- Step 1: compute the posterior probability of unlabeled data

$P_\theta(C_1|x^u)$ Depending on model θ

Back to step 1

M

- Step 2: update model

$$P(C_1) = \frac{N_1 + \sum_{x^u} P(C_1|x^u)}{N}$$

N: total number of examples
N_1: number of examples belonging to C_1

$$\mu^1 = \frac{1}{N_1}\sum_{x^r \in C_1} x^r + \frac{1}{\sum_{x^u} P(C_1|x^u)} \sum_{x^u} P(C_1|x^u) x^u \quad \ldots\ldots$$

不同的maximum likelihood对比

Why?

$$\theta = \{P(C_1), P(C_2), \mu^1, \mu^2, \Sigma\}$$

- Maximum likelihood with labelled data **Closed-form solution**

$$logL(\theta) = \sum_{x^r} logP_\theta(x^r, \hat{y}^r)$$

$$\boxed{\begin{aligned} &P_\theta(x^r, \hat{y}^r) \\ &= P_\theta(x^r|\hat{y}^r)P(\hat{y}^r) \end{aligned}}$$

- Maximum likelihood with labelled + unlabeled data

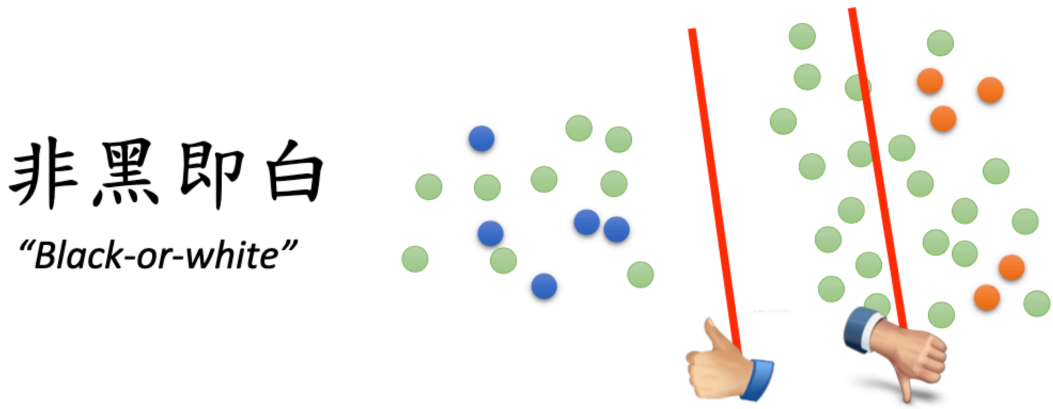
$$logL(\theta) = \sum_{x^r} logP_\theta(x^r, \hat{y}^r) + \sum_{x^u} logP_\theta(x^u)$$

Solved iteratively

$$\boxed{P_\theta(x^u) = P_\theta(x^u|C_1)P(C_1) + P_\theta(x^u|C_2)P(C_2)}$$

(x^u can come from either C_1 and C_2)

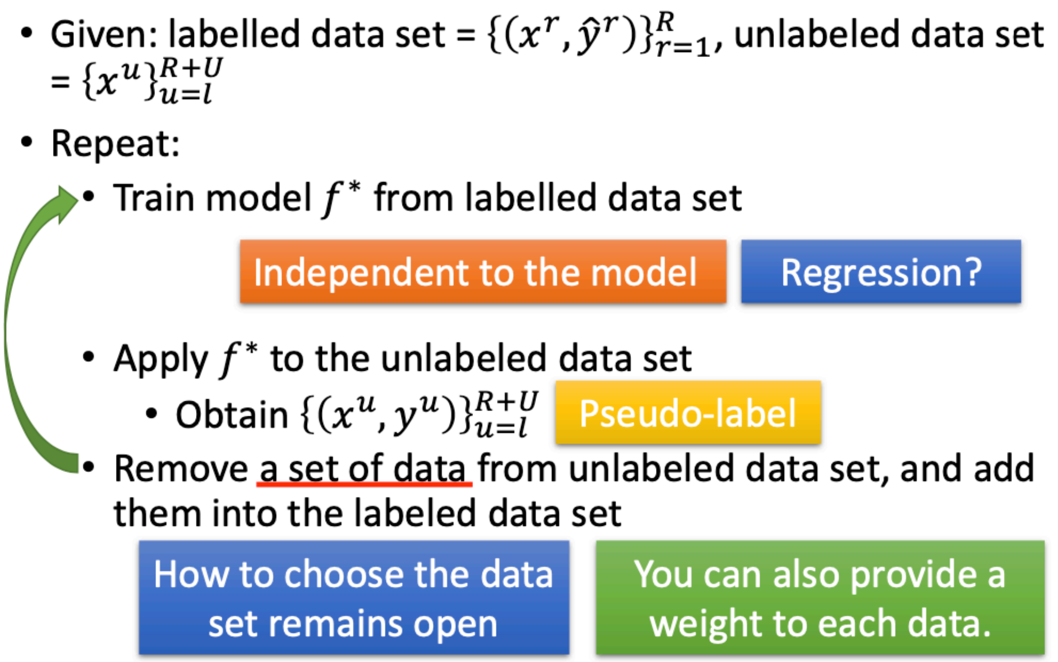
Low-density Separation Assumption



Self-training

有labeled data和unlabeled data，重复以下过程：

- 从labeled data中tarin了模型f^*；
- 将f^*应用到unlabeled data，得到带label的数据，称为Pseudo-label
- 从unlabeled data中移出这部分data，并加入labeled data；要移除哪部分data，要根据具体的限制条件而定
- 有了更多的label data，就可以继续训练我们的模型，返回第一步

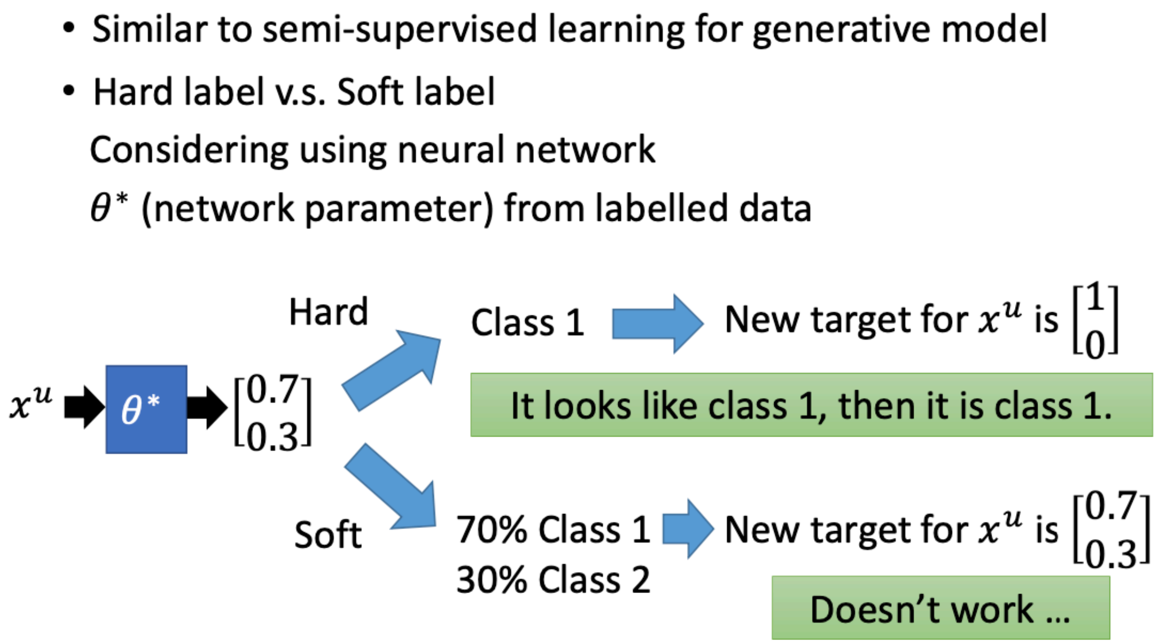


Q：这种训练方式对regression 有用吗？

W：不能，regression输出的是一个真实的值

hard label vs soft label

self-training用的是hard label；generative model用的是soft label



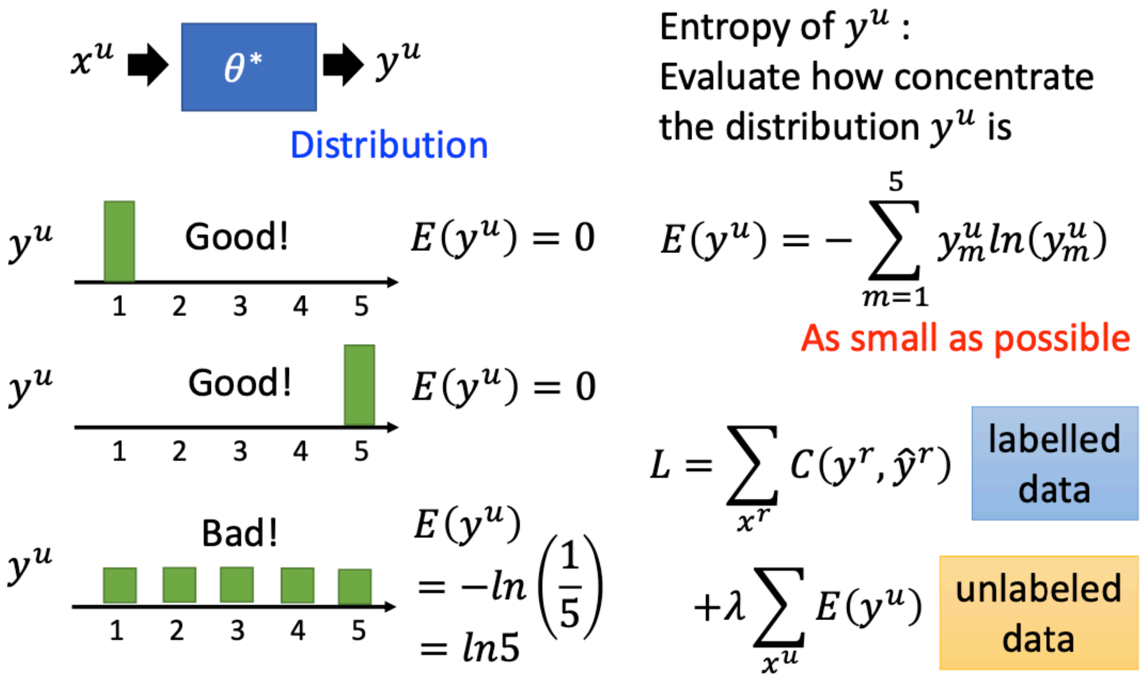
Entropy-based Regularization

如果输出的每个类别的概率是相近的，那么这个模型就比较bad；输出的类别差距很大，比如某个类别的概率为1，其他都是0；我们可以用$E(y^u)$来衡量

$$E(y^u) = -\sum_{m=1}^{5} y_m^u ln(y_m^u)$$

对于第一个和第二个distribution，那么$E(y^u)=0$；

对于第三个distribution，那么$E(y^u)=-ln(\frac{1}{5})=ln5$

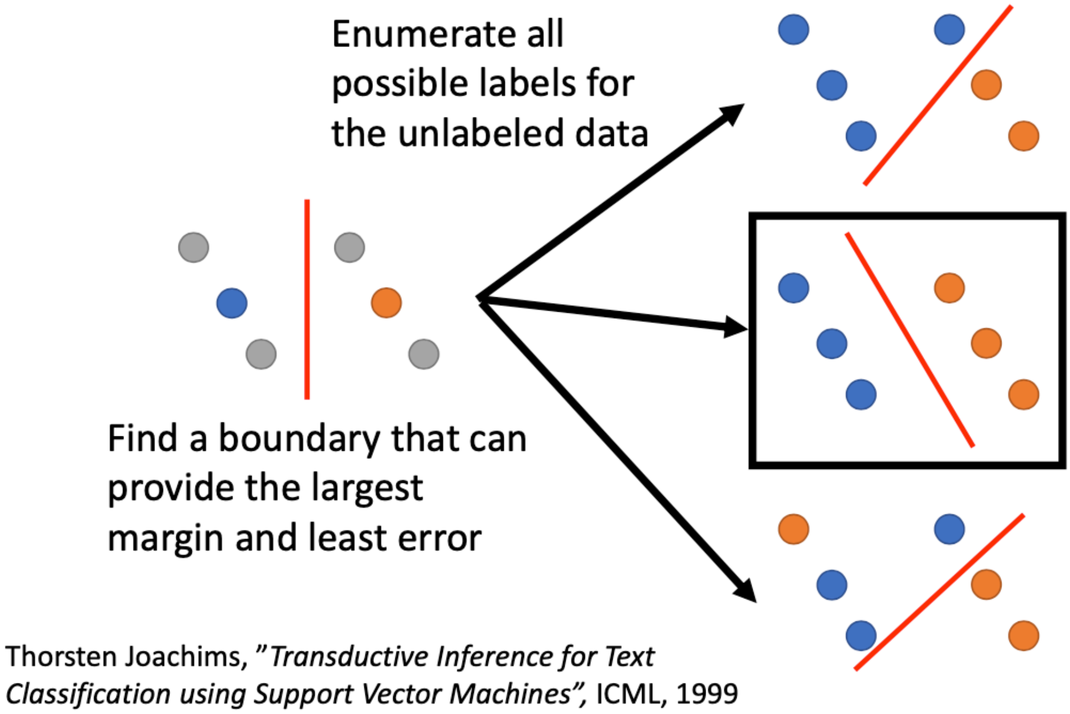


那么我们现在就可以重新设计loss function，用cross entropy来估计$y^r,\hat{y}^r$之间的差距，即$C(y^r,\hat{y}^r)$，使用labeled data，还加上了一个regularization term

$$L=\sum_{x^T}C(y^r,\hat{y}^r)+\lambda\sum_{x^u}E(y^u)$$

Outlook: Semi-supervised SVM

对于unlabeled data，如果是SVM 二分类问题，可以把所有的unlabeled data都穷举为Class1或Class2，列举出所有可能的方案，再找出对应的boundary，计算loss，可以发现下图中黑色方框图具有最小的loss



Smoothness Assumption

Introduction

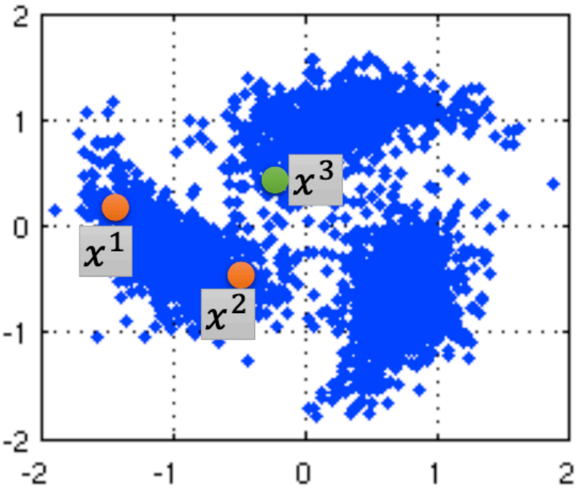
假设：如果x是similar的，那么他们的y也是一样的

这样的假设是非常不精确的，下面我们做出一个更加精确的假设：

- x是分布不均匀的，有的地方很密集，有的地方很稀疏
- x^1, x^2中间有个high density region，那么label y^1, y^2就很可能是一样的；但x^2, x^3中间没有high density region，其label相同的概率就非常小

- Assumption: “similar” x has the same $\hat{y}$
- More precisely:
  - x is not uniform.
  - If x^1 and x^2 are close in a high density region, $\hat{y}^1$ and $\hat{y}^2$ are the same.

connected by a high density path

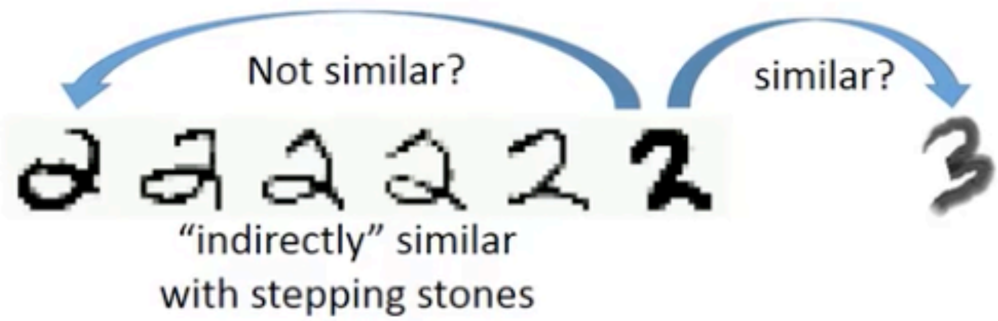


x^1 and x^2 have the same label

x^2 and x^3 have different labels

Source of image: http://hips.seas.harvard.edu/files/pinwheel.png

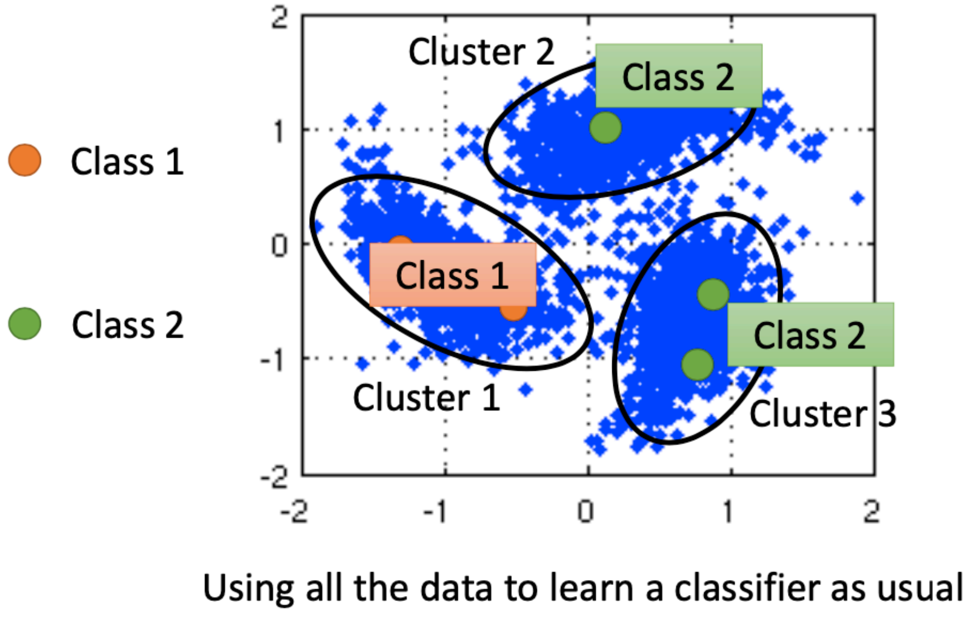
对于下图中的数字，2之间是有过渡形态的，所以这两个图片是similar的；而2与3之间没有过渡形态，因此是不similar的



(The example is from the tutorial slides of Xiaojin Zhu.)

Source of image: http://www.moehui.com/5833.html/5/

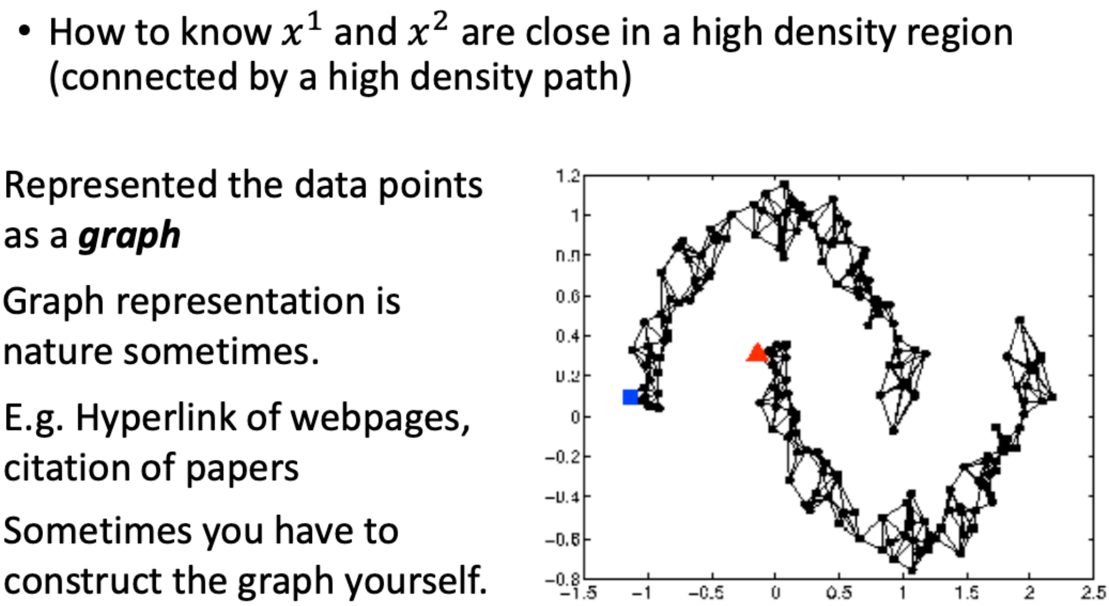
比较直观的做法是先进行cluster，再进行label



Graph-based Approach

那么我们到底要怎么才能知道x^1, x^2到底在high density region是不是close呢？

我们可以把data point用图来表示，图的表示有时是比较nature，有时需要我们自己找出来point之间的联系

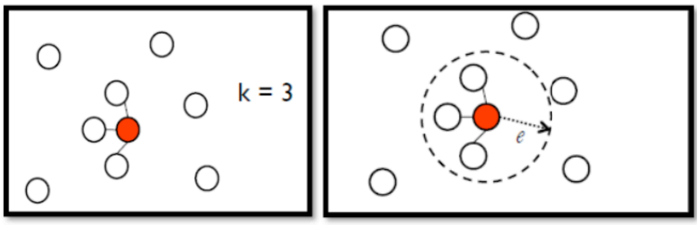


Graph Construction

首先定义不同point之间的相似度$s(x^i, x^j)$，可以通过以下两个算法来添加edge：

- KNN，对于图中红色的圆点，与其最相近的三个（k=3）neighbor相连接
- e-Neighborhood，对于周围的neighbor，只有和他相似度大于1的才会被连接起来

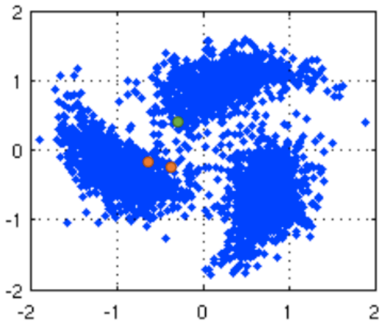
- Define the similarity $s(x^i, x^j)$ between x^i and x^j
- Add edge:
  - K Nearest Neighbor
  - *e*-Neighborhood



- Edge weight is proportional to $s(x^i, x^j)$

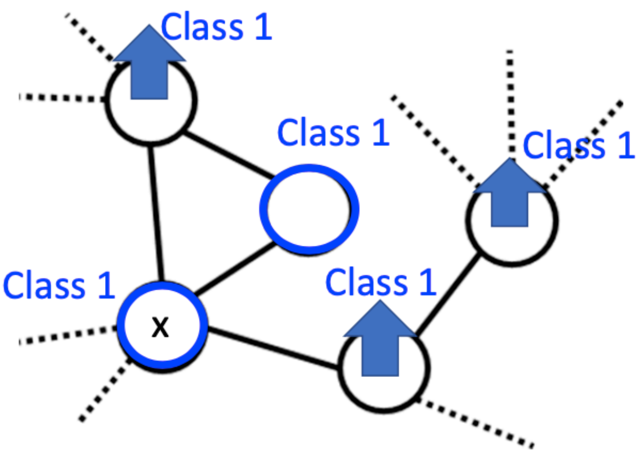
  Gaussian Radial Basis Function:

$$s(x^i, x^j) = exp\left(-\gamma\left\|x^i - x^j\right\|^2\right)$$



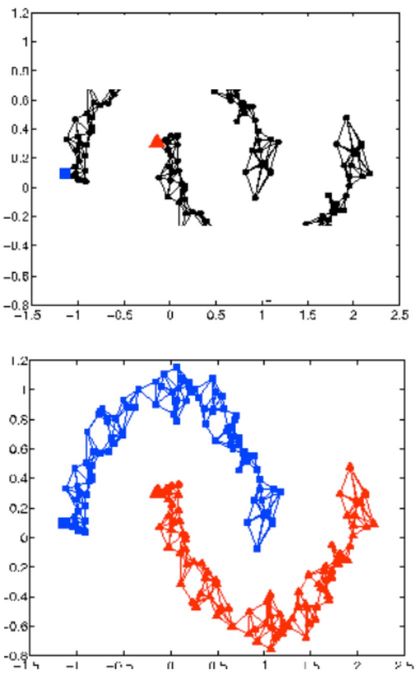
edge并不是只有相连和不相连两种选择而已，也可以给edge一些weight，让这个weight和这两个point之间的相似度成正比

labeled data会影响他的邻居，如果这个point是class1，那么他周围的某些point也可能是class1



The labelled data influence their neighbors.

Propagate through the graph



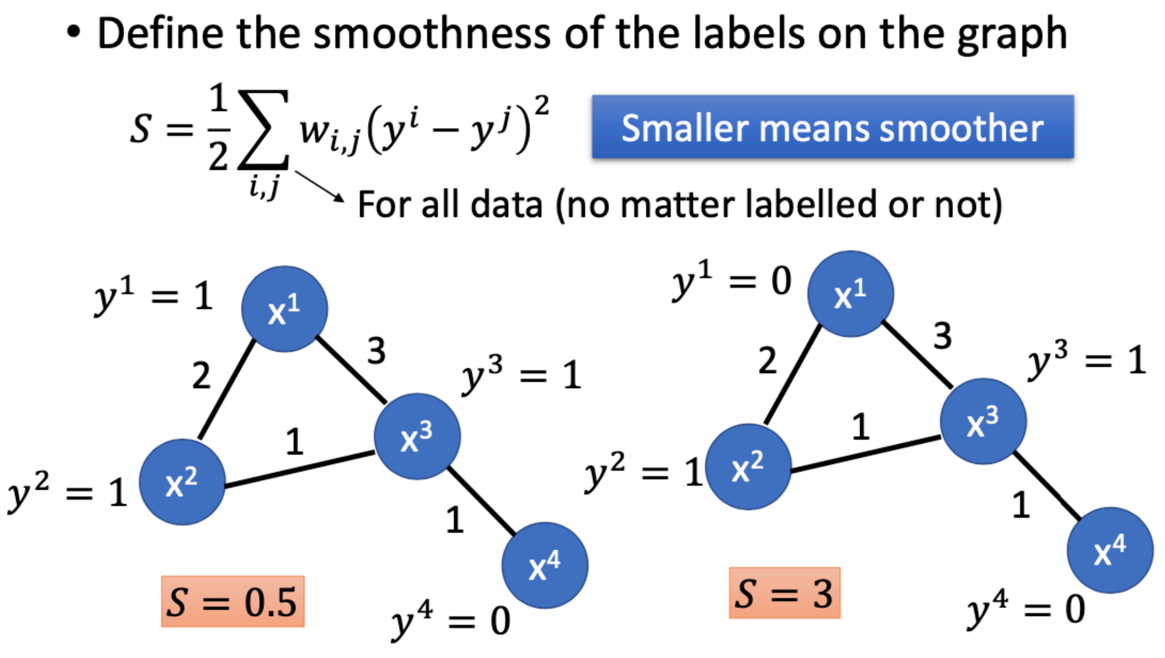
Definition

对于下图中的两幅图，如果从直观上看，我们可以认为左边的图更smooth

现在我们用数字来定量描述，S的定义如下

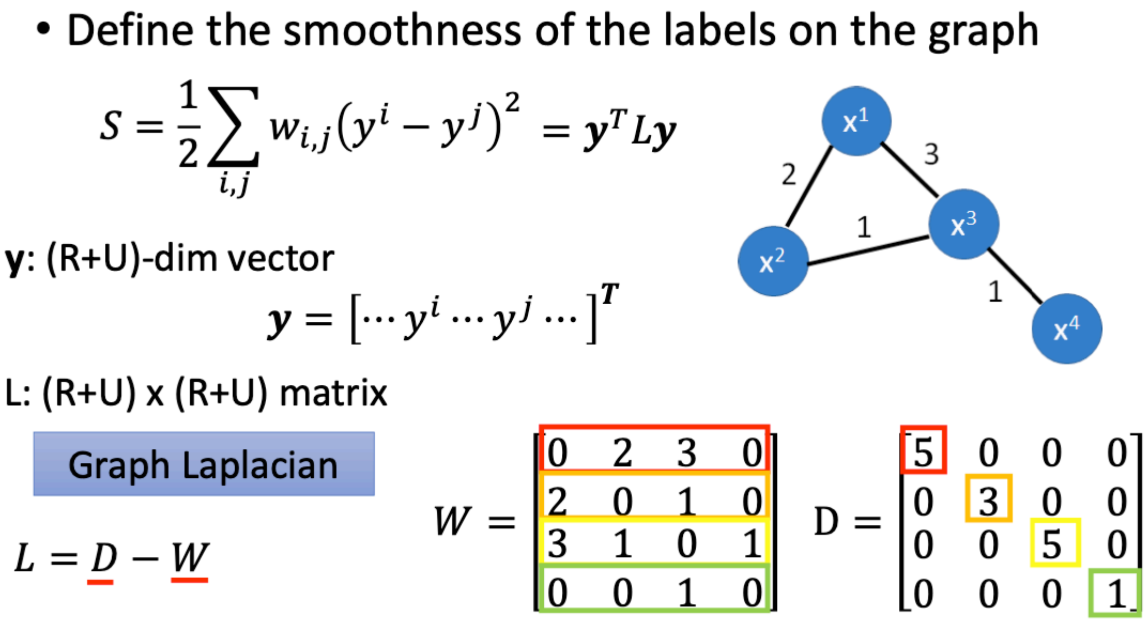
$$S = \frac{1}{2}\sum_{i,j} w_{i,j}(y^i - y^j)^2$$

根据公式我们可以算出左图的S=0.5，右图的S=3，值越小越smooth，越小越好



对原来的S进行改造一下，$S = y^T L y$

其中$L = D - W$，W为权重矩阵，D表示将weight每行的和放到对角线的位置



loss function其中一项就包括cross entropy计算的loss；smoothness的量S，前面再乘上一个可以调整的参数λ，λS就表示一个regularization term

网络的整体目标是使loss function 取得最小值，即cross entropy项和smoothness都必须要达到最小值，和其他的网络一样，计算相应的gradient，做gradient descent即可

如果要计算smoothness不一定非要在output的地方，也可以是其他位置，比如hidden layer拿出来进行一些transform，或者直接拿hidden layer，都可以计算smoothness

- Define the smoothness of the labels on the graph

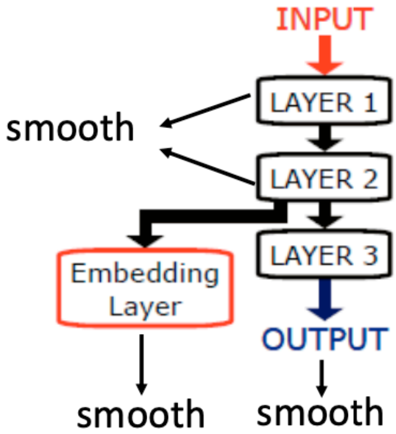
$$S = \frac{1}{2}\sum_{i,j} w_{i,j}\left(y^i - y^j\right)^2 = \boldsymbol{y}^T L \boldsymbol{y}$$

Depending on network parameters

$$L = \sum_{x^r} C(y^r, \hat{y}^r) \boxed{+\lambda S}$$

As a regularization term

J. Weston, F. Ratle, and R. Collobert, "Deep learning via semi-supervised embedding," ICML, 2008



Better Representation

- Find the latent factors behind the observation
- The latent factors (usually simpler) are better representations

observation

Better representation (Latent factor)