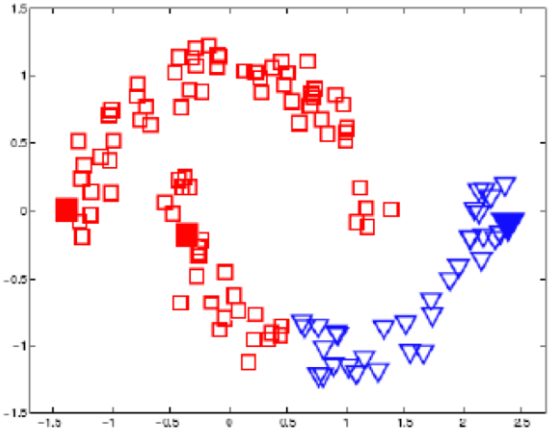
Лекция 18: Частичное обучение

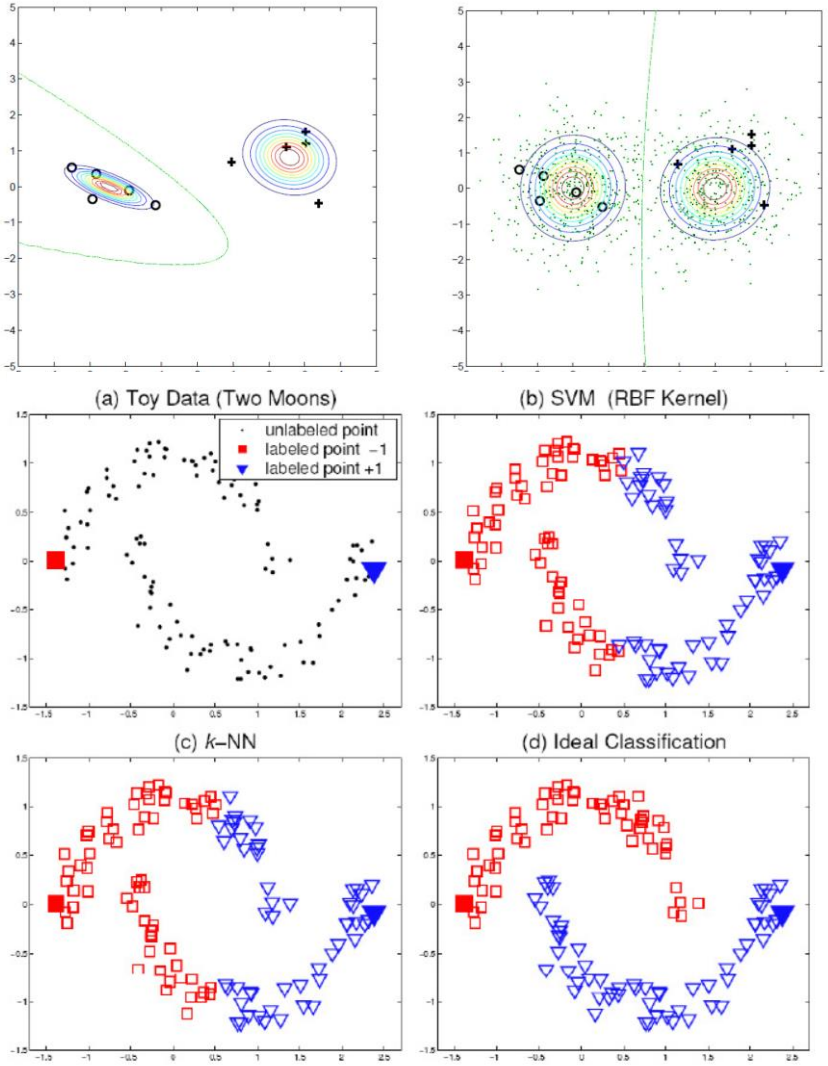
Постановка задачи частичного обучения (SSL)

- Дано:
  - множество объектов X, множество классов Y;
  - $X^k = \{x_1, \dots, x_k\}$ – размеченные объекты (labeled data);
    $\{\boldsymbol{y_1}, \dots, \boldsymbol{y_k}\}$
  - $U = \{x_{k+1}, \dots, x_l\}$ – неразмеченные объекты (unlabeled data).
- Два варианта постановки задачи:
  - Частичное обучение (semi-supervised learning): построить алгоритм классификации $\boldsymbol{a}: \boldsymbol{X} \to \boldsymbol{Y}$.
  - Трансдуктивное обучение (transductive learning): зная **все** $\{\boldsymbol{x_{k+1}}, .., \boldsymbol{x_l}\}$, получить метки $\{a_{k+1}, \dots, a_l\}$.
- Типичные приложения:
  - Классификация и каталогизация текстов, изображений, и т.п.
  - Применяется везде, где разметки мало или она дорогая

Отличия SSL от кластеризации и классификации

- Разные результаты прогноза, если восстанавливать плотности классов по всем или только по размеченным
- Классификация не учитывает кластерную структуру неразмеченных данных
- Кластеризация не учитывает приоритет разметки





Основные подходы к SSL

- Кластеризация с учетом ограничений разметки:
  - не объединять в кластер объекты из разных классов
- Последовательная доразметка:
  - Последовательное дообучение на своих наиболее уверенных прогнозах (self-training)
  - Последовательное дообучение на чужих наиболее уверенных прогнозах, включая ансамбли (co-training, co-learning)
- Вероятностные модели:
  - Распространение меток– пересчет распределения меток классов на основе графа связей «сходства» наблюдений (label propagation)
  - Параметрическая оценка распределений классов с учетом неразмеченных примеров
- Оптимизационный подход:
  - Включение в целевую функцию потерь прогнозирования и потерь некомпактной кластеризации: $Q_{SSL} = Q_{class} + \gamma Q_{cluster} \to \min$

Метод K-средних для частичного обучения

- Модификация алгоритма Ллойда
- При наличии размеченных объектов $\{x_1, .., x_k\}$
  - Вход: $X^l, K = |Y|$;
  - Выход: центры кластеров $\mu_a, a \in Y$;
  - $\mu_a :=$ начальное приближение центров, для всех $a \in Y$;
  - Повторять

    Отнести каждый $\boldsymbol{x_i} \in \boldsymbol{U}$ к ближайшему центру:

    $$a_i := \arg\min_{a \in Y} \|x_i - \mu_a\|, i = \boldsymbol{k} + \boldsymbol{1}, \ldots, \boldsymbol{l}$$

    Вычислить новые положения центров:

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

  - Пока a_i не перестанут изменяться.

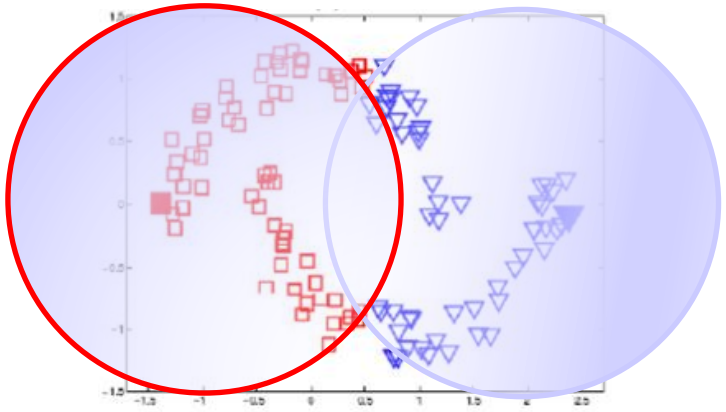
Алгоритм Ланса-Уильямса для частичного обучения

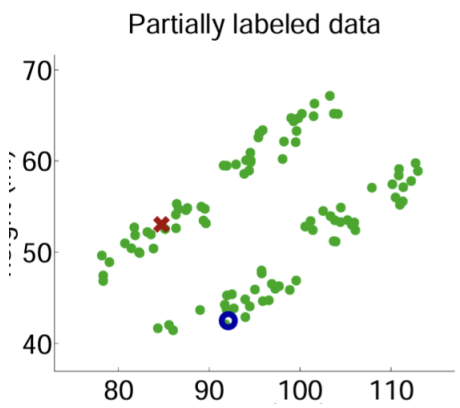
- Алгоритм иерархической кластеризации (Ланс, Уильямс, 1967):
- Итеративный пересчет расстояний R_{UV} между кластерами U, V.
- $C_1 := \{\{x_1\}, \ldots, \{x_l\}\}$ – все кластеры 1-элементные;
- $R_{\{x_i\}\{x_j\}} := \rho(x_i, x_j)$ – расстояния между ними;
- Для всех $t = 2, \ldots, l$ (t – номер 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:

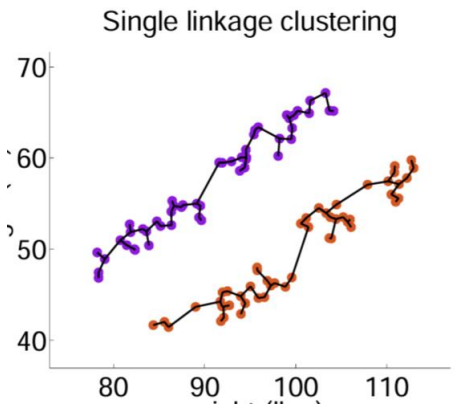
$$R_{ws} := \alpha_U R_{US} + \alpha_V R_{VS} + \beta R_{UV} + \gamma |R_{US} - R_{VS}|$$

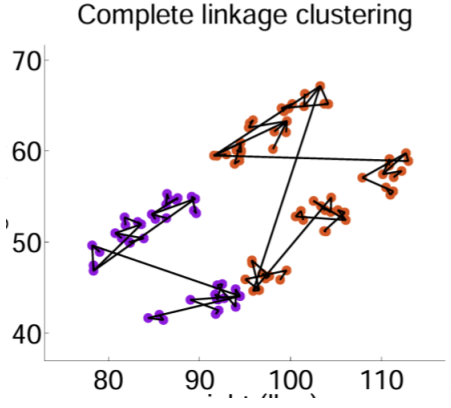
Недостатки SSL на основе кластеризации с учетом разметки

- Все недостатки методов кластеризации проявляются сильнее:
  - Для кластеризации на основе прототипов ожидаются сферические (или эллиптические) формы классов
  - Нужно угадать с числом кластеров или брать «с запасом», но сколько?
  - Для иерархической кластеризации важно межкластерное расстояние







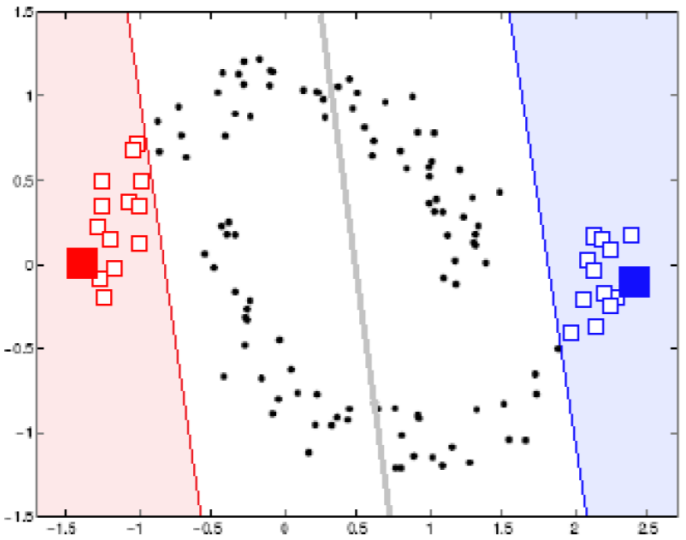


Метод частичного обучения self-training (1965–1970)

- Пусть $\mu: X^k \to a$ – метод обучения классификации;
- Классификаторы имеют вид $a(x) = argmax_{y \in Y} \Gamma_y(x)$;
- 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 – обертка (wrapper) над методом μ:
  - $Z := X^k$;
  - Пока $|Z| < l$
    - $a := \mu(Z)$
    - $\Delta := \{x_i \in U \setminus Z | M_i(a) \geq \boldsymbol{M_0}\}$
    - $y_i := a(x_i)$ для всех $x_i \in \Delta$
    - $Z := Z \cup \Delta$
  - M_0 можно определять, например, из условия $|\Delta| = 0.05|U|$



Метод частичного обучения co-training (Blum, Mitchell, 1990)

- Пусть $\mu_1 : X^{k_1} \to a_1, \mu_2 : X^{k_2} \to a_2$ – 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 $|Z_1 \cup Z_2| < l$
  - $a_1 := \mu_1(Z_1);\ \Delta_1 := \{x_i \in U \backslash Z_1 \backslash Z_2 | M_i(a_1) \geq \boldsymbol{M_{01}}\};$
  - $y_i := a_1(x_i)$ для всех $x_i \in \Delta_1;$
  - $Z_2 := Z_2 \cup \Delta_1;$
  - $a_2 := \mu_2(Z_2);\ \Delta_2 := \{x_i \in U \backslash Z_1 \backslash Z_2 | M_i(a_2) \geq \boldsymbol{M_{02}}\};$
  - $y_i := a_2(x_i)$ для всех $x_i \in \Delta_2;$
  - $Z_1 := Z_1 \cup \Delta_2;$

Метод частичного обучения co-learning (deSa, 1993)

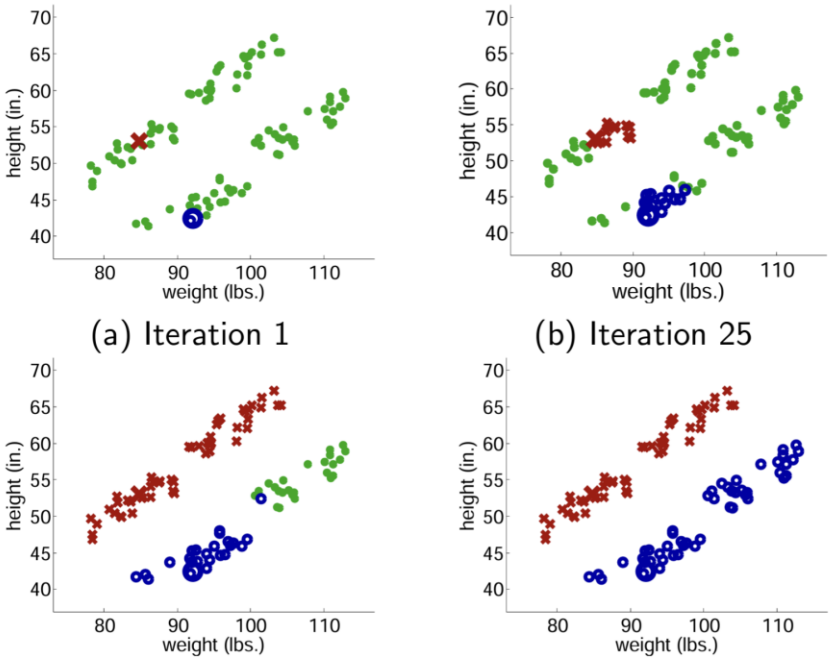
- Пусть $\mu_t: X^k \to a_t$ – разные методы обучения, $t = 1, \dots, T$.
- Алгоритм co-learning – это self-training для композиции – простого голосования базовых алгоритмов $a_1, .., a_T$:

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

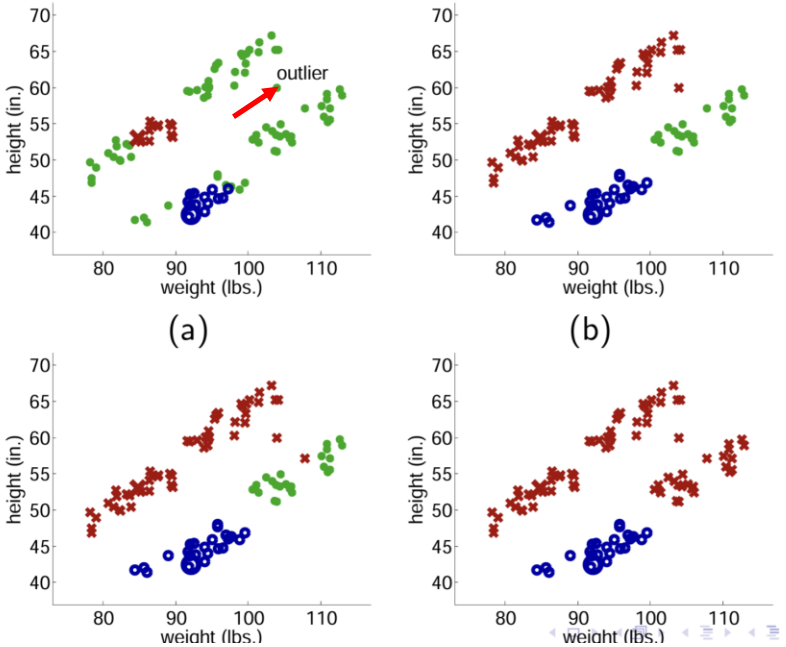
- Тогда $M_i(a)$ – степень уверенности классификации $a(x_i)$.
- $Z := X^k$;
- Пока $|Z| < l$
  - $a := \mu(Z)$;
  - $\Delta := \{x_i \in U \backslash Z | M_i(a) \geq \boldsymbol{M_0}\}$;
  - $y_i := a(x_i)$ для всех $x_i \in \Delta$;
  - $Z := Z \cup \Delta$

Self- и co- training не всегда работают

Self-training 1NN – все Ok



Self-training 1NN + 1 выброс - все сломалось



Общий оптимизационный подход к задачам SSL

- Дано:
  - $X^k = \{x_1, \dots, x_k\}$ – размеченные объекты (labeled data);
    $\{y_1, \dots, y_k\}$
  - $U = \{x_{k+1}, \dots, x_l\}$ – неразмеченные объекты (unlabeled data).
- Найти: модель классификации $a(x, w)$
- Критерий одновременной классификации и кластеризации:

$$\underbrace{\sum_{i=1}^{k} \mathcal{L}(a(x_i, w), y_i)}_{\text{классификация}} + \lambda \underbrace{\sum_{i=1}^{l} \mathcal{L}_u(a(x_i, w))}_{\text{кластеризация}} \to \min_{w}$$

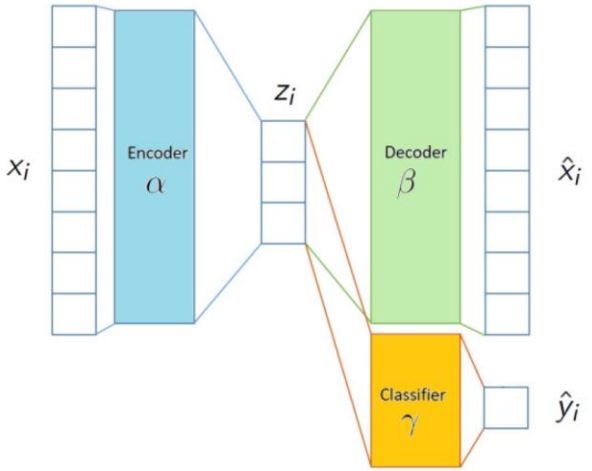
  - Где $\mathcal{L}(a, y)$ – функция потерь классификации,
  - $\mathcal{L}_U(a)$ – функция потерь для неразмеченных данных.

Автокодировщики для частичного обучения

- Данные:
  - размеченные $(x_i, y_i)_{i=1}^{k}$, неразмеченные $(x_i)_{i=k+1}^{l}$
- Совместное обучение кодировщика, декодировщика и предсказательной модели (классификации, регрессии или др.):

$$\sum_{i=1}^{l} \mathcal{L}(g(f(x_i, \alpha), \beta), x_i) + \lambda \sum_{i=1}^{k} \tilde{\mathcal{L}}(\hat{y}(f(x_i, \alpha), \gamma), y_i) \rightarrow \min_{\alpha, \beta, \gamma}$$

  - $z_i = f(x_i, \alpha)$ – кодировщик
  - $\hat{x}_i = g(z_i, \beta)$ – декодировщик
  - $\hat{y}_i = \hat{y}(z_i, \gamma)$ – предиктор
- Функции потерь:
  - $\mathcal{L}(\hat{x}_i, x_i)$ – реконструкция
  - $\tilde{\mathcal{L}}(\hat{y}_i, y_i)$ – предсказание



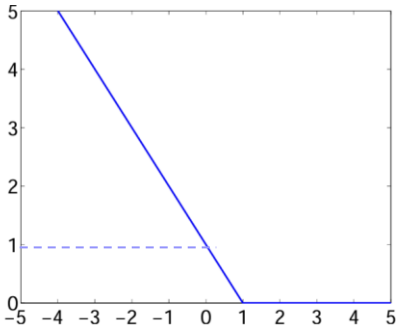
Функция потерь для трансдуктивного SVM

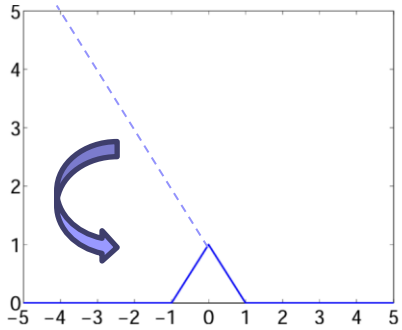
- Функция потерь $L = (1 - |M|)_+$:
  - штрафует за попадание объекта **внутрь** разделяющей полосы
- Обучение весов w, w_0 по частично размеченной выборке:

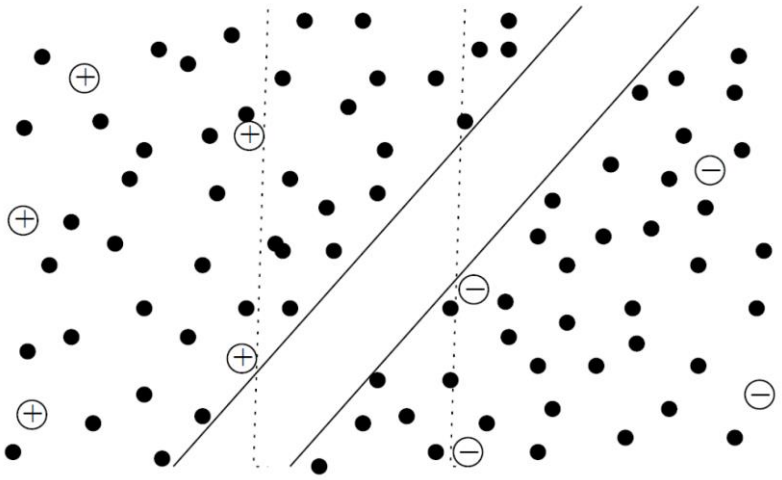
$$Q = \sum_{i=1}^{k} \big(1 - M_i(w, w_0)\big)_+ + \frac{1}{2C}\|w\|^2 +$$

$$+\boldsymbol{\gamma} \sum_{\boldsymbol{i=k+1}}^{\boldsymbol{l}} (\mathbf{1} - |\boldsymbol{M_i(w, w_0)}|)_+ \rightarrow min_{w,w_0}$$

- Достоинства TSVM:
  - как и в обычном SVM, можно использовать ядра;
  - имеются эффективные реализации для больших данных

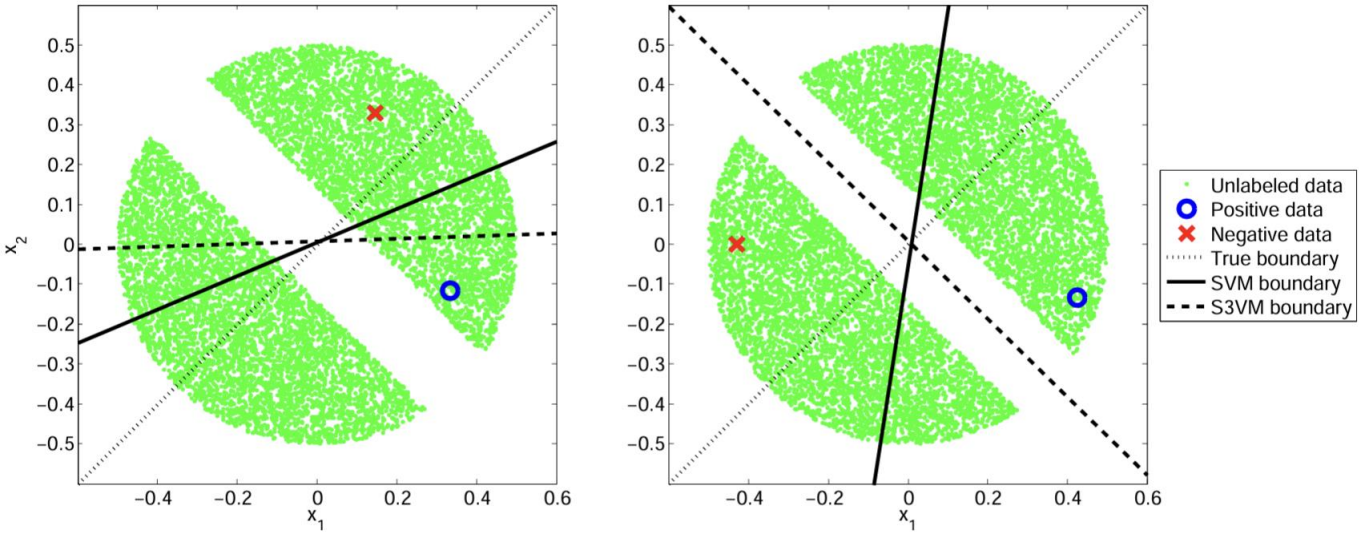






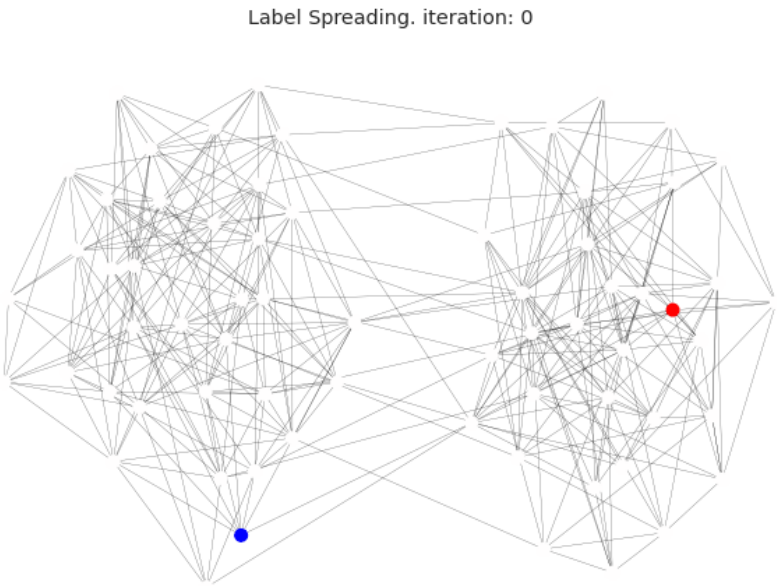
Проблемы TSVM

- задача невыпуклая - методы оптимизации сложнее и неединственное решение;
- требуется настройка двух параметров регуляризации C, γ
- решение неустойчиво или неверно, если нет области разреженности между классами;



Распространение меток

- Общая идея подхода (есть много разных версий):
  - Графовая модель представления всех данных (и размеченных, и неразмеченных), где узлы – наблюдения, ребра – оценка сходства без учета разметки
  - Разметка на основе случайного блуждания (random walk), где вероятность перехода задаётся, пропорционально «весу» ребра - сходству
  - Метка размеченного наблюдения не меняется, а для неразмеченного выбирается голосованием или пропорционально сходству всех уже размеченных ближайших соседей



Распространение меток

- Дано:
  - $X^k = \{x_1, \dots, x_k\}$, $\{y_1, \dots, y_k\}$– размеченные объекты (labeled data);
  - $U = \{x_{k+1}, \dots, x_l\}$ – неразмеченные объекты (unlabeled data), обычно имеет смысл применять распространение меток при $k \ll l$;
  - Y – различные метки классов, $A^{(0)}$ - матрица начальной разметки $l \times |Y|$, где $A_{ij}^{(0)} = 1$ ттт, когда $y_i = j$ для $i \le k$, иначе $A_{ij}^{(0)} = 0$
  - мера близости двух любых примеров (не зависит от разметки), обычно на основе RBF или другого ядра: $w_{ij} = K(\rho(x, x_i)^2/h)$, чем разреженней матрица $l \times l$ ядра тем лучше;
  - $\{w_{ij}\}$ задает матрицу $l \times l$ переходов $T_{ij} = P(i \to j) = w_{ij} / \sum_{s=1}^{l} w_{sj}$
- Алгоритм в цикле находит матрицу разметки $A^{(t)}: X \to Y$:
  - Пересчет меток: $A^{(t)} = \alpha T A^{(t-1)} + (1 - \alpha) A^{(0)}$, $0 < \alpha < 1$
  - Нормализация $Y^{(t)}$: обычно фиксируют размеченные метки $A_{x \notin U}^{(t)} = A_{x \notin U}^{(0)}$, остальные нормируют ($\sum_{s=1}^{|Y|} A_{is}^{(t)} = 1$) или выбирает по максимальной уверенности в прогнозе ($y_{i>k} = \operatorname{argmax}_j [A_{ij}^{(t)}]$)

Пример

```python
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
from sklearn import datasets
from sklearn.svm import SVC
from sklearn.semi_supervised import LabelSpreading
from sklearn.semi_supervised import SelfTrainingClassifier

iris = datasets.load_iris()

X = iris.data[:, :2]
y = iris.target

# step size in the mesh
h = .02

rng = np.random.RandomState(0)
y_rand = rng.rand(y.shape[0])
y_30 = np.copy(y)
y_30[y_rand < 0.3] = -1  # set random samples to be unlabeled
y_50 = np.copy(y)
y_50[y_rand < 0.5] = -1
# we create an instance of SVM and fit out data. We do not scale our
# data since we want to plot the support vectors
ls30 = (LabelSpreading().fit(X, y_30), y_30, 'Label Spreading 30% data')
ls50 = (LabelSpreading().fit(X, y_50), y_50, 'Label Spreading 50% data')
ls100 = (LabelSpreading().fit(X, y), y, 'Label Spreading 100% data')

# the base classifier for self-training is identical to the SVC
base_classifier = SVC(kernel='rbf', gamma=.5, probability=True)
st30 = (SelfTrainingClassifier(base_classifier).fit(X, y_30),
        y_30, 'Self-training 30% data')
st50 = (SelfTrainingClassifier(base_classifier).fit(X, y_50),
        y_50, 'Self-training 50% data')

rbf_svc = (SVC(kernel='rbf', gamma=.5).fit(X, y), y, 'SVC with rbf kernel')

# create a mesh to plot in
x_min, x_max = X[:, 0].min() - 1, X[:, 0].max() + 1
y_min, y_max = X[:, 1].min() - 1, X[:, 1].max() + 1
xx, yy = np.meshgrid(np.arange(x_min, x_max, h),
                     np.arange(y_min, y_max, h))
```

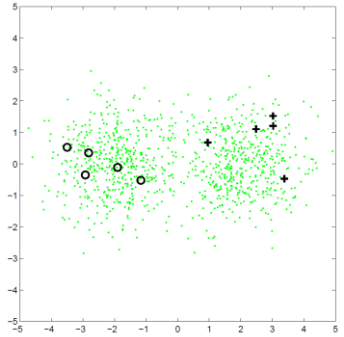
```python
color_map = {-1: (1, 1, 1), 0: (1, 0, 0), 1: (0.2, 0.2, 0.6), 2: (0.7, 0.7, 0.7)}

classifiers = (ls30, st30, ls50, st50, ls100, rbf_svc)
for i, (clf, y_train, title) in enumerate(classifiers):

    plt.subplot(3, 2, i + 1)
    Z = clf.predict(np.c_[xx.ravel(), yy.ravel()])

    Z = Z.reshape(xx.shape)
    plt.contourf(xx, yy, Z, cmap="Pastel1")
    plt.axis('off')

    colors = [color_map[y] for y in y_train]
    plt.scatter(X[:, 0], X[:, 1], c=colors, edgecolors='black')

    plt.title(title)

plt.suptitle("Unlabeled points are colored white", y=0.1)
plt.show()
```

Вероятностный (байесовский) SSL

- Для размеченной выборки (если число компонент смеси = числу классов):
  - Модель: $p(x, y|\theta) = P(y|\theta)p(x|y, \theta)$
  - Задача максимизации правдоподобия по θ:

$$\log\big(p(X_l, Y_l|\theta)\big) = \sum_l \log\big(P(y_i|\theta)p(x_i|y_i, \theta)\big) \to \max_\theta$$

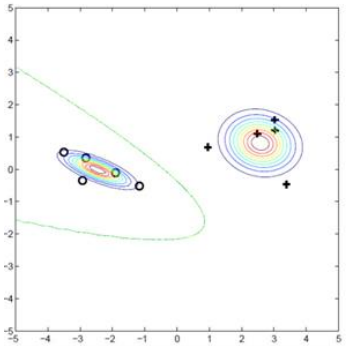
  - Классификация $P(y|x, \theta) = \frac{p(x,y|\theta)}{\sum_{y'} p(x,y'|\theta)}$

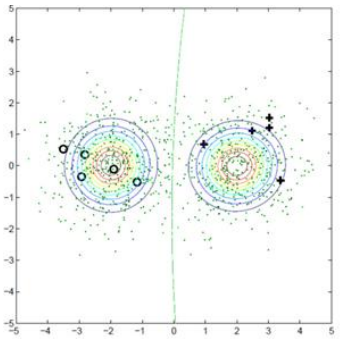


- Для частично размеченной выборки:
  - $X^k = \{x_1, \dots, x_k\}, \{y_1, \dots, y_k\}$– размеченные объекты;
  - $U = \{x_{k+1}, \dots, x_l\}$ – неразмеченные объекты;
  - Задача максимизации правдоподобия по θ:

$$\log\big(p(X_k, Y_k, U|\theta)\big) = \sum_{i=1}^{k} \log\big(P(y_i|\theta)p(x_i|y_i, \theta)\big) +$$

$$+ \sum_{\boldsymbol{i=k+1}}^{\boldsymbol{l}} \boldsymbol{\log\left(\sum_j P(j|\theta)p(x_i|j, \theta)\right)} \to \max_\theta$$





SSL GMM (Gaussian Mixture Model)

- Вход:
  - $X^k = \{x_1, \dots, x_k\}, \{y_1, \dots, y_k\}$– размеченные объекты (labeled data);
  - $U = \{x_{k+1}, \dots, x_l\}$ – неразмеченные объекты (unlabeled data);
- Выход: $\left(w_j, \boldsymbol{\mu_j}, \boldsymbol{\Sigma_j}\right)_{j=1}^{|Y|}$ – параметры смеси гауссиан;
- Инициализировать $\left(\boldsymbol{\mu_j}, \boldsymbol{\Sigma_j}\right)_{j=1}^{|Y|}, w_j := \frac{1}{|Y|}$
- Повторять:
  - **E-шаг** (expectation): для $x_i \notin U$ $g_{ij} := 1$ если $y_i = j$, иначе $g_{ij} := 0$

    для всех $x_i \in U,\ j = 1, \dots, |Y|$:

$$g_{ij} := p(y_i = j | x_i) \frac{w_j \boldsymbol{N}(\boldsymbol{x_i}; \boldsymbol{\mu_j}, \boldsymbol{\Sigma_j})}{\sum_{s=1}^{|Y|} w_s \boldsymbol{N}(\boldsymbol{x_i}; \boldsymbol{\mu_s}, \boldsymbol{\Sigma_s})}$$

  - **M-шаг** (maximization): для всех $j = 1, \dots, |Y|$

$$w_j := \frac{1}{l}\sum_{i=1}^{l} g_{ij}\,,\ \mu_j := \frac{1}{l w_j}\sum_{i=1}^{l} g_{ij} x_i\,,\ \Sigma_j := \frac{1}{l w_j}\sum_{i=1}^{l} g_{ij}\left(x_i - \mu_j\right)\left(x_i - \mu_j\right)^T$$

- Пока (w_j, μ_j, Σ_j) и / или g_{ij} не сошлись.

Особенности SSL EM

- SSL EM – специальный случай co-training
- Чтобы контролировать важность разметки можно использовать регуляризацию $(0 < \gamma < 1)$:

$$\log\big(p(X_k, Y_k, U|\theta)\big) = \sum_{i=1}^{k} \log\big(p(y_i|\theta)p(x_i|y_i,\theta)\big) +$$

$$+\boldsymbol{\gamma} \sum_{i=k+1}^{l} \log\left(\sum_j p(j|\theta)p(x_i|j,\theta)\right) \to \max_\theta$$

- Зачастую надо брать компонент смеси больше чем классов
- В целом не всегда работает: