

Методы машинного обучения. Обучение без учителя: кластеризация и частичное обучение

Воронцов Константин Вячеславович
www.MachineLearning.ru/wiki?title=User:Vokov
вопросы к лектору: voron@forecsys.ru

материалы курса:
github.com/MSU-ML-COURSE/ML-COURSE-22-23
орг.вопросы по курсу: ml.cmc@mail.ru

Выявление структуры данных на основе сходства:

- кластеризация (clustering)
- оценивание плотности распределения (density estimation)
- одноклассовая классификация (anomaly detection)

Преобразование признакового пространства:

- метод главных компонент (principal components analysis)
- матричные разложения (matrix factorization)
- автокодировщики (autoencoders)
- многомерное шкалирование (multidimensional scaling)

Поиск взаимосвязей в данных или синтез учителя:

- поиск ассоциативных правил (association rule learning)
- частичное обучение (semi-supervised learning)
- самостоятельное обучение (self-supervised learning)

1 Задачи кластеризации и частичного обучения

- Задача кластеризации
- Задача частичного обучения
- Критерии качества кластеризации

2 Алгоритмы кластеризации

- Метод K -средних
- Алгоритм DBSCAN
- Иерархические методы

3 Частичное обучение на основе классификации

- Обёртки над методами классификации
- Трансдуктивный SVM
- Регуляризация правдоподобия

Постановка задачи кластеризации

Дано:

X — пространство объектов;

$X^\ell = \{x_1, \dots, x_\ell\}$ — обучающая выборка;

$\rho: X \times X \rightarrow [0, \infty)$ — функция расстояния между объектами.

Найти:

Y — множество кластеров,

$a: X \rightarrow Y$ — алгоритм кластеризации,

такие, что:

- каждый кластер состоит из близких объектов;
- объекты разных кластеров существенно различны.

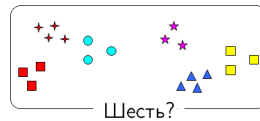
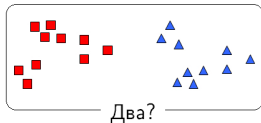
Это задача *обучения без учителя* (unsupervised learning).

Некорректность задачи кластеризации

Решение задачи кластеризации принципиально неоднозначно:

- точной постановки задачи кластеризации нет;
- существует много критериев качества кластеризации;
- существует много эвристических методов кластеризации;
- число кластеров $|Y|$, как правило, неизвестно заранее;
- результат кластеризации сильно зависит от метрики ρ , выбор которой также является эвристикой.

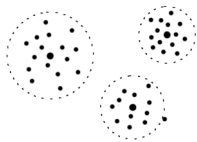
Пример: сколько здесь кластеров?



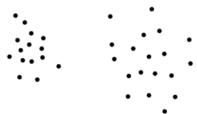
Цели кластеризации

- Упростить дальнейшую обработку данных, разбить множество X^ℓ на группы схожих объектов чтобы работать с каждой группой в отдельности (задачи классификации, регрессии, прогнозирования).
- Сократить объём хранимых данных, оставив по одному представителю от каждого кластера (задачи сжатия данных).
- Выделить нетипичные объекты, которые не подходят ни к одному из кластеров (задачи одноклассовой классификации).
- Построить иерархию множества объектов, пример — классификация животных и растений К.Линнея (задачи таксономии).

Типы кластерных структур



кластеры с центрами



внутрикластерные расстояния
меньше межкластерных



ленточные кластеры

Типы кластерных структур



перемычки между кластерами



разреженный фон
из нетипичных объектов



перекрывающиеся кластеры

Типы кластерных структур



кластеры могут вообще отсутствовать

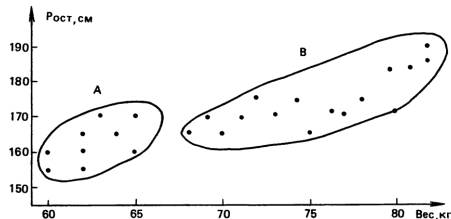


а это вообще не кластеры

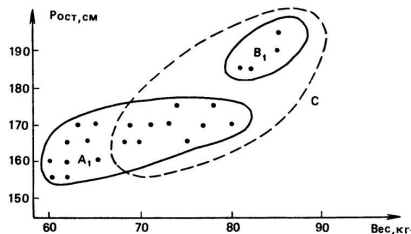
- Каждый метод кластеризации имеет свои ограничения и выделяет кластеры лишь некоторых типов.
- Понятие «тип кластерной структуры» зависит от метода и также не имеет формального определения.

Проблема чувствительности к выбору метрики

Результат зависит от нормировки признаков:



A — студентки,
B — студенты



после перенормировки
(сжали ось «вес» вдвое)

Постановка задачи частичного обучения (SSL)

Дано:

множество объектов X , множество классов Y ;

$X^k = \{x_1, \dots, x_k\}$ — размеченные объекты (labeled data);
 $\{y_1, \dots, y_k\}$

$U = \{x_{k+1}, \dots, x_\ell\}$ — неразмеченные объекты (unlabeled data).

Два варианта постановки задачи:

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

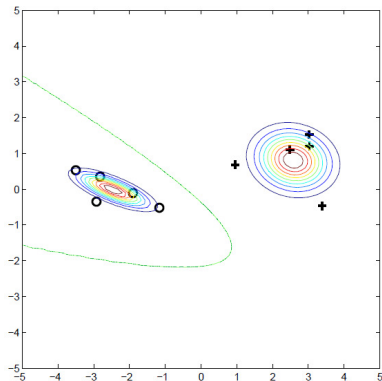
Типичные приложения:

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

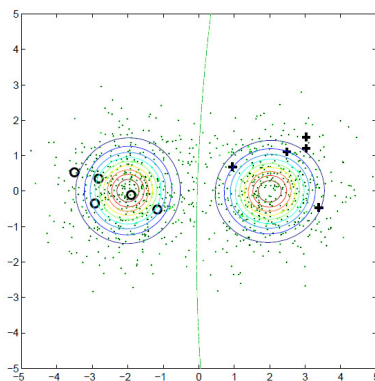
SSL не сводится к классификации

Пример 1. плотности классов, восстановленные:

по размеченным данным X^k

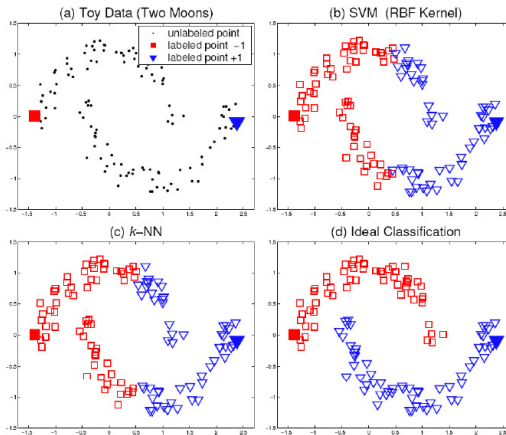


по полным данным X^ℓ



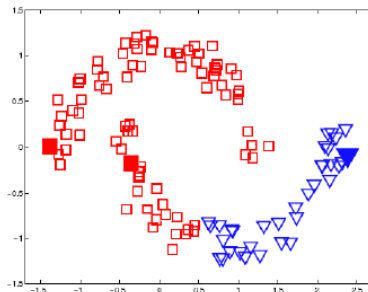
SSL не сводится к классификации

Пример 2. Методы классификации не учитывают кластерную структуру неразмеченных данных



Однако и к кластеризации SSL также не сводится

Пример 3. Методы кластеризации не учитывают приоритетность разметки над кластерной структурой.



Качество кластеризации в метрическом пространстве

Пусть известны только попарные расстояния между объектами.

$a_i = a(x_i)$ — кластеризация объекта x_i

- Среднее внутрикластерное расстояние:

$$F_0 = \frac{\sum_{i < j} [a_i = a_j] \rho(x_i, x_j)}{\sum_{i < j} [a_i = a_j]} \rightarrow \min.$$

- Среднее межкластерное расстояние:

$$F_1 = \frac{\sum_{i < j} [a_i \neq a_j] \rho(x_i, x_j)}{\sum_{i < j} [a_i \neq a_j]} \rightarrow \max.$$

- Отношение пары функционалов: $F_0/F_1 \rightarrow \min.$

Качество кластеризации в линейном векторном пространстве

Пусть объекты x_i задаются векторами $(f_1(x_i), \dots, f_n(x_i))$.

- Сумма средних внутрикластерных расстояний:

$$\Phi_0 = \sum_{a \in Y} \frac{1}{|X_a|} \sum_{i: a_i = a} \rho(x_i, \mu_a) \rightarrow \min,$$

$X_a = \{x_i \in X^\ell \mid a_i = a\}$ — кластер a ,
 μ_a — центр масс кластера a .

- Сумма межкластерных расстояний:

$$\Phi_1 = \sum_{a, b \in Y} \rho(\mu_a, \mu_b) \rightarrow \max.$$

- Отношение пары функционалов: $\Phi_0/\Phi_1 \rightarrow \min$.

Коэффициент силуэта (анализ ошибок кластеризации)

Распределение качества кластеризации по объектам/кластерам

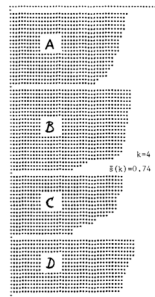
- Ср.расстояние до объектов своего кластера:

$$r_i = \frac{1}{|X_{a_i}| - 1} \sum_{x \in X_{a_i} \setminus x_i} \rho(x, x_i)$$

- Мин. ср.расстояние до чужого кластера:

$$R_i = \min_{a \in Y \setminus a_i} \frac{1}{|X_a|} \sum_{x \in X_a} \rho(x, x_i)$$

- Коэффициент силуэта объекта: $s(i) = \frac{R_i - r_i}{\max(R_i, r_i)} \in [-1, +1]$



Peter J. Rousseeuw. Silhouettes: a graphical aid to the interpretation and validation of cluster analysis. 1987.

Точность и полнота кластеризации в сравнении с эталоном

$y_i \in Y_0$ — эталонная классификация объектов, $i = 1, \dots, \ell$

Y_0 может не совпадать с Y по мощности

$P_i = \{k: a_k = a_i\}$ — кластер объекта x_i

$Q_i = \{k: y_k = y_i\}$ — эталонный класс объекта x_i

BCubed-меры точности и полноты кластеризации:

$\text{Precision} = \frac{1}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} \frac{|P_i \cap Q_i|}{|P_i|}$ — средняя точность

$\text{Recall} = \frac{1}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} \frac{|P_i \cap Q_i|}{|Q_i|}$ — средняя полнота

$F_1 = \frac{1}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} \frac{|P_i \cap Q_i|}{|P_i| + |Q_i|}$ — средняя F_1 -мера

E.Amigo, J.Gonzalo, J.Artiles, F.Verdejo. A comparison of extrinsic clustering evaluation metrics based on formal constraints. 2009.

Метод K-средних (K-means) для кластеризации

Минимизация суммы квадратов внутрикластерных расстояний:

$$\sum_{i=1}^{\ell} \|x_i - \mu_{a_i}\|^2 \rightarrow \min_{\{a_i\}, \{\mu_a\}}, \quad \|x_i - \mu_a\|^2 = \sum_{j=1}^n (f_j(x_i) - \mu_{aj})^2$$

Алгоритм Ллойда

вход: X^ℓ , $K = |Y|$; **выход:** центры кластеров μ_a , $a \in Y$;
 $\mu_a :=$ начальное приближение центров, для всех $a \in Y$;

повторять

отнести каждый x_i к ближайшему центру:

$$a_i := \arg \min_{a \in Y} \|x_i - \mu_a\|, \quad i = 1, \dots, \ell;$$

вычислить новые положения центров:

$$\mu_a := \frac{\sum_{i=1}^{\ell} [a_i = a] x_i}{\sum_{i=1}^{\ell} [a_i = a]}, \quad a \in Y;$$

пока a_i не перестанут изменяться;

Метод K -средних (K -means) для частичного обучения

Модификация алгоритма Ллойда

при наличии размеченных объектов $\{x_1, \dots, x_k\}$

вход: X^ℓ , $K = |Y|$;

выход: центры кластеров μ_a , $a \in Y$;

$\mu_a :=$ начальное приближение центров, для всех $a \in Y$;

повторять

отнести каждый $x_i \in U$ к ближайшему центру:

$$a_i := \arg \min_{a \in Y} \|x_i - \mu_a\|, \quad i = k + 1, \dots, \ell;$$

вычислить новые положения центров:

$$\mu_a := \frac{\sum_{i=1}^{\ell} [a_i = a] x_i}{\sum_{i=1}^{\ell} [a_i = a]}, \quad a \in Y;$$

пока a_i не перестанут изменяться;

Метод K-средних — упрощение EM-алгоритма для GMM

ЕМ-алгоритм: максимизация правдоподобия для разделения смеси гауссиан (GMM, Gaussian Mixture Model)

начальное приближение w_a, μ_a, Σ_a для всех $a \in Y$;

повторять

Е-шаг: отнести каждый x_i к ближайшим центрам:

$$g_{ia} := P(a|x_i) \equiv \frac{w_a p_a(x_i)}{\sum_y w_y p_y(x_i)}, \quad a \in Y, \quad i = 1, \dots, \ell;$$

$$a_i := \arg \max_{a \in Y} g_{ia}, \quad i = 1, \dots, \ell;$$

М-шаг: вычислить новые положения центров:

$$\mu_{ad} := \frac{1}{\ell w_a} \sum_{i=1}^{\ell} g_{ia} f_d(x_i), \quad a \in Y, \quad d = 1, \dots, n;$$

$$\sigma_{ad}^2 := \frac{1}{\ell w_a} \sum_{i=1}^{\ell} g_{ia} (f_d(x_i) - \mu_{ad})^2, \quad a \in Y, \quad d = 1, \dots, n;$$

$$w_a := \frac{1}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} g_{ia}, \quad a \in Y;$$

пока a_i не перестанут изменяться;

Сравнение EM-алгоритма для GMM и метода k -средних

Основные отличия GMM-EM и k -means:

- GMM-EM: мягкая кластеризация: $g_{ia} = P(a|x_i)$
 k -means: жёсткая кластеризация: $g_{ia} = [a_i = a]$
- GMM-EM: кластеры эллиптические, настраиваемые
 k -means: кластеры сферические, не настраиваемые

Гибриды (упрощение GMM-EM — усложнение k -means):

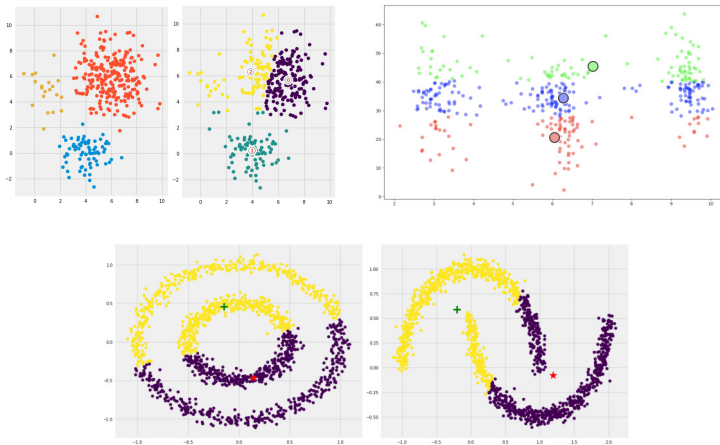
- GMM-EM с жёсткой кластеризацией на E-шаге
- GMM-EM без настройки дисперсий (сферические гауссианы)

Недостатки k -means:

- чувствительность к выбору начального приближения
- медленная сходимость (пользуйтесь k -means++)

Примеры неудачной кластеризации k -means

Причина — неудачное начальное приближение или
существенная негауссовость кластеров



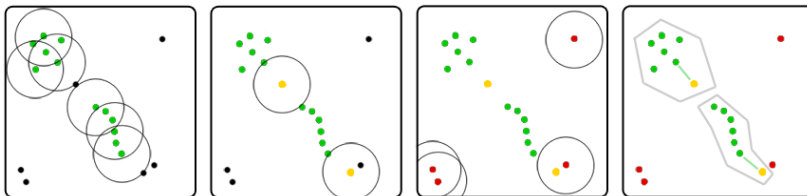
Алгоритм кластеризации DBSCAN

(Density-Based Spatial Clustering of Applications with Noise)

Объект $x \in U$, его ε -окрестность $U_\varepsilon(x) = \{u \in U: \rho(x, u) \leq \varepsilon\}$

Каждый объект может быть одного из трёх типов:

- корневой: имеющий плотную окрестность, $|U_\varepsilon(x)| \geq m$
- граничный: не корневой, но в окрестности корневого
- шумовой (выброс): не корневой и не граничный



Ester, Kriegel, Sander, Xu. A density-based algorithm for discovering clusters in large spatial databases with noise. KDD-1996.

Алгоритм кластеризации DBSCAN

вход: выборка $X^\ell = \{x_1, \dots, x_\ell\}$; параметры ε и m ;

выход: разбиение выборки на кластеры и шумовые выбросы;

$U := X^\ell$ — непомеченные; $a := 0$;

пока в выборке есть непомеченные точки, $U \neq \emptyset$:

 взять случайную точку $x \in U$;

если $|U_\varepsilon(x)| < m$ **то**

 позначить x как, возможно, шумовой;

иначе

 создать новый кластер: $K := U_\varepsilon(x)$; $a := a + 1$;

для всех $x' \in K$, не помеченных или шумовых

если $|U_\varepsilon(x')| \geq m$ **то** $K := K \cup U_\varepsilon(x')$;

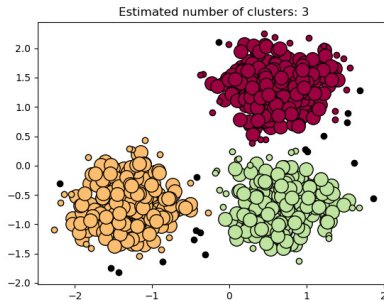
иначе позначить x' как граничный кластера K ;

$a_i := a$ для всех $x_i \in K$;

$U := U \setminus K$;

Преимущества алгоритма DBSCAN

- быстрая кластеризация больших данных:
 $O(\ell^2)$ в худшем случае,
 $O(\ell \ln \ell)$ при эффективной реализации $U_\epsilon(x)$;
- кластеры произвольной формы (долой центры!);
- деление объектов на корневые, граничные, шумовые.



Агломеративная иерархическая кластеризация

Алгоритм иерархической кластеризации (Ланс, Уильямс, 1967):
итеративный пересчёт расстояний R_{UV} между кластерами U, V .

$C_1 := \{\{x_1\}, \dots, \{x_\ell\}\}$ — все кластеры 1-элементные;

$R_{\{x_i\}\{x_j\}} := \rho(x_i, x_j)$ — расстояния между ними;

для всех $t = 2, \dots, \ell$ (t — номер итерации):

 найти в C_{t-1} пару кластеров (U, V) с минимальным R_{UV} ;

 слить их в один кластер:

$W := U \cup V$;

$C_t := C_{t-1} \cup \{W\} \setminus \{U, V\}$;

для всех $S \in C_t$

 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 для частичного обучения

Алгоритм иерархической кластеризации (Ланс, Уильямс, 1967):
итеративный пересчёт расстояний R_{UV} между кластерами U, V .

$C_1 := \{\{x_1\}, \dots, \{x_\ell\}\}$ — все кластеры 1-элементные;

$R_{\{x_i\}\{x_j\}} := \rho(x_i, x_j)$ — расстояния между ними;

для всех $t = 2, \dots, \ell$ (t — номер итерации):

 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;

 слить их в один кластер:

$W := U \cup V$;

$C_t := C_{t-1} \cup \{W\} \setminus \{U, V\}$;

для всех $S \in C_t$

 вычислить R_{WS} по формуле Ланса-Уильямса:

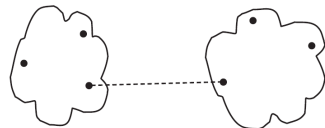
$R_{WS} := \alpha_U R_{US} + \alpha_V R_{VS} + \beta R_{UV} + \gamma |R_{US} - R_{VS}|$;

Частные случаи формулы Ланса-Уильямса

1. Расстояние ближнего соседа:

$$R_{WS}^b = \min_{w \in W, s \in S} \rho(w, s);$$

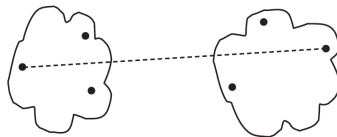
$$\alpha_U = \alpha_V = \frac{1}{2}, \quad \beta = 0, \quad \gamma = -\frac{1}{2}.$$



2. Расстояние дальнего соседа:

$$R_{WS}^d = \max_{w \in W, s \in S} \rho(w, s);$$

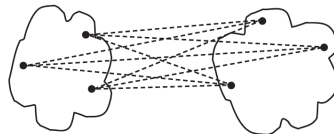
$$\alpha_U = \alpha_V = \frac{1}{2}, \quad \beta = 0, \quad \gamma = \frac{1}{2}.$$



3. Групповое среднее расстояние:

$$R_{WS}^g = \frac{1}{|W||S|} \sum_{w \in W} \sum_{s \in S} \rho(w, s);$$

$$\alpha_U = \frac{|U|}{|W|}, \quad \alpha_V = \frac{|V|}{|S|}, \quad \beta = \gamma = 0.$$



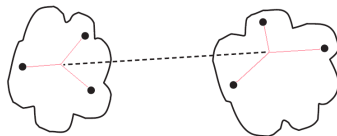
Частные случаи формулы Ланса-Уильямса

4. Расстояние между центрами:

$$R_{WS}^u = \rho^2 \left(\sum_{w \in W} \frac{w}{|W|}, \sum_{s \in S} \frac{s}{|S|} \right);$$

$$\alpha_U = \frac{|U|}{|W|}, \quad \alpha_V = \frac{|V|}{|W|},$$

$$\beta = -\alpha_U \alpha_V, \quad \gamma = 0.$$



5. Расстояние Уорда:

$$R_{WS}^y = \frac{|S||W|}{|S|+|W|} \rho^2 \left(\sum_{w \in W} \frac{w}{|W|}, \sum_{s \in S} \frac{s}{|S|} \right);$$

$$\alpha_U = \frac{|S|+|U|}{|S|+|W|}, \quad \alpha_V = \frac{|S|+|V|}{|S|+|W|}, \quad \beta = \frac{-|S|}{|S|+|W|}, \quad \gamma = 0.$$

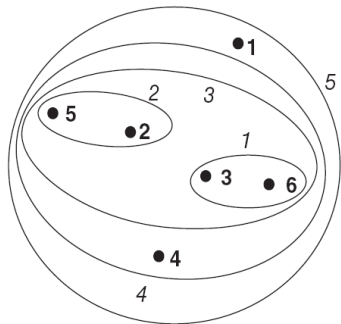
Проблема выбора

Какая функция расстояния лучше?

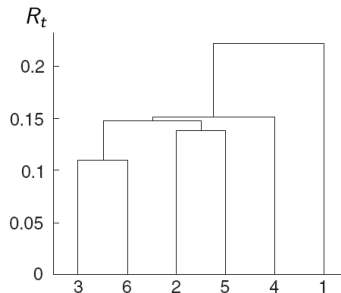
Визуализация кластерной структуры

1. Расстояние ближнего соседа:

Диаграмма вложения



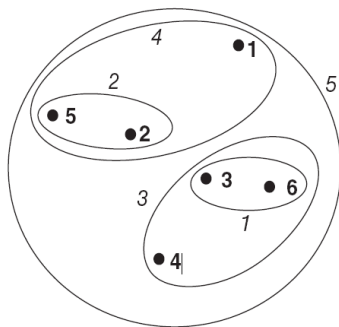
Дендрограмма



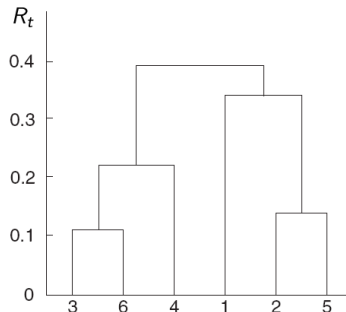
Визуализация кластерной структуры

2. Расстояние дальнего соседа:

Диаграмма вложения



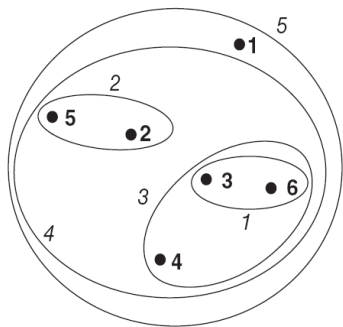
Дендрограмма



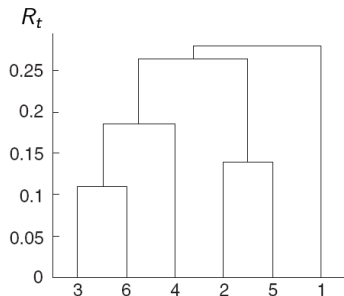
Визуализация кластерной структуры

3. Групповое среднее расстояние:

Диаграмма вложения



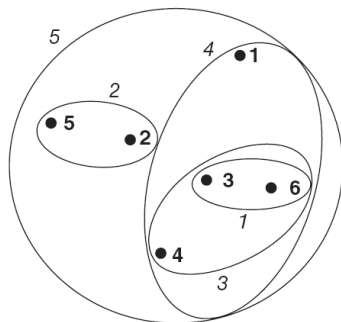
Дендрограмма



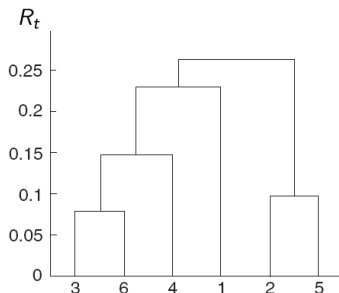
Визуализация кластерной структуры

5. Расстояние Уорда:

Диаграмма вложения

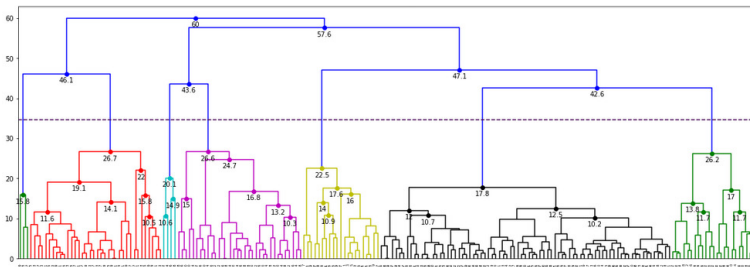


Дендрограмма



Дендрограмма — визуализация иерархической кластеризации

- Кластеры группируются вдоль горизонтальной оси
- По вертикальной оси откладываются расстояния R_t
- Расстояния возрастают, линии нигде не пересекаются
- Верхние уровни различимы лучше, чем нижние
- Уровень отсечения определяет число кластеров



Основные свойства иерархической кластеризации

- *Монотонность*: дендрограмма не имеет самопересечений, при каждом слиянии расстояние между объединяемыми кластерами только увеличивается: $R_2 \leq R_3 \leq \dots \leq R_\ell$.
- *Сжимающее расстояние*: $R_t \leq \rho(\mu_U, \mu_V), \forall t$.
- *Растягивающее расстояние*: $R_t \geq \rho(\mu_U, \mu_V), \forall t$

Теорема (Миллиган, 1979)

Кластеризация монотонна, если выполняются условия

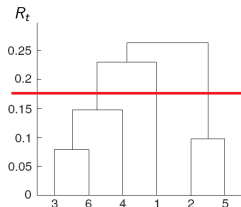
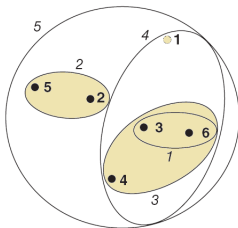
$$\alpha_U \geq 0, \alpha_V \geq 0, \alpha_U + \alpha_V + \beta \geq 1, \min\{\alpha_U, \alpha_V\} + \gamma \geq 0.$$

R^C не монотонно; R^b , R^A , R^r , R^y — монотонны.

R^b — сжимающее; R^A , R^y — растягивающие;

Рекомендации и выводы

- рекомендуется пользоваться расстоянием Уорда R^y ;
- обычно строят несколько вариантов и выбирают лучший визуально по дендрограмме;
- определение числа кластеров — по максимуму $|R_{t+1} - R_t|$, тогда результирующее множество кластеров $:= C_t$.



Метод частичного обучения self-training (1965-1970)

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

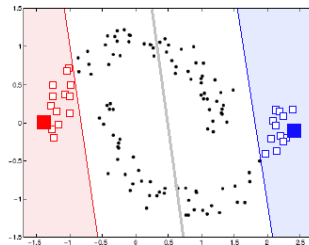
Псевдоотступ — степень уверенности классификации $a_i = a(x_i)$:

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

Алгоритм self-training — обёртка (wrapper) над методом μ :

```

Z := Xk;
пока |Z| < ℓ
    a := μ(Z);
    Δ := {xi ∈ U \ Z | Mi(a) ≥ M0};
    ai := a(xi) для всех xi ∈ Δ;
    Z := Z ∪ Δ;
    
```



M_0 можно определять, например, из условия $|\Delta| = 0.05 |U|$

Метод частичного обучения co-training (Blum, Mitchell, 1998)

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

- либо разные наборы признаков;
- либо разные парадигмы обучения (inductive bias);
- либо разные источники данных $X_1^{k_1}$, $X_2^{k_2}$.

$Z_1 := X_1^{k_1}$; $Z_2 := X_2^{k_2}$;

пока $|Z_1 \cup Z_2| < \ell$

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

$a_i := a_1(x_i)$ для всех $x_i \in \Delta_1$;

$Z_2 := Z_2 \cup \Delta_1$;

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

$a_i := a_2(x_i)$ для всех $x_i \in \Delta_2$;

$Z_1 := Z_1 \cup \Delta_2$;

Метод частичного обучения co-learning (deSa, 1993)

Пусть $\mu_t: X^k \rightarrow a_t$ — 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 $M_i(a)$ — степень уверенности классификации $a(x_i)$.

```

Z := Xk;
пока |Z| < ℓ
    a := μ(Z);
    Δ := {xi ∈ U \ Z | Mi(a) ≥ M0};
    ai := a(xi) для всех xi ∈ Δ;
    Z := Z ∪ Δ;
    
```


Общий оптимизационный подход к задачам SSL

Дано:

$X^k = \{x_1, \dots, x_k\}$ — размеченные объекты (labeled data);
 $\{y_1, \dots, y_k\}$

$U = \{x_{k+1}, \dots, x_\ell\}$ — неразмеченные объекты (unlabeled data).

Найти: модель классификации $a(x, w)$

Критерий одновременной классификации и кластеризации:

$$\underbrace{\sum_{i=1}^k \mathcal{L}(a(x_i, w), y_i)}_{\text{классификация}} + \lambda \underbrace{\sum_{i=1}^{\ell} \mathcal{L}_U(a(x_i, w))}_{\text{кластеризация}} \rightarrow \min_w$$

где $\mathcal{L}(a, y)$ — функция потерь классификации,

$\mathcal{L}_U(a)$ — функция потерь для неразмеченных данных

Напоминание: SVM для двухклассовой классификации

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:

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

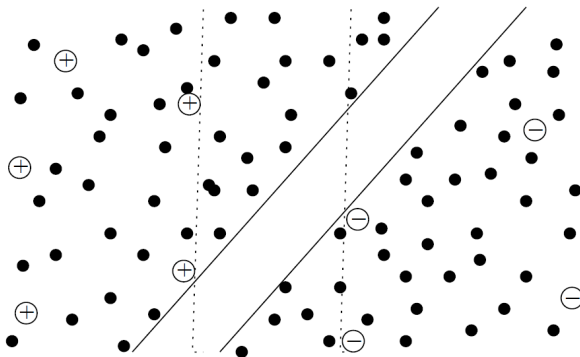
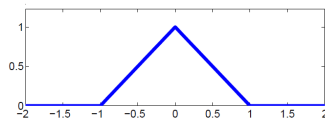
Функция $\mathcal{L}(M) = (1 - M)_+$ штрафует за уменьшение отступа.

Идея!

Функция $\mathcal{L}_U(M) = (1 - |M|)_+$ 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.



Метод частичного обучения Transductive SVM

Обучение весов w, w_0 по частично размеченной выборке:

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

Достоинства и недостатки TSVM:

- ⊕ как и в обычном SVM, можно использовать ядра;
- ⊕ имеются эффективные реализации для больших данных;
- ⊖ задача невыпуклая, методы оптимизации сложнее;
- ⊖ решение неустойчиво, если нет области разреженности;
- ⊖ требуется настройка двух параметров C, γ ;

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

Напоминание: многоклассовая логистическая регрессия

Линейный классификатор по конечному множеству классов $|Y|$:

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

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:

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

Оптимизация $Q(w)$ — методом стохастического градиента, по $n|Y|$ -мерному вектору параметров $w = (w_y : y \in Y)$.

Согласование модели на размеченных и неразмеченных данных

Теперь учтём неразмеченные данные $U = \{x_{k+1}, \dots, x_\ell\}$.

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^k :

$$\hat{p}_j(y) = \frac{\sum_{i=1}^k b_j(x_i) [y_i = y]}{\sum_{i=1}^k b_j(x_i)};$$

2) оценка по неразмеченным данным U и вероятностной модели:

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

Максимизируем правдоподобие вероятностной модели $p_j(y|w)$, приближающей эмпирическое распределение $\hat{p}_j(y)$.

Построение регуляризатора (XR, eXpectation Regularization)

Логарифм правдоподобия модели классов по j -му признаку:

$$L_j(w) = \sum_{y \in Y} \hat{p}_j(y) \log p_j(y|w) \rightarrow \max_w.$$

Регуляризация критерия $Q(w)$ суммой log-правдоподобий $L_j(w)$ с коэффициентом регуляризации γ :

$$\begin{aligned} Q(w) + \gamma \sum_{j=1}^m L_j(w) &= \sum_{i=1}^k \log P(y_i|x_i, w) - \frac{1}{2C} \sum_{y \in Y} \|w_y\|^2 + \\ &+ \gamma \sum_{j=1}^m \sum_{y \in Y} \hat{p}_j(y) \log \left(\sum_{i=k+1}^{\ell} b_j(x_i) P(y|x_i, w) \right) \rightarrow \max_w. \end{aligned}$$

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

Особенности метода XR (eXpectation Regularization)

- ❶ XR — это SSL, но это вообще не кластеризация!
- ❷ Оптимизация методом стохастического градиента.
- ❸ Возможные варианты задания переменных b_j :
 - $b_j(x) \equiv 1$, тогда $P(y|b_j(x) = 1)$ — априорная вероятность класса y (label regularization)
 - подходит для задач с несбалансированными классами;
 - $b_j(x) = [\text{термин } j \text{ содержится в тексте } x]$
 - подходит для задач классификации текстов.
- ❹ метод слабо чувствителен к выбору C и γ ,
- ❺ устойчив к погрешностям оценивания $\hat{p}_j(y)$,
- ❻ не требует большого числа размеченных объектов k ,
- ❼ хорошо подходит для категоризации текстов.

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

Резюме в конце лекции

- Кластеризация — это обучение без учителя, некорректно поставленная задача, существует много оптимизационных и эвристических алгоритмов кластеризации
- DBSCAN — популярный быстрый алгоритм кластеризации
- Задача SSL занимает промежуточное положение между классификацией и кластеризацией, но не сводится к ним.
- Методы кластеризации легко адаптируются к SSL путём введения ограничений (constrained clustering).
- Адаптация методов классификации чаще реализуется через оптимизацию взвешенной суммы двух критериев.