**Solve Lack of label : Partial classification by geometric attribute of coreset selection**

GSDS 석사과정 20224314

강현구

1. **Abstract**

Semi-supervised learning은 Labeling Cost 문제를 해결할 수 있는 주요 방안 중 하나이다. 하지만 Label Data가 부족할 경우 Neural network 모델의 성능을 보장할 수 없다. 이는 Semi-supervised learning을 신뢰할 수 없게 만든다. 기존 연구 중 Label data 부족 상황에서 Neural Network모델에 의존하지 않고 해결한 연구가 있으나, 클래스별 비율에 대한 사전 지식을 활용하는 등 비현실적인 면이 있다. 따라서 Dataset에 대한 사전 지식 없이 Label Data 문제를 해결할 필요가 있다.

본 연구에서는 학습과정을 필요로 하지 않는 높은 정확도의 Classification을 통해 unlabeled data를 Pseudo labelling 함으로써 Label Data 부족 문제를 해결한다. 이를 위해 coreset Selection을 활용한 새로운 Classification 방법을 제안한다. Coreset Selection 간 형성한 subgraph들은 기하적 관점에서 Classification이 가능하다. 본 방법은 Small Image 데이터셋에 대해 Label data의 10~40배의 Unlabeled data에 대해 95% 이상의 정확도로 Classification 할 수 있다.

**1. Introduction**

최근Deep learning(이하 DL)모델은 많은 양의 Labeled Data를 기반으로 다양한 분야에서 성과를 내고 있다. 하지만 DL 모델이 학습에 필요로 하는 데이터가 증가함에 따라, Labeling Cost를 어떻게 해결할 것인가 중요한 화두가 되었다. Semi-supervised learning(이하 SSL)은 Labeling Cost를 해결하는 방법 중 하나로, 부족한 Label data와 매우 많은 unlabeled data 시나리오를 가정한다. 본 연구에서는 SSL을 통한 이미지 classification에 중점을 둔다.

SSL은 크게 Consistency regularization 방법과 Pseudo Labeling 으로 나뉜다(Yang, Song, King, & Xu, 2022). Consistency regularization 방법은 모델의 Input에 변형이 가해져도 모델의 결과는 일정하게 유지돼야 함을 가정한다. 변형을 가한 데이터를 생산(augmentation) 함으로써 주어진 Label data와 동일한 Class의 Data를 생성한다. Pseudo labeling은 학습된 모델을 통해 Unlabeled Data에 대해 예측하며 이를 모델 학습에 활용한다.

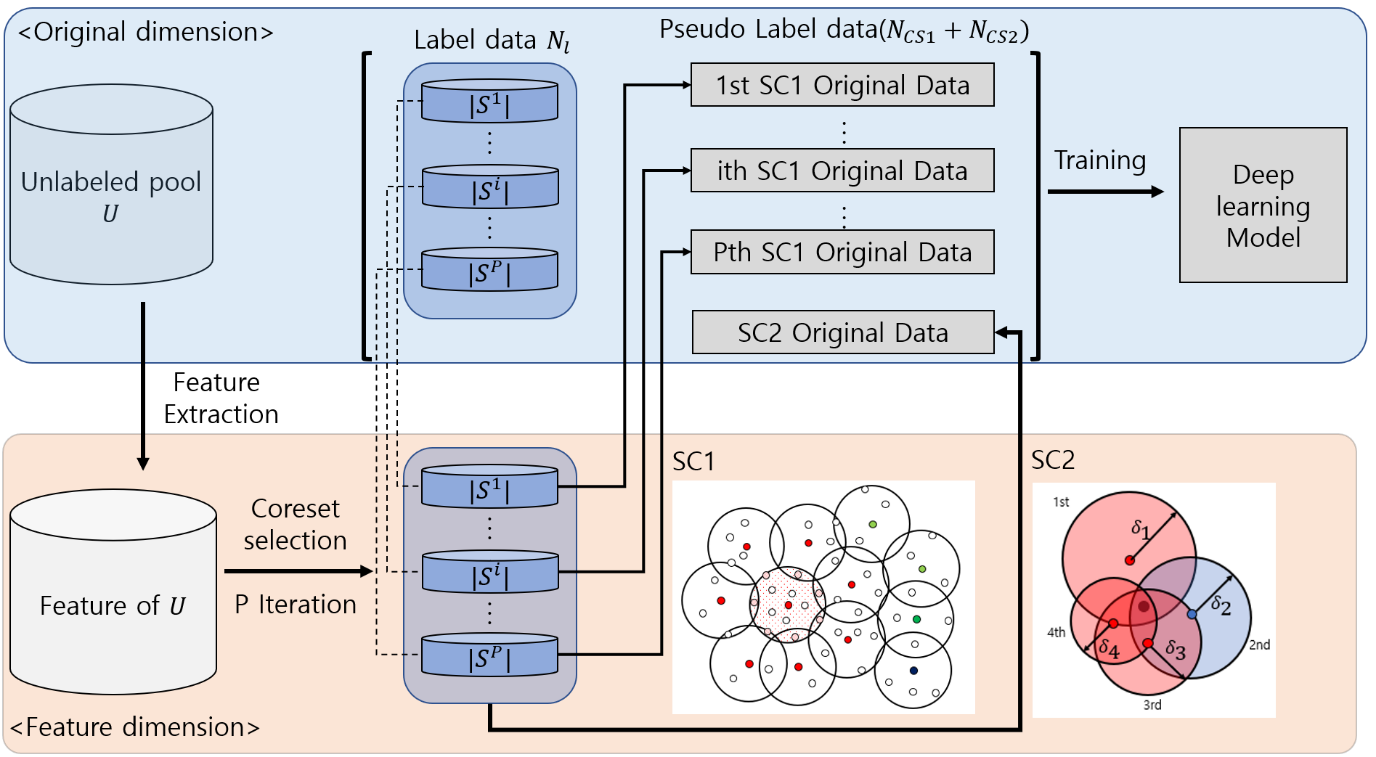
본 paper에서는 pseudo labeling 방법에 초점을 잡는다. 최근 이미지 분류 연구에 있어 Consistency regularization이 높은 성능으로 인해 선호 받는다. 단, 각 방법을 통해 얻을 수 있는 dataset의 diversity의 성격이 달라 둘 다 필요하다. Consistency regularization은 label data를 다양한 방법으로 augmentation 하나, unlabeled 데이터를 직접적으로 활용하는데 제약이 있다. 반면 Pseudo labeling의 경우 Confirmation bias가 있으나 unlabeled data의 정보를 직접적으로 활용할 수 있다. 즉, 서로 상반된 방법이 아닌 병행 가능한 방법이다. Confirmation bias를 잘 해소하여 Consistency regularization 보다 높은 성능을 낸 연구(Arazo, Ortego, Albert, O’Connor, & McGuinness, 2020)를 통해 Pseudo labeling의 잠재력을 엿볼 수 있다.

Pseudo labeling에 있어 confirmation bias를 잘 해소하는 것이 중요하다. Confirmation bias이란 모델을 학습하는 과정에서 unlabeled sample에 대한 잘못된 예측값이 Neural Network모델의 성능악화를 가중시키는 것을 의미한다. 기존의 연구들은 DL 모델의 예측에 대해 신뢰도에 대한 Threshold 설정(Cascante-Bonilla, Tan, Qi, & Ordonez, 2021), Soft labeling 부여 및 또는 초기 수렴을 위한 규제항을 도입한다.(Zhang, Cisse, Dauphin, & Lopez-Paz, 2017) 대부분의 조치들은 Neural Network가 충분한 정확도를 갖출 것을 가정한다. 하지만 Label data가 부족할 경우 Neural Network모델의 정확도는 크게 떨어져 신뢰하기 어렵다. 한 예로 MNIST 데이터 셋에 대해 13 CNN을 적용할 때 100개의 Label data론 30%의 정확도가 나온다. confirmation bias를 방지하기 위한 조치들도 모델 자체의 성능이 보장할 수 없을 땐 의미가 없다. 한 연구에선 데이터셋이 class-balance dataset일 것임을 가정함으로써 클래스별 사전 비율을 규제항으로 활용하여 성공적으로 confirmation bias를 방지한다(Arazo et al., 2020). 하지만 실제 현장에선 Dataset이 Class-balance 할 것, 또는 클래스 분포에 대한 사전 지식을 알 것이라 기대하긴 어렵다. 따라서 보다 현실적인 방안이 필요하다.

본 연구에선Active learning의 일환인 Coreset-selection 방법을 통해 label data를 통한 학습과정이 필요하지 않는 classification 방법을 제안한다. Active learning은 모델을 학습함에 있어 유용한 Data를 Sampling 하는 방법이다. Coreset selection은 Sampling 간 Data들의 거리 정보를 활용하여 Neural Network 기반 모델에 의존하지 않는다. 더 나아가 Coreset selection을 통해 각 Sampling 한 data들은 기하적 관점에서 Unlabeled Data에 대해 대표성을 띄고 있음을 보일 것이다. 더 나아가 기하적 관계를 토대로 높은 신뢰도의 Classification을 진행할 것이다. 이때 active learning이 고차원 데이터에 대해 적용이 어렵다는 점과subgraph 간의 기하적 관계를 단순하기 만들기 위해 unsupervised dimension reduction 방법을 적용할 것이다. 본 연구에서는 이미지 데이터의 구조 정보까지 반영할 수 있도록 Convolution autoencoder(이하 CAE)을 적용한다. 전체 과정은 Figure1과 같다. 먼저 각 이미지 데이터에 대해 CAE로 feature extraction을 한다. 해당 feature을 통해 Coreset selection을 진행하며, 각각의 Sampling point을 중점으로 삼는 subgraph간의 기하적 관계를 통해 classification을 할 것이다. 이후 Coreset selection 및 Classification 한 데이터를 통해 DL 모델을 학습시킬 것이다. 즉, 높은 정확도로 unlabeled data에 대한 Classification을 통해 학습에 활용할 label data를 늘려 Label data 부족 문제를 해결한다.

**2. Related works**

2-1). Pseudo labeling

Pseudo labeling은 Unlabeled Data에 대한 예측을 모델 학습에 활용한다. 초기에는 confirmation bias를 해결하지 못해 pseudo labeling을 모델의 fine tuning에 한정했다(Lee, 2013). 이후 confirmation bias를 해결하기 위해 uncertainty weight를 부여(Shi, Gong, Ding, Tao, & Zheng, 2018), Soft labeling 등의 다양한 조치를 취해왔다. 각각의 조치들은 학습을 필요로 하는 Neural Network based model에 의존한다는 한계가 있다. Label data가 부족할 경우 모델의 성과를 신뢰할 

[Figure 1. 전체 과정]

수 없다. 기존의 방안들은 모델이 충분히 학습되어 성능이 보장될 때 의미가 있다.

모델에 의존하지 않고도 confirmation bias를 해소할 수 있는 방안이 있다. Arazo의 연구에선 Soft labeling 외에도 Mix-up data augmentation & minimum batch, Dataset의 Class 별 비율 정보를 활용하여 Confirmation bias를 효과적으로 방지하였다(Arazo et al., 2020). 해당 연구는 CIFAR 10/100, SHVN 데이터셋에 대해 Consistency regularization 보다 높은 성능을 냈다. 단, Arazo의 연구에서도 한계가 있다. 해당 연구에선 Class-balance scenario를 가정함으로써 데이터셋의 클래스 비율정보를 규제항으로 적용한다. 즉, Dataset의 클래스 비율에 대한 사전 지식을 얻을 수 없을 경우 적용할 수 없다는 한계가 있다.

2-2) Active learning

Active learning(Tong, 2001)(이하 AL) 또한 Labeling cost를 줄일 수 있는 방법이다. AL은 성능은 유지하면서 가능한 한 Labeling cost를 줄이기 위해 unlabeled dataset에서부터 가장 유용한 data를 sampling한다. AL의 유형은 크게 3가지가 있다(Ren et al., 2021). 본 연구에서는 주어진 Dataset에서 중요한 데이터를 선별하는 Pool-based sampling에 초점을 둔다. Pool-based sampling AL은 Acquisition strategy에 따라 Data를 선별한다. Acquisition strategy는 Uncertainty-based, Expected-based and Diversity-based approach로 나눠 볼 수 있다(Ren et al., 2021). 이 중 Uncertainty-based approach는 대부분 neural network Model에 의거하여 각 Data별 Uncertainty를 측정한다(Gal, Islam, & Ghahramani, 2017; K. Wang, Zhang, Li, Zhang, & Lin, 2016). Expected-based approach 또한 모델 성능을 가장 향상시킬 것으로 기대되는 Data들을 선별하며(Sener & Savarese, 2017), Neural network 모델에 의존한다. 마지막으로 Diversity-based approach는 데이터셋의 Diversity를 보장할 수 있는 데이터를 선별하는 방법이다. 대표적으론 Coreset selection이 있다(Sener & Savarese, 2017). Coreset Selection은 모든 data들을 덮는 최소 반지름을 가진 subgraph들을 뽑는 것이 결국 모델 학습에 가장 유용함을 보였다. 대부분의 AL은 Neural Network model의 성능에 의존하나, Coreset selection은 데이터 간의 거리 정보에만 의존한다. 본 연구에서는 Coreset selection 간 형성되는 subgraph을 활용할 것이다.

AL은 고차원 데이터에는 적용하기 어렵다는 한계가 있으며, 고차원 데이터로부터 저차원의 feature을 산출할 능력이 없다(Tong, 2001). 해당 제한점을 해소하고자 DL을 통한 저차원의 feature extraction을 적용한 연구들이 존재한다. DL 모델은 고차원 데이터에 쉽게 적용할 수 있으며 데이터의 사람의 개입없이 feature engineering 할 수 있다. DBL의 경우 Autoencoder로 고차원의 이미지 데이터를 저차원의 feature을 도출한 후, 각각의 data에 대한 representation과 uncertainty을 측정하여 sampling 한다(Liu, Zhang, & Eom, 2016). CEAL의 경우 CNN의 모델의 신뢰도가 낮은 unlabeled data에 대해 active learning을 하며, 신뢰도가 일정 이상일 경우에만 pseudo labeling 한다(K. Wang et al., 2016). BCNN의 경우 Bayesian Network을 활용하여 uncertainty을 계산하고 이를 acquisition strategy로 활용한다(Gal et al., 2017). 하지만 위의 연구들 또한 Labeled data가 적은 경우 neural network Model의 성능을 신뢰할 수 없게 된다. 학습이 충분히 되지 않은 neural network 모델에 의거한 acquisition strategy는 신뢰할 수 없다.

반면 unsupervised Deep learning 방법을 통해 고차원의 데이터의 feature을 extraction 한 다음 AL을 적용한 연구들이 있다. 주로 고차원의 이미지 데이터를 Auto encoder을 통해서 저차원의 feature을 extraction 한다(Liu et al., 2016; Sun, Li, Wang, Plaza, & Chen, 2016). VAAL은 Variational auto encoder을 통해서 Latent space에서 Diversity를 중점으로 data을 sampling 한다(Sinha, Ebrahimi, & Darrell, 2019). 해당 방법은 unsupervised learning으로 Label data가 부족한 경우에도 본래의 성능을 낼 수 있다. 따라서 본 연구에서도 고차원의 Image Data을 적용하기 위해 Unsupervised learning을 통한 feature extraction을 적용하겠다.

**3. Method**

**3.1) Model structure**

Notation은 Arazo의 연구를 참고한다(Arazo et al., 2020). 총 N개의 Dataset D에 대해 unlabeled set 과 labeled set s.t. 으로 표현한다. 본 연구에서 제시하는 2가지 classification 방법은 각각 편의상 CS(Coreset Selection based classification)1, CS2라고 부르겠다. CS1은 Coreset selection간 접하고 있는 subgraph 간의 기하적 관계를 활용하여 Hard label 형태의 Classification을 한다. CS2는 Coreset selection을 다회차 iteration 할 때, 각 데이터 별 subgraph의 중첩 정도에 따라 클래스별 확률 벡터 계산한다. 구체적인 방법은 뒤에서 구체적으로 서술하겠다.

Confirmation bias를 방지하기 위해 Mix-up data augmentation과 setting a minimum number of labeled samples per mini-batch를 적용한다. Mix-up data augmentation은 data augmentation과 label smoothing을 결합한 강력한 규제 방법이다(Zhang et al., 2017). Mix-up data augmentation은 setting a minimum number of labeled samples for mini-batch k를 적용할 때 Confirmation bias가 효과적으로 예방된다(Arazo et al., 2020). CNN 모델 학습 간 Label data 및 CS1, CS2로 Labeling 한 데이터 간 Epoch 및 Batch size에 차이를 두겠다.

**3-2) Coreset selection**

Coreset Selection은 기대되는 모델 성능을 최대화하는 Data를 Sampling 한다. 이는 주어진 Sampling size 개로 전체 데이터를 덮을 수 있는 subgraph들을 구성할 때, 최소한의 반지름 를 가지게 만드는 데이터를 Sampling 하는 것과 동일하다(Sener & Savarese, 2017). 각 Sampling Data들은 Dataset의 밀집 정도에 무관하게 넓게 퍼져 있다. 이로 인해 Sampling point 는 특정 클래스만을 포함하는 것이 아닌 전반적인 데이터 셋을 반영한다. 또한 Data 간의 거리를 기반으로 Sampling 한다. 따라서 Label Data가 부족한 상황에서도 동일한 Sampling 성능을 낼 수 있다.

AL은 이미지, Text 등의 고차원 데이터로 확장하는데 어려움을 겪는다(Tong, 2001). 이로 인해 대부분의 AL에 대한 연구들은 저차원의 문제에 집중하거나, 사전에 추출한 고차원의 데이터의 feature을 활용한다. 이때 후자의 경우 AL은 데이터의 feature을 추출하는 능력이 없어 추가적인 방안을 적용할 필요가 있다. 이에 고차원의 데이터를 가공하며 사람의 개입없이 feature extraction 할 수 있는 능력을 갖춘 Deep learning과 AL을 함께 사용함으로써 시너지를 향상시킬 수 있다(Ren et al., 2021).

**3-3) Dimension reduction**

고차원 이미지 데이터에 대해 Coreset을 적용하기 위해선 feature extraction을 통한 dimension reduction이 필요하다. CS1 방법은 subgraph 간의 adjacency를 활용한다는 점에서 2차원, 또는 3차원까지의 차원 축소를 필요로 한다. CS1은 접하고 있는 subgraph들의 중점 class가 모두 동일할 때 적용할 수 있다. 자세한 과정은 뒤에 서술하겠다. 정확도와 CS1 방법을 적용할 수 있는 unlabeled data의 개수 는 Trade-off 관계를 띈다. 접하고 있는 subgraph의 수가 많을수록 조건이 강화되어 정밀도가 올라간다. 반면 조건이 강화됨에 따라 가 줄어든다. 데이터의 차원은 접하는 Subgraph의 수를 조절한다. 2차원의 경우 각 subgraph 마다 접할 수 있는 subgraph의 수는 기껏해야 7~8개이나, 3차원의 경우 20~30개로 증가한다. 차원이 증가할수록 접하는 subgraph의 수는 기하급수적으로 증가한다. 784 차원의 MNIST 데이터를 10차원으로 줄여도 여전히 차원이 높다. 본 연구에서는 Feature의 차원을 2차원까지 줄인다.

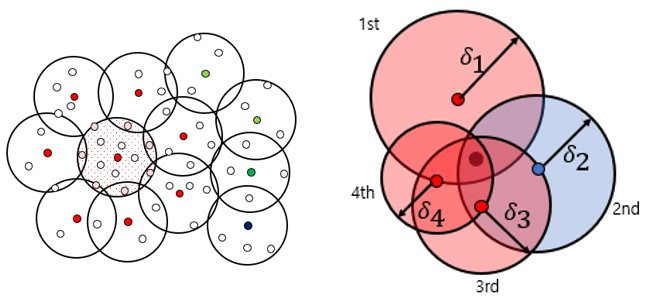
본 연구에서는 차원 축소를 위해 Convolution autoencoder(이하 CAE)을 활용한다. 본 연구에서는 CAE을 통해 축소했을 때 각 클래스별 정보를 잘 보존하여 클래스별로 Clustering 될 것이라 가정한다. Auto encoder는 Dimension reduction의 역할을 뿐만 아니라 반복되는 구조를 포착할 수 있다(Y. Wang, Yao, & Zhao, 2016). 또한 Unsupervised dimension reduction 방법들을 활용하여 k-nearest neighbor 방식으로 classification을 하였을 때, CAE은 85% 가량의 정확도로 가장 정확한 방법 중 하나였다(Hurtik, Molek, & Perfilieva, 2020). 이로 보아 CAE를 통해 dimension reduction을 하였을 때 유사한 클래스의 데이터들을 clustering 하는 효과가 있다고 유추할 수 있다.

**3-4) Coreset selection based classification (CS1 & CS2)**

주어진 dataset을 CAE을 활용하여 2차원의 feature을 extraction한다. 이후 feature 간의 distance를 기반으로 Coreset selection을 진행한다. 이때 유클리안 distance를 적용한다. 개의 Labeled data들은 Coreset selection을 통해 sampling한 결과다. 총 p번의 Coreset selection을 했을 때, 를 p번째 iteration 간 Sampling 한 data set이라고 하며, 을 각 Sampling point 라고 하자. 이때 을 성립한다. 각 을 중점으로 삼는 subgraph 의 반지름을 라고 하자. Coreset selection은 K-centers algorithm과 동일하여 subgraph 의 반지름 을 최소화시키는 unlabeled data 를 로 Sampling한다. 이로써 는 을 만족한다. 각 subgraph의 밀도는 해당 subgraph에 포함된 Data 의 개수로 측정할 수 있다.

CS1 방법은 subgraph 간의 기하적 관계를 통해 Classification 한다. 편의 상 표기를 로 단순화하겠다. 확률 밀도가 높은 지역의 데이터 x1, x2가 가깝다면 각각의 연관된 Label y1, y2도 가깝다는 SSL의 가정을 통해(Chapelle, Scholkopf, & Zien, 2009), 밀도가 높은 subgraph 에 속한 Data s.t. j ∈ {1,…, | }들은 높은 확률로 중점인 와 클래스가 동일할 것을 가정할 수 있다. 이로써 은 subgraph에 속한 unlabel Data 를 대표할 수 있다. 더 나아가 Active selection을 통해 형성한 subgraph들이 Dataset을 촘촘하게 덮을 수 있을 정도로 충분히 작은 반지름 을 가졌다고 가정한다. s.t. k ∈ {1,…, | } 를 와 접하고 있는 subgraph라고 하자. 각 subgraph의 중점 , 들의 클래스는 알고 있다. 이때 기하적 관점에서 의 Class가 다를 경우 와 가 서로 다른 클래스들의 경계 지역에 있다고 유추해볼 수 있다. 반대로 모든 와 의 클래스가 동일할 때 특정 클래스의 중심부에 위치할 것이다. 즉, 이며, density of subgraph 을 성립할 때, subgraph 에 속한 unlabeled Data 은 와 동일한 Class로 Classification을 할 수 있다. 는 subgraph 밀도에 대한 hyperparameter이다. 또한 소수의 subgraph가 겹쳤을 때 특정 클래스의 중심부가 아님에도 우연에 의해 다른 class를 가져 잘못 Classification 하는 경우를 방지할 필요가 있다. 이에 접하는 subgraph의 개수 또한 하이퍼 파라미터 M 이상 일 것을 제한 조건으로 추가한다.

Coreset selection을 다회차 진행하여 subgraph들이 중첩되었을 때 CS2을 적용할 수 있다. 1번의 Coreset selection 간 모든 unlabel data 들은 1개 이상의 subgraph에 포함된다. Coreset selection이 총 P번 진행된다면 모든 들은 최소 P개의 subgraph안에 속하게 된다. 은 특정 Class의 중점을 가진 subgraph에 많이 속할수록 동일한 클래스일 확률이 높을 것이다. 또한 각 subgraph들의 반지름 에 반비례하여 확률이 높을 것이다. 각 클래스 별로 subgraph에 속하는

[Figure 2. SC1(좌), SC2(우) 방법 개념도]

횟수 와, 반지름을 기반으로 softmax를 통해 확률화한다. 또한 반지름의 크기가 매우 커 각각의 확률값이 낮게 나오는 것을 방지하고자 p 회차 중 가장 작은 반지름 대비 각 의 길이를 활용한다. 또한 최근의 Coreset selection에 비중을 주기 위해 i번째 Iteration에 대해 의 비중을 추가하겠다. 가장 확률이 높은 값이 Threshold 보다 큰 경우에 한해 Hard label을 부여한다.

(3.1)

4. 연구 환경

4-1) Dataset and training

MNIST, Fashion-MNIST, EMNIST-letter, CIFAR10/100 총 5개의 데이터셋으로 CS1, CS2의 성능을 검증하겠다. 각각의 데이터셋은 EMNIST-letter 과CIFAR 100 제외하곤 모두 10개의 클래스를 가진다. EMNIST-letter과 CIFAR 100은 각각 26, 100개의 클래스를 가진다. MNIST, Fashion-MNIST은 총 60K의 Training Image와 10K의 Test Image로 이뤄져 있다. EMNIST-letter은 각각 124.8K 개와 20.8K로 이뤄져 있다. 모두 흑백 이미지이며 해상도는 28x28이다. CIFAR10/100 각각 50K,50K개의 Training Image와 10K, 10K개의 Test 데이터로 이뤄져 있다. 모두 컬러 이미지이며 해상도는 32x32이다. 공통적으로 에 대해 한번에 Sampling 한 경우와, 100개씩 10번 Sampling 한 경우를 적용한다. 각각의 Dataset은 CAE의 성능에 따라 결과가 일부 달라질 수 있어, 세부적인 의 경우의 수는 MNIST에 한정하여 확인하겠다. CAE 모델은 잘 알려진 13-CNN모델 구조를 활용하며, Decoder 부분은 역순으로 구성하였다. 추후 학습할 DL 모델은 13 CNN을 적용한다.

각 데이터셋 별로 동일한 하이퍼 파라미터를 적용했다. Convolution autoencoder의 경우 각 데이터셋의 Train dataset대상으로 learning rate로 0.001를, optimizer로는 Adam을 적용하여 100 epoch 간 학습하였다. 이후 13-CNN 모델을 학습함에 있어 label dataset과 CS1, CS2로 labeling 한 dataset을 따로 학습하였다. 13-CNN 모델 학습 간에는 CAE을 학습할 때와 동일한 Hyperparameter를 적용했다. {Arazo, 2020 #9}의 연구 내용에 따라 mixup data augmentation의 hyperparameter alpha의 값은 4로 설정하였다. 또한 Label dataset의 train batch size는 8, SC1과 SC2의 train batch\_size는 각각 100으로 설정하였다. 또한 각각에 대해 warm training을 위해 label data는 10 epoch를 학습한 후, 각각의 SC1, SC2 label data를 통해서 5 epoch 학습을 진행하였다.

4-2) Performance of CS1 & CS2

각 데이터셋에 대한 CS1 과 CS2의 성능은 Table 1과 같다. CS1에서 density 및 접하는 subgraph 제한 조건은 없으며, CS2의 Threshold 는 0.5로 설정하였다.

|  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| Dataset | (||, P) | CS1 Only ( | | SC2 Only ( | |
| MNIST  (1 x 28 x 28) | 1000 (1000, 1) | 11992(x12) | 99.59(%) | X | X |
| 1000 (100, 10) | 15305(x15) | 99.97(%) | 14237(x14) | 94.19(%) |
| FashionMNIST  (1 x 28 x 28) | 1000 (1000, 1) | 4217(x4) | 96.84(%) | X | X |
| 1000 (100, 10) | 6492(x6) | 95.56(%) | 5641(x5) | 90.48(%) |
| EMNIST-Letter  (1 x 28 x 28) | 1000 (1000, 1) | 4697(x4) | 93.52(%) | X | X |
| 1000 (100, 10) | 7732(x7) | 95.16(%) | 0 | 0(%) |
| CIFAR10  (3 x 32 x 32) | 1000 (1000, 1) | 15(x0.01) | 66.67(%) | X | X |
| 1000 (100, 10) | 46(x0.05) | 73.91(%) | 2250(x2) | 20.56(%) |
| CIFAR100  (3 x 32 x 32) | 1000 (1000, 1) | 9(x0.01) | 33.33(%) | X | X |
| 1000 (100, 10) | 51(x0.05) | 76.46(%) | 0 | 0(%) |

[Table1 각 데이터셋 별 CS1, CS2 결과]

CS1은 저해상도의 데이터셋인 MNIST, Fashion EMNIST에서 95% 이상의 정확도를 가진다. 반면 CS2의 경우 MNIST, Fashion MNIST 데이터셋 외에서는 성능이 좋지 않다. 이때 Threshold 를 어떻게 설정하는 가에 따라 SC2 방법의 정확도와 가 변한다. 자세한 내용은 4-3)에서 다루겠다. 하지만 높은 해상도 데이터셋인 Cifar 10 / 100 에서는 성능이 크게 악화되는 것을 확인할 수 있다. 이는 고해상도의 이미지의 경우 CAE model의 성능에 한계로 인해 dimension reduction 간 Class 정보를 잃은 것으로 여겨진다. 즉, 해상도가 낮은 MNIST, Fashion-MNIST, EMNIST-Digit의 경우 13-CNN 기반의 CAE을 통해 2차원의 Feature을 뽑아도 Class 정보를 담고 있었으나, 해상도가 높은 CIFAR 10, CIFAR 100에 대해선 그렇지 않았다는 것이다. 해당 부분에 대해서는 ResNet 18 또는 또다른 dimension reduction 및 Clustering 적용에 대해 검토할 필요가 있다.

추후 충분한 CAE의 성능을 확보했다 가정할 때, 다양한 Sampling size 과 Sampling 및 Iteration의 관계를 확인하겠다. 현재 MNIST Dataset에서 CS1, CS2의 성능이 좋게 나오는 점으로 보아 가정을 충족하는 것으로 고려한다. 이때 CS2의 Threshold 는 0.5로 설정하였다.

|  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| (||, P) | CS1 Only ( | | SC2 Only ( | | Both ( | |
| 50 (50,1) | 738(x14) | 99.04(%) | X | X | X | X |
| 100 (100, 1) | 3886(x38) | 99.84(%) | X | X | X | X |
| 250 (250, 1) | 4024(x16) | 98.03(%) | X | X | X | X |
| 500 (500, 1) | 9354(x18) | 99.66(%) | X | X | X | X |
| 750 (750, 1) | 10430(x14) | 99.75(%) | X | X | X | X |
| 1000 (1000, 1) | 11992(x12) | 99.59(%) | X | X | X | X |
| 100 (10, 10) | 4505(x45) | 100(%) | 4268(x42) | 99.5(%) | 4971(+466) | 99.02(%) |
| 250 (25, 10) | 8874(x35) | 99.92(%) | 8244(x33) | 99.68(%) | 9961(+1087) | 99.56(%) |
| 500 (50, 10) | 11486(x22) | 99.85(%) | 10672(x21) | 98.2(%) | 12200(+714) | 98.97(%) |
| 750 (75, 10) | 13012(x17) | 99.84(%) | 13810(x18) | 99.17(%) | 13012(+260) | 99.84(%) |
| 1000 (100, 10) | 15305(x15) | 99.78(%) | 14237(x14) | 94.19(%) | 15305(+252) | 99.47(%) |

[Table 2. MNIST 에서의 CS1, CS2 결과]

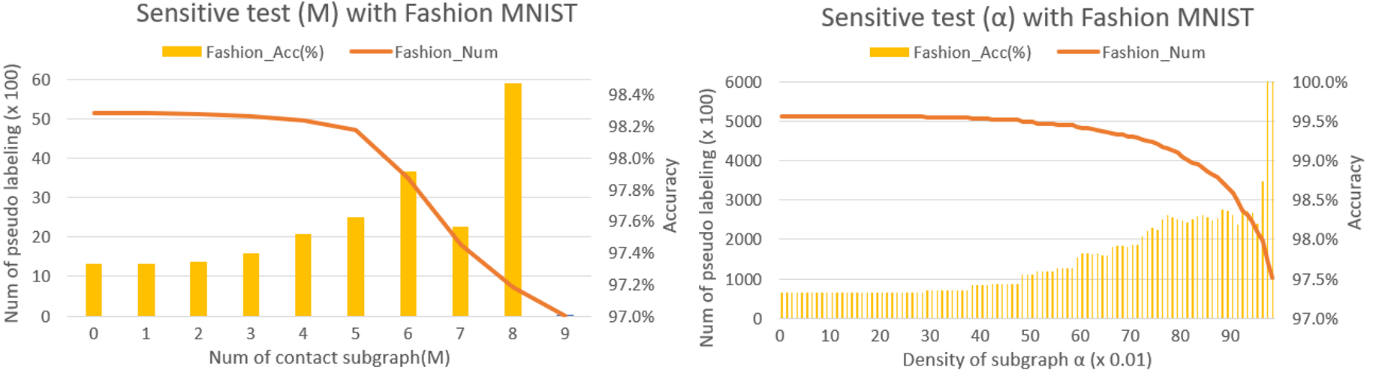
Cs1, CS2의 성능은 서로 유사하다. 대부분의 경우 정확도가 99%에 달하는 것을 확인할 수 있다. 정확도에 있어서 의 크기 및 Iteration 유무는 큰 영향을 미치지 않는다. CS1, CS2 방법 둘 다 주어진 Sampling size 보다 10~40배의 unlabeled train data에 대해 Classification이 가능하다. CS1을 적용한 후, 추가적으로 CS2을 unlabeled data에 적용하여 추가적으로 classification이 가능하다. 이때 를 키움에 따라 추가적인 의 크기가 줄어든다. 이로 보아 CS1, CS2는 유사한 조건의 unlabeled data에 대해서 classification을 하나, 일부 영역이 다름을 알 수 있다. 단, 가 커짐에 따라 두 방법 간의 classification의 차이는 줄어드는 것을 확인할 수 있다. 또한 가 증가함에 따라서, CS2 방법의 효율이 점차 줄어드는 것을 확인할 수 있다. 이는 경계부 또는 서로 다른 class 데이터들이 중첩된 곳에 대해서 Sampling size를 늘린다고 해도 classification이 불가능하기 때문으로 판단된다.

를 P 번의 Iteration에 나눠 Sampling 할 때 가 늘어난다. 이는 Coreset selection 과정을 통해 설명할 수 있다. Coreset selection 관점에서 100개의 Data을 Sampling 하는 것과 이를 10번으로 나눠 10개씩 Sampling하는 것 사이에는 차이점이 없다. Coreset selection 간 각 순간에 대해 SC1을 적용하는 횟수만 다를 뿐이다. 즉, P번의 Iteration은 총 개의 Coreset selection 간 P번 subgraph의 관계를 Snapshot 한 것이다. 또한 Iteration 횟수가 충분히 있을 때 SC2 방법 또한 적용할 수 있다. 이로써 Iteration 횟수를 늘릴수록 보다 많은 data를 Classification할 수 있다.

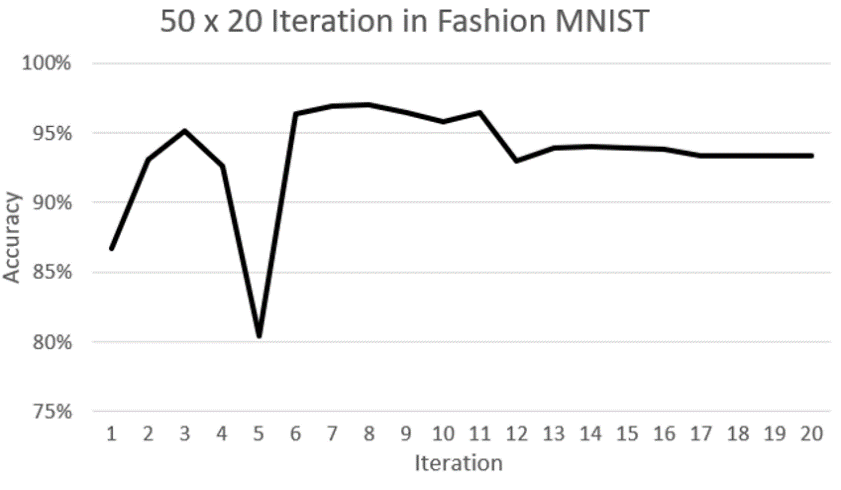
하지만 각 Iteration 마다 sampling size를 일정 이상 낮춰선 안된다. 클래스간 경계부에 있음에도 우연에 의해 접하는 subgraph의 Class가 모두 동일한 경우가 존재한다. 이때 CS1와 CS2의 정확도는 대폭 악화된다. 이를 방지하기 위해선 Sampling size를 키워 가능한 접하는 subgraph의 수가 많도록 한다. 또한 Sampling size가 클수록 Radius 의 값이 작아져 subgraph 안에는 동일한 Class만 속할 확률이 늘어난다. 단 고정된 에 대해서 각 회차별 Sampling size 는 Iteration 과 Trade off 관계로 적절히 조절할 필요가 있다. 그 외로 접하는 subgraph의 수 M에 대해 제한을 두거나, subgraph의 density 을 제한하여 방지할 수 있는지 점검하겠다.

4-3) Sensitivity test about hyperparameter

SC1에서의 접하는 subgraph의 수, Subgraph 밀도 , 그리고 SC2에서의 Threshold 에 대한 sensitivity test를 진행한다. = 1000인 상황에서의 각 hyper parameter의 값에 따른 정확도와 Classification 가능한 수는 다음과 같다. 성능의 변화차를 가시화하기 위해 MNIST 보다 정확도가 낮은 Fashion MNIST 데이터셋에 대해서 점검하였다.

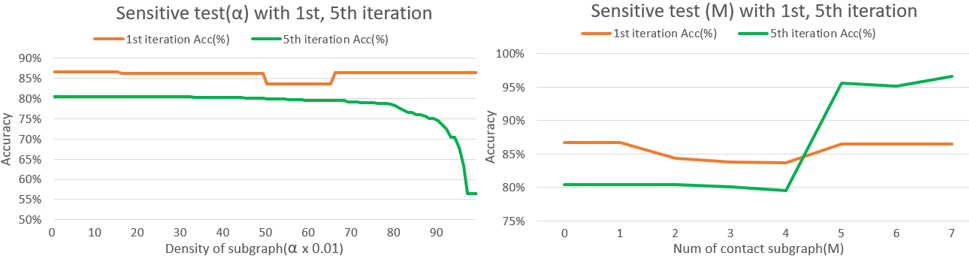


[Figure 3. = 1000, = 1 상황에서의 SC1 Sensitive test]

 추가적인 제한 조건 없이 Fashion MNIST 데이터셋에서 = 1000, = 1 으로 SC1 을 적용했을 때 는 5131이며 정확도는 97.3%에 달했다. M을 제한 조건으로 추가함에 따라 는 감소하며, 정확도는 증가 추세를 보였다. 단, 을 부여했을 때 는 1616개 감소했으나 정확도는 0.4% 증가했다. M 제한 조건은 가 감소하는 것에 비해 정확도에 있어 큰 효과를 가져오지 않는다. Subgraph의 Density 또한 유사하다. 조건을 추가함에 따라 정확도는 향상되나 그에 비해 의 감소량은 기하급수적으로 증가한다. 이 완만하게 줄어드는 정확도를 1% 올리는 데 있어 는 800개 가량 감소한다.

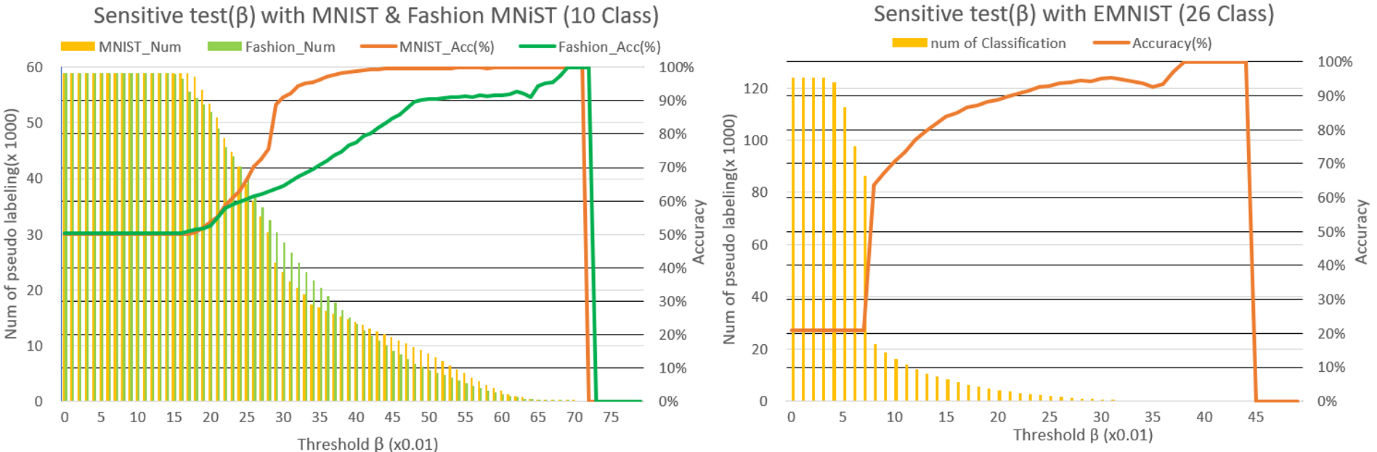
[Figure 4. = 1000, = 50, = 20 상황에서 SC1 정확도]

또한 M과 낮은 확률로 발생하는 CS1 오류를 완전히 방지하지 못한다. CS1은 각 회차 별 Sampling size을 작게 잡았을 경우, 우연히 특정 클래스의 중심부가 아님에도 접하는 subgraph의 중점 클래스가 동일한 경우가 발생한다. Figure 4를 통해 1st, 5th iteration 간 정확도가 갑자기 떨어지는 현상을 확인할 수 있다. 조건을 추가했을 때, 효과는 상황에 따라 달라진다. 위 현상의 근본적인 원인은 representation learning method의 성능이 충분하지 않은 것이다. 각 클래스에 따라 완벽히 구분되는 clustering이 불가능할 경우, 다수의 class가 동일한 저차원 영역으로 mapping 될 수 있다. 다수의 class 데이터가 뭉쳐있는 곳은 경계부라도 밀도가 높게 나타날 수 있다. 즉, figure 5와 같이 조건을 강화하더라도 오히려 정확도가 떨어질 수 있다. 한편으로 여러 class가 뭉친다 해도 CS1의 조건이 충족되긴 어렵다. 하지만 접하는 subgraph의 수가 많아도 2차원 상에서는 8개가 한계이다. 즉, 우연에 의해 sampling 된 subgraph 모두가 동일한 경우가 발생할 가능성이 있다. 이때 접하는 subgraph의 수 M을 제한 조건으로 추가함에 따라 가능성을 줄일 수 있으나 완벽한 해결책은 아니다. 이는 Figure 5의 1st, 5th iteration에 대한 정확도 변화 추이를 통해 확인할 수 있다. Representation learning의 성능을 향상하는 것 외에도 의 크기를 높혀 반지름 의 크기를 줄이는 것 또한 방법이다. 의 크기가 줄어들수록 subraph 간의 간격이 줄어들어 보다 세밀한 class 별 구분이 가능해진다. 또한 접하는 subgraph의 수가 늘어나 우연에 의해 subgraph의 클래스가 겹치는 가능성이 줄어든다.



[Figure 5. Bad case에 대한 SC1 Sensitive test]

그 외로 SC2에서 제한 조건인 Threshold 에 대해 분석하고자 MNIST, Fashion MNIST, EMNIST에 대해 각각 Sensitive test를 진행했다. 모든 데이터셋에서 와 정확도는 Trade off 관계를 가진다. 동일한 Class 개수를 가지고 있는 MNIST, Fashion MNIST 데이터셋에서 에 따른 와 정확도의 변화 추세는 유사하다. 각각 빨간색으로 칠해진 부분은 각각 정확도가 95%가 넘은 지점이다. 이로 보아 는 각 특정 값이 속할 확률을 그대로 반영하는 것 보다 엄격함을 알 수 있다. 단, 각 데이터 셋 별로 적절한 의 값이 달라진다. Table1의 결과를 고려할 때, CAE가 각각의 데이터셋의 정보를 얼마나 잘 반영하느냐에 달린 것으로 보인다.



[Figure 5. 에서 SC2 Sensitive test]

적정 는 Iteration 횟수와 Class의 개수에 의해 영향을 받는다. Iteration 횟수가 증가함에 따라 주변부의 subgraph 정보를 계속 반영함에 따라 자신이 속한 클래스의 확률 값이 높아질 것이다. 반면 EMNIST의 경우를 통해 Class의 개수가 늘어남에 따라 적정 값이 크게 줄어드는 것을 확인할 수 있다. Softmax 값을 구함에 있어 한번도 Count가 되지 않은 Class 또한 큰 확률 비중을 차지하기 때문이다. 예로 총 10개의 Class가 있는 데이터셋에서 Class 1에 속하는 데이터가 있다고 하자. 해당 데이터가 Class 1 subgraph에만 1번 속했을 때, CS2 방법에 따른 Class1에 속할 확률은 23% 이다. 클래스의 개수가 증가함에 따라 CS2 방법으로 측정한 확률 값은 더욱 줄어들 수밖에 없다. 추후 다양한Dataset에 대해 값을 일반화할 수 있도록 조치를 취할 필요가 있다.

4-4) 문제점 발생

MNIST 데이터셋에서 CS1, CS2을 통해 99% 이상의 높은 정확도의 Labeled data를 13 CNN 모델 학습에 활용할 때 오히려 Test dataset에 대한 정확도가 떨어진다.

|  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| (||, P) | CS1 | CS2 | Total Acc | CNN Acc  ( only) | CNN Acc  (+) | CNN Acc  (+) |
| 100 (10, 10) | 4505 | 466 | 99.02 | 49.84 | 32.87 | 31.65 |
| 250 (25, 10) | 8874 | 1087 | 99.56 | 54.45 | 39.23 | 44.52 |
| 500 (50, 10) | 11486 | 714 | 98.97 | 68.26 | 52.35 | 58.03 |
| 750 (75, 10) | 13012 | 260 | 99.84 | 63.03 | 54.77 | 55.42 |
| 1000 (100, 10) | 15305 | 252 | 99.47 | 67.60 | 58.17 | 53.12 |

[Table 3. CS1, CS2 Labeling 활용]

이에 대해선 크게 3가지 해석이 가능하다. 먼저 CS1, CS2 방법을 통해 Classification 한 데이터들은 클래스 중심부에 속하는 Data들로 다들 유사한 특성을 지닐 것이다. 따라서 해당 데이터들을 학습에 활용한다고 해서 CNN 모델에 큰 영향을 미치지 못한다. 두번째, Label data간 imbalance가 형성된다. CS1, CS2의 방법은 CAE로 추출한 Feature가 다른 Class와 잘 구별될 때에 효과가 있다. 본 연구간 MNIST의 경우 0, 4, 6 클래스 data에 대해서는 Classification이 잘 되었으나, 다른 클래스의 경우 소수에 불가했다 즉, imbalanced label data는 모델의 일반화가 아닌 과적합을 유발시킨다. 특히 본 paper에는 담지 않았으나 CS1, CS2 가 100%의 정확도를 가질 때에도 성능이 동일하거나 오히려 악화되는 경우가 있었다. 세번째, misclassification 된 소수 Class의 데이터가 모델 학습에 큰 악영향을 미친다는 것이다. CAE의 성능 부족으로 인해 feature들은 유사했으나, 원본 데이터는 큰 차이를 띌 수 있다. 부족했던 Class의 정보가 잘못 다수의 Label data의 클래스로 Classification 됨에 따라, confirmation bias을 미칠 수 있다.

5. Future work

가장 큰 한계점은 해상도가 낮은 데이터셋에 한정적으로 CS1, CS2 방법을 적용할 수 있다는 점이다. 저차원으로 mapping 하면서 동시에 각 클래스별로 Clustering이 잘 되도록 하는 방안을 강구할 필요가 있다. 현 논문에서는 13 CNN 모델에 의존했다. 추후 ResNet 18, DGI 등 다양한 이미지 데이터에 대한 unsupervised representation learning method을 적용해볼 필요가 있다. 다음으로 CS1, CS2 방법을 통해 구한 높은 정확도의 Pseudo labeled data가 CNN 모델의 성능 향상으로 이어지지 않는다. 추후 Label data의 imbalance 문제와 misclassification으로 인한 confirmation bias을 해소해야 한다. 전자는 보다 성능이 좋은 Representation learning을 적용하여 일부 해소할 수 있다. Features extraction을 했을 때 각 Class 별로 잘 구분되도록 Clustering된다면, 다양한 Class 데이터에 대해 CS1, CS2을 적용할 수 있다. 또는 Coreset selection을 통해 뽑은 Label data의 Class 비율이 본래 dataset의 Class 비율과 유사하다 가정함으로써, Unbalanced pseudo Labeling 한 data의 영향력을 조절할 수 있다. 그 외에도 CS1, CS2 방법을 적용하지 못한 Class 정보에 한해 data augmentation을 진행할 수 있다. 한편 소량의 misclassification data에 대해서도 outlier detection을 적용할 여지가 있다. 잘못 labeling한 데이터의 경우 loss 값이 크게 튀어오른 것을 확인하였다. 따라서 Loss의 값이 일정 값 아래인 데이터에 한정하여 학습한다면 misclassification을 방지할 수 있다.

그 외에 현재 CS2 을 향상할 여지가 존재한다. 주어진 에 대해 Iteration 횟수를 늘렸을 때 Classification 가능한 data의 수가 늘어났다. 이를 확장하면 번의 Coreset selection 마다 Iteration하는 것으로 고려할 수 있다. 무엇보다 각 Iteration 마다 subgraph을 형성하기 때문에, 각 점은 최소 개의 subgraph들에 포함된다. 이로써 Iteration 횟수를 극대화하여 다양한 데이터셋에 대해 Threshold 값을 일반화 및 뛰어난 성능을 보장할 수 있을 것이다. 더불어 CS2 방법만 고려할 경우 feature의 차원을 굳이 2차원까지 낮출 필요가 없다. 마지막으로 현 연구에서는 CS1, CS2의 방법을 Train dataset 내에서의 Classification에 초점을 잡았다. 하지만 Train dataset의 크기가 충분히 커 모집단의 역할을 할 수 있다면, Train dataset에서 학습한 representation learning은 Test dataset에서도 적용할 수 있다. 즉, 새로운 Classification 방법 자체로 활용할 여지가 있다.

**6. Conclusion**

본 연구는 Coreset selection의 Subgraph를 기하적인 관점에서 활용한 새로운 Classification CS1, CS2을 제시한다. Small Image dataset MNIST, Fashion MNIST, EMNIST 데이터셋에서 주어진 Label data 의 수배에 달하는 unlabeled data에 대해 95% 가량의 정확도로 Classification을 할 수 있다. 데이터셋에 적합한 representation learning을 적용할 경우 효율은 10~40배로 띄며 정확도 또한 99%에 근접해진다. SC1과 SC2의 성능을 보장하기 위해선 Sampling size 과 iteration 횟수 간의 trade off을 고려해야 한다. 하이퍼 파라미터인 M은 SC1 상황에서의 우연의 의해 misclassification을 방지하기 위해 적용해야 한다. 2차원 상에서는 M=6 이 적절하다. 반면 subgraph의 밀도 는 큰 효용이 없다. Threshold 실제 Class 가 속할 확률보다 보수적이며, Class의 개수가 증가하고 Iteration 횟수가 감소할수록 낮게 설정해야 한다. 아직 개선할 점이 많지만 Label data 부족을 해결하기 위한 새로운 Classification 방법이라는 점에서 의미를 가진다.

**<참고문헌>**

Arazo, E., Ortego, D., Albert, P., O’Connor, N. E., & McGuinness, K. (2020). *Pseudo-labeling and confirmation bias in deep semi-supervised learning.* Paper presented at the 2020 International Joint Conference on Neural Networks (IJCNN).

Argote, L., & Ingram, P. (2000). Knowledge transfer: A basis for competitive advantage in firms. *Organizational behavior and human decision processes, 82*(1), 150-169.

Cascante-Bonilla, P., Tan, F., Qi, Y., & Ordonez, V. (2021). *Curriculum labeling: Revisiting pseudo-labeling for semi-supervised learning.* Paper presented at the Proceedings of the AAAI Conference on Artificial Intelligence.

Chapelle, O., Scholkopf, B., & Zien, A. (2009). Semi-supervised learning (chapelle, o. et al., eds.; 2006)[book reviews]. *IEEE Transactions on Neural Networks, 20*(3), 542-542.

Gal, Y., Islam, R., & Ghahramani, Z. (2017). *Deep bayesian active learning with image data.* Paper presented at the International Conference on Machine Learning.

Grandvalet, Y., & Bengio, Y. (2004). Semi-supervised learning by entropy minimization. *Advances in neural information processing systems, 17*.

Hurtik, P., Molek, V., & Perfilieva, I. (2020). Novel dimensionality reduction approach for unsupervised learning on small datasets. *Pattern Recognition, 103*, 107291.

Lee, D.-H. (2013). *Pseudo-label: The simple and efficient semi-supervised learning method for deep neural networks.* Paper presented at the Workshop on challenges in representation learning, ICML.

Liu, P., Zhang, H., & Eom, K. B. (2016). Active deep learning for classification of hyperspectral images. *IEEE Journal of Selected Topics in Applied Earth Observations and Remote Sensing, 10*(2), 712-724.

Luo, Y., Zhu, J., Li, M., Ren, Y., & Zhang, B. (2018). *Smooth neighbors on teacher graphs for semi-supervised learning.* Paper presented at the Proceedings of the IEEE conference on computer vision and pattern recognition.

Qiao, S., Shen, W., Zhang, Z., Wang, B., & Yuille, A. (2018). *Deep co-training for semi-supervised image recognition.* Paper presented at the Proceedings of the european conference on computer vision (eccv).

Ren, P., Xiao, Y., Chang, X., Huang, P.-Y., Li, Z., Gupta, B. B., . . . Wang, X. (2021). A survey of deep active learning. *ACM computing surveys (CSUR), 54*(9), 1-40.

Sajjadi, M., Javanmardi, M., & Tasdizen, T. (2016). Regularization with stochastic transformations and perturbations for deep semi-supervised learning. *Advances in neural information processing systems, 29*.

Sener, O., & Savarese, S. (2017). Active learning for convolutional neural networks: A core-set approach. *arXiv preprint arXiv:1708.00489*.

Shi, W., Gong, Y., Ding, C., Tao, Z. M., & Zheng, N. (2018). *Transductive semi-supervised deep learning using min-max features.* Paper presented at the Proceedings of the European Conference on Computer Vision (ECCV).

Sinha, S., Ebrahimi, S., & Darrell, T. (2019). *Variational adversarial active learning.* Paper presented at the Proceedings of the IEEE/CVF International Conference on Computer Vision.

Sun, Y., Li, J., Wang, W., Plaza, A., & Chen, Z. (2016). *Active learning based autoencoder for hyperspectral imagery classification.* Paper presented at the 2016 IEEE International Geoscience and Remote Sensing Symposium (IGARSS).

Tong, S. (2001). *Active learning: theory and applications*: Stanford University.

Wang, K., Zhang, D., Li, Y., Zhang, R., & Lin, L. (2016). Cost-effective active learning for deep image classification. *IEEE Transactions on Circuits and Systems for Video Technology, 27*(12), 2591-2600.

Wang, Y., Yao, H., & Zhao, S. (2016). Auto-encoder based dimensionality reduction. *Neurocomputing, 184*, 232-242.

Yang, X., Song, Z., King, I., & Xu, Z. (2022). A survey on deep semi-supervised learning. *IEEE Transactions on Knowledge and Data Engineering*.

Zhang, H., Cisse, M., Dauphin, Y. N., & Lopez-Paz, D. (2017). mixup: Beyond empirical risk minimization. *arXiv preprint arXiv:1710.09412*.