

Методы частичного обучения (semi-supervised learning)

К. В. Воронцов
vokov@forecsys.ru

Этот курс доступен на странице вики-ресурса
<http://www.MachineLearning.ru/wiki>
«Машинное обучение (курс лекций, К.В.Воронцов)»

8 мая 2012

Постановка задачи частичного обучения

Дано:

множество объектов X , множество классов Y ;

$X^l = \left\{ \begin{array}{l} x_1, \dots, x_l \\ y_1, \dots, y_l \end{array} \right\}$ — размеченная выборка (labeled data);

$X^k = \{x_{l+1}, \dots, x_{l+k}\}$ — неразмеченная выборка (unlabeled data).

Два варианта постановки задачи:

- *Частичное обучение* (semi-supervised learning):
построить алгоритм классификации $a: X \rightarrow Y$.
- *Трансдуктивное обучение* (transductive learning):
зная **все** $\{x_{l+1}, \dots, x_{l+k}\}$, получить метки $\{y_{l+1}, \dots, y_{l+k}\}$.

Типичные приложения:

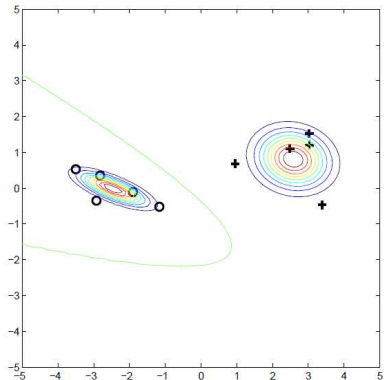
классификация и каталогизация текстов, изображений, и т. п.

Содержание: методы кластеризации

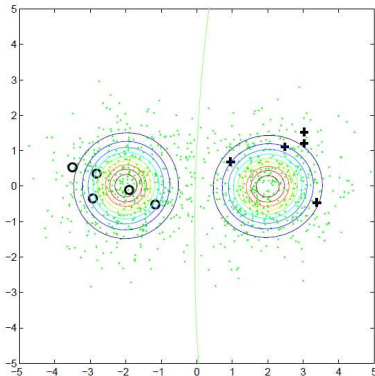
- 1 Простые эвристические методы**
 - Особенности задачи SSL
 - Метод self-training
 - Композиции алгоритмов классификации
- 2 Модификации методов кластеризации**
 - Оптимизационный подход
 - Кластеризация с ограничениями
- 3 Модификации методов классификации**
 - Трансдуктивный SVM
 - Логистическая регрессия
 - Expectation Regularization

SSL не сводится к классификации

Пример 1. плотности классов, восстановленные:
по размеченным данным X^ℓ

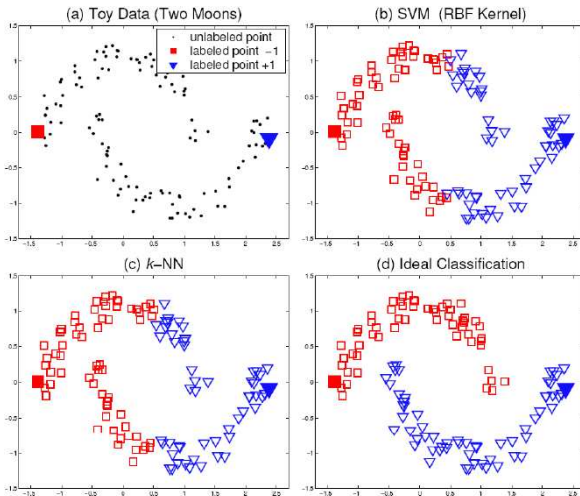


по полным данным $X^{\ell+k}$



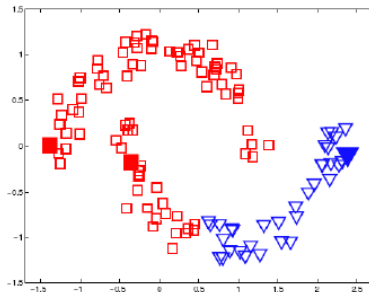
SSL не сводится к классификации

Пример 2.



Однако и к кластеризации SSL также не сводится

Пример 3.



Метод self-training (1965-1970)

Пусть $\mu: X^\ell \rightarrow a$ — произвольный метод обучения;
классификаторы имеют вид $a(x) = \arg \max_{y \in Y} \Gamma_y(x)$;

Отступ объекта — степень доверия классификации $a(x_i)$:

$$M_i(a) = \Gamma_{y_i}(x_i) - \max_{y \in Y \setminus y_i} \Gamma_y(x_i).$$

Алгоритм self-training — обёртка (wrapper)

над произвольным методом обучения классификатора:

- 1: $Z := X^\ell$;
- 2: **пока** $|Z| < \ell + k$
- 3: $a := \mu(Z)$;
- 4: $\Delta := \{x_i \in X^k \setminus Z \mid M_i(a) \geq M_0\}$;
- 5: $y_i := a(x_i)$ для всех $x_i \in \Delta$;
- 6: $Z := Z \cup \Delta$;

Метод co-training (Blum, Mitchell, 1998)

Пусть $\mu_1: X^\ell \rightarrow a_1$, $\mu_2: X^\ell \rightarrow a_2$ — два существенно различных метода обучения, использующих

- либо разные наборы признаков;
- либо разные парадигмы обучения (inductive bias);
- либо разные источники данных $X_1^{\ell_1}$, $X_2^{\ell_2}$.

1: $Z_1 := X_1^{\ell_1}$; $Z_2 := X_2^{\ell_2}$;

2: пока $|Z_1 \cup Z_2| < \ell + k$

3: $a_1 := \mu_1(Z_1)$; $\Delta_1 := \{x_i \in X^k \setminus Z_1 \setminus Z_2 \mid M_i(a_1) \geq M_{01}\}$;

4: $y_i := a(x_i)$ для всех $x_i \in \Delta_1$;

5: $Z_2 := Z_2 \cup \Delta_1$;

6: $a_2 := \mu_2(Z_2)$; $\Delta_2 := \{x_i \in X^k \setminus Z_1 \setminus Z_2 \mid M_i(a_2) \geq M_{02}\}$;

7: $y_i := a(x_i)$ для всех $x_i \in \Delta_2$;

8: $Z_1 := Z_1 \cup \Delta_2$;

Метод co-learning (deSa, 1993)

Пусть $\mu_t: X^\ell \rightarrow a_t$ — разные методы обучения, $t = 1, \dots, T$.

Алгоритм co-learning — это self-training для композиции — простого голосования базовых алгоритмов a_1, \dots, a_T :

$$a(x) = \arg \max_{y \in Y} \Gamma_y(x), \quad \Gamma_y(x_i) = \sum_{t=1}^T [a_t(x_i) = y].$$

тогда $M_i(a)$ — перевес голосов в пользу правильного класса y_i .

- 1: $Z := X^\ell$;
- 2: **пока** $|Z| < \ell + k$
- 3: $a := \mu(Z)$;
- 4: $\Delta := \{x_i \in X^k \setminus Z \mid M_i(a) \geq M_0\}$;
- 5: $y_i := a(x_i)$ для всех $x_i \in \Delta$;
- 6: $Z := Z \cup \Delta$;

Кластеризация как задача дискретной оптимизации

Пусть $\rho(x, x')$ — функция расстояния между объектами.
 Веса на парах объектов (близости): $w_{ij} = \exp(-\beta\rho(x_i, x_j))$,
 где β — параметр.

Задача кластеризации:

$$\sum_{i=1}^{\ell+k} \sum_{j=i+1}^{\ell+k} w_{ij} [a_i \neq a_j] \rightarrow \min_{\{a_i \in Y\}} .$$

Задача частичного обучения:

$$\sum_{i=1}^{\ell+k} \sum_{j=i+1}^{\ell+k} w_{ij} [a_i \neq a_j] + \lambda \sum_{i=1}^{\ell} [a_i \neq y_i] \rightarrow \min_{\{a_i \in Y\}} .$$

где λ — ещё один параметр.

Алгоритм КНП: кластеризация

Графовый алгоритм КНП (кратчайший незамкнутый путь)

- 1: Найти пару вершин $(x_i, x_j) \in X^{\ell+k}$ с наименьшим $\rho(x_i, y_j)$ и соединить их ребром;
- 2: **пока** в выборке остаются изолированные точки
- 3: найти изолированную точку, ближайшую к некоторой неизолированной;
- 4: соединить эти две точки ребром;
- 5: удалить $K - 1$ самых длинных рёбер;

Задача частичного обучения: заменить только шаг 5...

Алгоритм КНП: частичное обучение

Графовый алгоритм КНП (кратчайший незамкнутый путь)

- 1: Найти пару вершин $(x_i, x_j) \in X^{\ell+k}$ с наименьшим $\rho(x_i, y_j)$ и соединить их ребром;
- 2: **пока** в выборке остаются изолированные точки
- 3: найти изолированную точку, ближайшую к некоторой неизолированной;
- 4: соединить эти две точки ребром;
- 5: удалить $K-1$ самых длинных рёбер;
- 6: **пока** есть путь между двумя вершинами разных классов
- 7: удалить самое длинное ребро на этом пути.

Алгоритм Ланса-Уильямса: кластеризация

Алгоритм иерархической кластеризации (Ланс, Уильямс, 1967)

- 1: $C_1 := \{\{x_1\}, \dots, \{x_{\ell+k}\}\}$ — все кластеры 1-элементные;
 $R_{\{x_i\}\{x_j\}} := \rho(x_i, x_j)$ — расстояния между ними;
- 2: **для всех** $t = 2, \dots, \ell + k$ (t — номер итерации):
- 3: найти в C_{t-1} пару кластеров (U, V) с минимальным R_{UV} ;
- 4: слить их в один кластер:
 $W := U \cup V$;
 $C_t := C_{t-1} \cup \{W\} \setminus \{U, V\}$;
- 5: **для всех** $S \in C_t$
- 6: вычислить R_{WS} по формуле Ланса-Уильямса:
 $R_{WS} := \alpha_U R_{US} + \alpha_V R_{VS} + \beta R_{UV} + \gamma |R_{US} - R_{VS}|$;

Алгоритм Ланса-Уильямса: частичное обучение

Алгоритм иерархической кластеризации (Ланс, Уильямс, 1967)

- 1: $C_1 := \{\{x_1\}, \dots, \{x_{\ell+k}\}\}$ — все кластеры 1-элементные;
 $R_{\{x_i\}\{x_j\}} := \rho(x_i, x_j)$ — расстояния между ними;
- 2: **для всех** $t = 2, \dots, \ell + k$ (t — номер итерации):
- 3: найти в C_{t-1} пару кластеров (U, V) с минимальным R_{UV} ,
при условии, что в $U \cup V$ нет объектов с разными метками;
- 4: слить их в один кластер:
 $W := U \cup V$;
 $C_t := C_{t-1} \cup \{W\} \setminus \{U, V\}$;
- 5: **для всех** $S \in C_t$
- 6: вычислить R_{WS} по формуле Ланса-Уильямса:
 $R_{WS} := \alpha_U R_{US} + \alpha_V R_{VS} + \beta R_{UV} + \gamma |R_{US} - R_{VS}|$;

Метод k -средних: кластеризация

1: начальное приближение центров μ_y , $y \in Y$;

2: **повторять**

3: **E-шаг:**

отнести каждый x_i к ближайшему центру:

$$y_i := \arg \min_{y \in Y} \rho(x_i, \mu_y), \quad i = 1, \dots, \ell + k;$$

4: **M-шаг:**

вычислить новые положения центров:

$$\mu_y := \frac{\sum_{i=1}^{\ell+k} [y_i = y] x_i}{\sum_{i=1}^{\ell+k} [y_i = y]}, \quad \text{для всех } y \in Y;$$

5: **пока** y_i не перестанут изменяться;

Метод k -средних: частичное обучение

1: начальное приближение центров μ_y , $y \in Y$;

2: **повторять**

3: **E-шаг:**

отнести каждый $x_i \in X^k$ к ближайшему центру:

$$y_i := \arg \min_{y \in Y} \rho(x_i, \mu_y), \quad i = \ell + 1, \dots, \ell + k;$$

4: **M-шаг:**

вычислить новые положения центров:

$$\mu_y := \frac{\sum_{i=1}^{\ell+k} [y_i = y] x_i}{\sum_{i=1}^{\ell+k} [y_i = y]}, \quad \text{для всех } y \in Y;$$

5: **пока** y_i не перестанут изменяться;

SVM: классификация

Линейный классификатор на два класса $Y = \{-1, 1\}$:

$$a(x) = \text{sign}(\langle w, x \rangle - w_0), \quad w, x \in \mathbb{R}^n, \quad w_0 \in \mathbb{R}.$$

Отступ объекта x_i :

$$M_i(w, w_0) = (\langle w, x_i \rangle - w_0) y_i.$$

Задача обучения весов w, w_0 по размеченной выборке:

$$Q(w, w_0) = \sum_{i=1}^{\ell} (1 - M_i(w, w_0))_+ + \frac{1}{2C} \|w\|^2 \rightarrow \min_{w, w_0}.$$

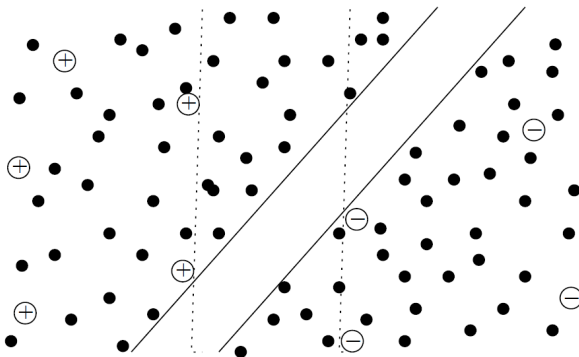
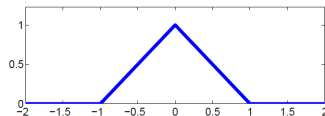
Функция $\mathcal{L}(M) = (1 - M)_+$ штрафует за уменьшение отступа.

Идея!

Функция $\mathcal{L}(M) = (1 - |M|)_+$ штрафует за попадание объекта внутрь разделяющей полосы.

Функция потерь для трансдуктивного SVM

Функция потерь $\mathcal{L}(M) = (1 - |M|)_+$ штрафует за попадание объекта внутрь разделяющей полосы.



Transductive SVM: частичное обучение

Обучение весов w, w_0 по частично размеченной выборке:

$$Q(w, w_0) = \sum_{i=1}^{\ell} (1 - M_i(w, w_0))_+ + \frac{1}{2C} \|w\|^2 + \\ + \gamma \sum_{i=\ell+1}^{\ell+k} (1 - |M_i(w, w_0)|)_+ \rightarrow \min_{w, w_0} .$$

Эффективная реализация:

Sindhwani, Keerthi. Large scale semisupervised linear SVMs. SIGIR 2006.

Гауссовская функция штрафа:

Chapelle, Zien. Semi-supervised classification by low density separation. AISTAT 2005.

Недостатки TSVM:

- решение неустойчиво, если нет области разреженности;
- требуется настройка двух параметров C, γ ;

Логистическая регрессия: классификация на 2 класса

Линейный классификатор на два класса $Y = \{-1, 1\}$:

$$a(x) = \text{sign}\langle w, x \rangle, \quad x, w \in \mathbb{R}^n.$$

Вероятность того, что объект x_i относится к классу y :

$$P(y|x_i, w) = \frac{1}{1 + \exp(-\langle w, x_i \rangle y)}.$$

Задача максимизации регуляризованного правдоподобия:

$$Q(w) = \sum_{i=1}^{\ell} \log P(y_i|x_i, w) - \frac{1}{2C} \|w\|^2 \rightarrow \max_w$$

Логистическая регрессия: классификация при произвольном Y

Линейный классификатор при произвольном числе классов $|Y|$:

$$a(x) = \arg \max_{y \in Y} \langle w_y, x \rangle, \quad x, w_y \in \mathbb{R}^n, \quad w \equiv (w_y)_{y \in Y}.$$

Вероятность того, что объект x_i относится к классу y :

$$P(y|x_i, w) = \frac{\exp \langle w_y, x_i \rangle}{\sum_{c \in Y} \exp \langle w_c, x_i \rangle}.$$

Задача максимизации регуляризованного правдоподобия:

$$Q(w) = \sum_{i=1}^{\ell} \log P(y_i|x_i, w) - \frac{1}{2C} \|w\|^2 \rightarrow \max_w,$$

Логистическая регрессия: частичное обучение

Теперь учтём неразмеченные данные $X^k = \{x_{\ell+1}, \dots, x_{\ell+k}\}$.
Пусть $b_j(x)$ — бинарные признаки, $j = 1, \dots, m$.

Оценим вероятности $P(y|b_j(x) = 1)$ двумя способами:

1) эмпирическая оценка по размеченным данным X^ℓ :

$$p_j(y) = \frac{\sum_{i=1}^{\ell} b_j(x_i) [y_i = y]}{\sum_{i=1}^{\ell} b_j(x_i)};$$

2) оценка по неразмеченным данным X^k и линейной модели w :

$$p_j(y, w) = \frac{\sum_{i=\ell+1}^{\ell+k} b_j(x_i) P(y|x_i, w)}{\sum_{i=\ell+1}^{\ell+k} b_j(x_i)}.$$

Будем минимизировать расстояние между $p_j(y)$ и $p_j(y, w)$.

Как оценить расстояние между двумя распределениями?

Пусть $p(i)$ и $q(i)$ — два дискретных распределения, $i = 1, \dots, n$.

Проблема: малые различия в «хвостах» распределений могут приводить к существенным различиям статистических свойств.

$\chi^2(p, q) = \sum_i \frac{(p(i) - q(i))^2}{q(i)}$ — статистика хи-квадрат;

$H^2(p, q) = \frac{1}{2} \sum_i (\sqrt{p(i)} - \sqrt{q(i)})^2$ — расстояние Хелинджера;

$KL(p||q) = \sum_i p(i) \log \frac{p(i)}{q(i)}$ — дивергенция Кульбака–Лейблера.

KL связана с принципом максимума правдоподобия:

$$KL(p||q) \rightarrow \min_q \Leftrightarrow \sum_i p(i) \log q(i) \rightarrow \max_q.$$

где p — эмпирическое распределение, q — модельное.

Построение функционала качества

Кросс-энтропия — мера согласованности двух оценок, $p_j(y)$ и $p_j(y, w)$ одной и той же вероятности $P(y|b_j(x) = 1)$:

$$H_j(w) = \sum_{y \in Y} p_j(y) \log p_j(y, w) \rightarrow \max_w$$

(максимум достигается при $p_j(y) \equiv p_j(y, w)$).

Добавим суммарную согласованность по всем m признакам к функционалу регуляризованного правдоподобия:

$$Q(w) = \sum_{i=1}^{\ell} \log P(y_i|x_i, w) - \frac{1}{2C} \sum_{y \in Y} \|w_y\|^2 + \\ + \lambda \sum_{j=1}^m \sum_{y \in Y} p_j(y) \log \left(\frac{\sum_{i=\ell+1}^{\ell+k} b_j(x_i) P(y|x_i, w)}{\sum_{i=\ell+1}^{\ell+k} b_j(x_i)} \right) \rightarrow \max_w$$

Замечания про метод XR (Expectation Regularization)

- 1 Оптимизация $Q(w)$ — методом стохастического градиента.
- 2 Возможные варианты задания переменных b_j :
 - 1 $b_j(x) \equiv 1$, тогда $P(y|b_j(x) = 1)$ — априорная вероятность класса y (label regularization) — хорошо подходит для задач с несбалансированными классами;
 - 2 $b_j(x) = [\text{термин } j \text{ содержится в тексте } x]$ — для задач классификации и каталогизации текстов.
- 3 XR слабо чувствителен к выбору C и γ .
- 4 XR очень устойчив к погрешностям оценивания $p_j(y)$.
- 5 XR не требователен к числу размеченных объектов ℓ .
- 6 XR хорошо подходит для категоризации текстов.
- 7 XR показывает в экспериментах очень высокую точность.

Mann, McCallum. Simple, robust, scalable semi-supervised learning via expectation regularization. ICML 2007.

Резюме в конце лекции

- Задача SSL занимает промежуточное положение между классификацией и кластеризацией, но не сводится к ним.
- Простые методы-обёртки требуют многократного обучения, что вычислительно неэффективно.
- Методы кластеризации легко адаптируются к SSL путём введения ограничений (constrained clustering), но, как правило, вычислительно трудоёмки.
- Адаптация методов классификации реализуется сложнее, но приводит к более эффективным методам.
- Expectation Regularization — быстрый и точный метод, позволяющий учитывать дополнительную информацию.