ТЕХНОСФЕРА

# Лекция 6
# Semi-supervised Learning

Владимир Гулин

10 марта 2018 г.

# План лекции

# Мотивация

## Проблемы применения обучения с учителем на практике

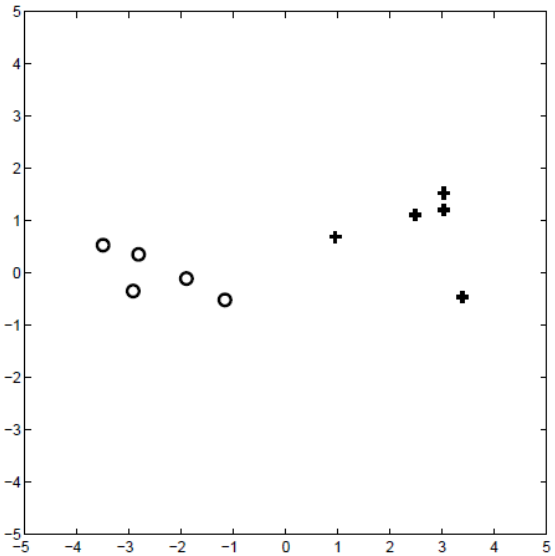
- В реальной жизни размеченных данных крайне мало
- Неразмеченных очень много
- Для хороших моделей нужно много данных
- Много данных долго собирать
- Много данных стоят дорого
- Чаще всего эти данные низкого качества
- Одно из решений проблемы активное обучение

## Вопрос:

- Можем ли мы как-то использовать неразмеченные данные для обучения?

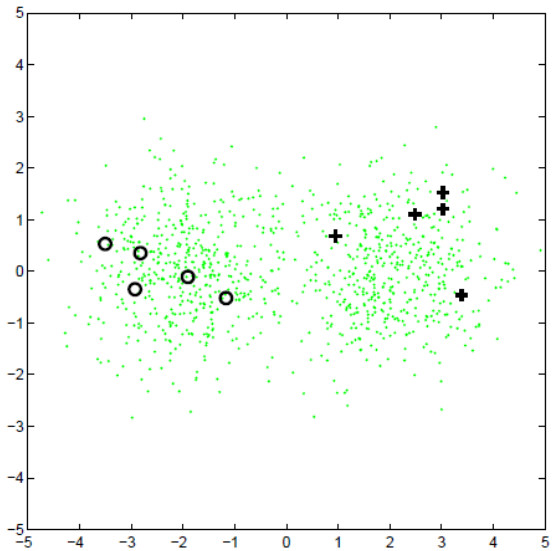
# Мотивация

Где провести границу между классами?

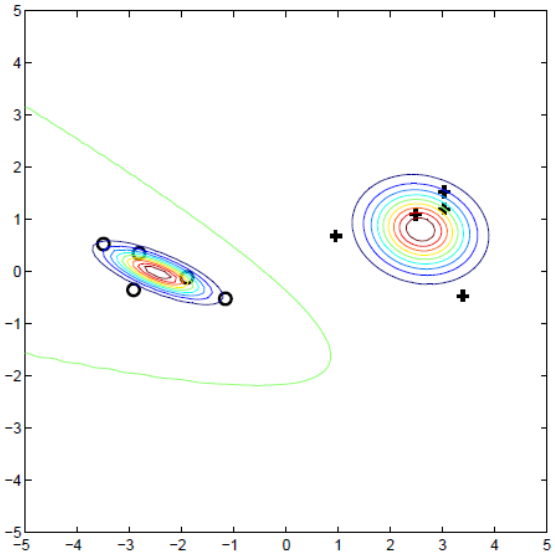


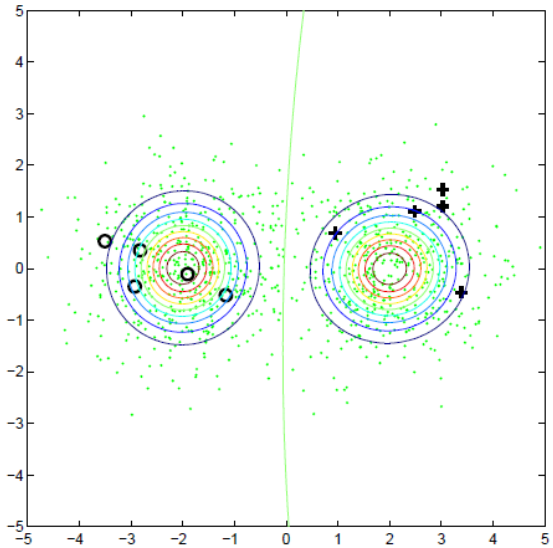
# Мотивация

Где провести границу между классами?



# Мотивация



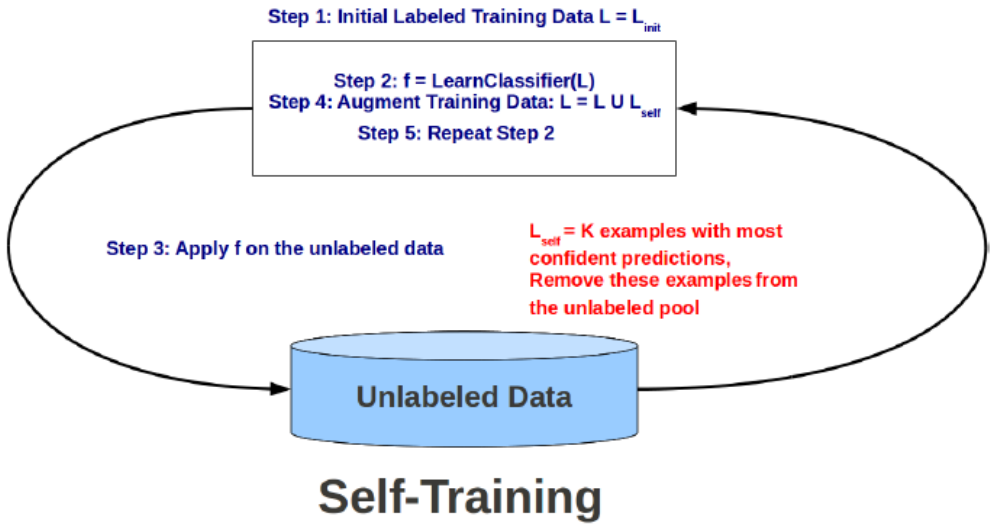



# Semi-supervized learning

- **Дано:** Множество размеченных данных $\mathcal{L} = \{\mathbf{x}_i, y_i\}_{i=1}^{N_L}$, множество неразмеченных данных $\mathcal{U} = \{\mathbf{x}_j\}_{j=1}^{N_U}$
- Обучаем алгоритм $a(\mathbf{x})$ для предсказания любой точки $\mathbf{x}_0 \in \mathcal{X}$
- Это называется задачей индуктивного обучения
- Задача трансдуктивного обучения: Множество размеченных данных $\mathcal{L} = \{\mathbf{x}_i, y_i\}_{i=1}^{N_L}$, множество неразмеченных данных $\mathcal{U} = \{\mathbf{x}_j\}_{j=1}^{N_U}$.
- Все возможные внешние данные находятся в $\mathcal{U}$
- Все точки из $\mathcal{U}$ доступны в момент обучения

# Простой алгоритм: Self training

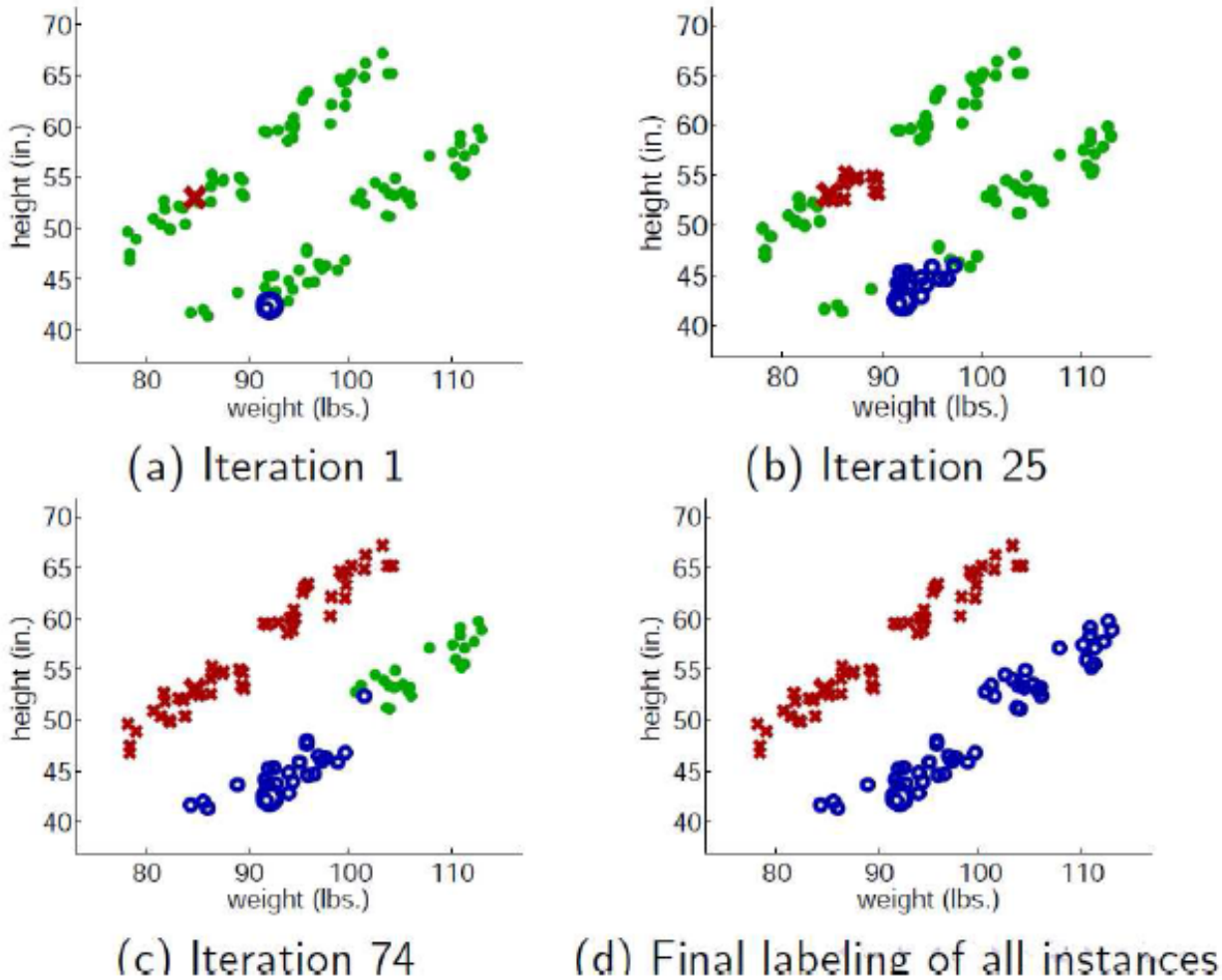
- **Дано:** Небольшое количество размеченных данных
- **Идея:** Обучаться, предсказывать и переобучаться, используя свои собственные предсказания, в которых наиболее уверены




- Можно использовать с любым алгоритм обучения с учителем. Неплохо работает на практике
- Если в разметке есть ошибки, то они будут многократно усилены

# Self training: Хороший случай

- Базовый классификатор: KNN

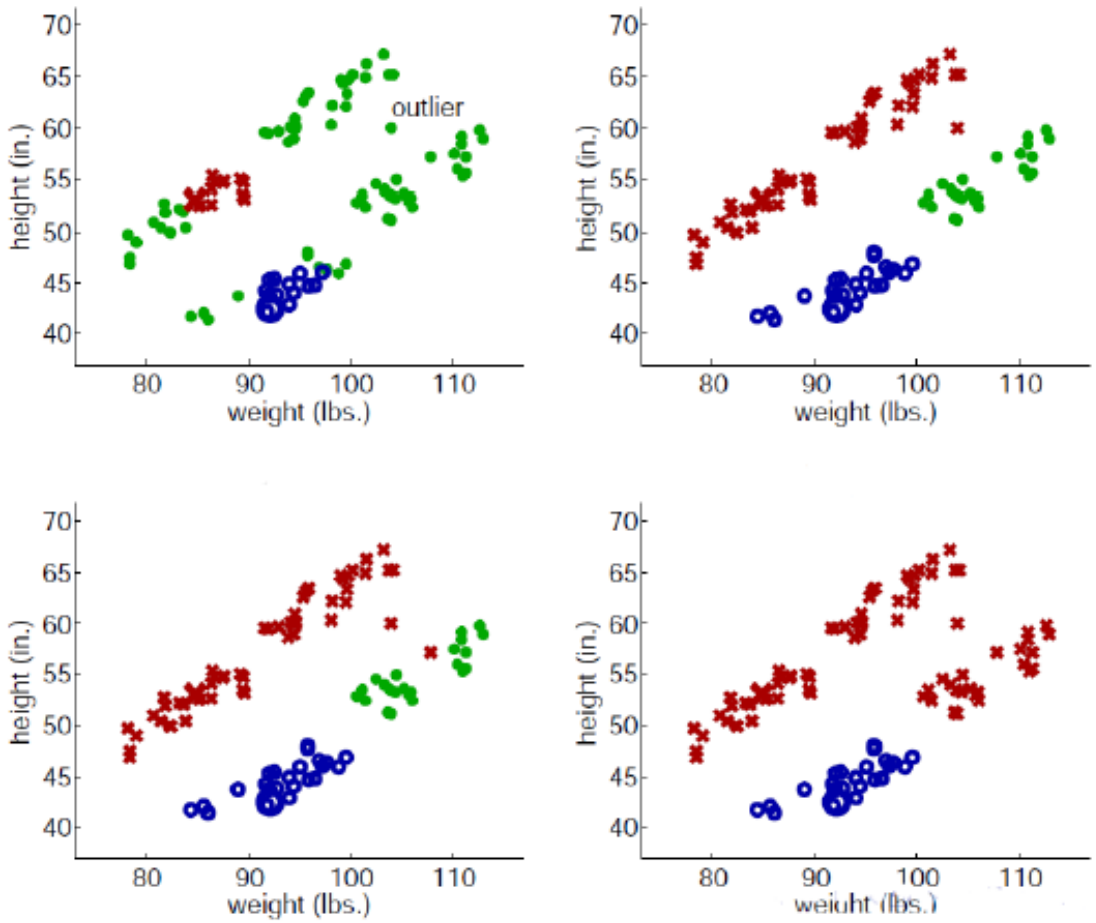



(a) Iteration 1 (b) Iteration 25

(c) Iteration 74 (d) Final labeling of all instances

# Self training: Плохой случай

- Базовый классификатор: KNN
- Если в данных есть выбросы, то все может сломаться



# Expectation Maximization Approach

- Размеченное $\mathcal{L}$ и неразмеченное $\mathcal{U}$ множества
- Expectation Maximization based Semi-Supervised learning
  - Построить начальную модель, используя только размеченные данные $\mathcal{L}$ (MLE)
$$\theta = TrainModel(\mathcal{L})$$
  - Использовать данную модель для оценки метки класса для каждого $\mathbf{x}_j \in \mathcal{U}$ (считаем ожидание метки класса) Для бинарной классификации $\{-1, +1\}$
$$E[y_j] = +1 \cdot P(y_j = +1|\theta, \mathbf{x}_j) + (-1) \cdot P(y_j = -1|\theta, \mathbf{x}_j)$$
  - Перестроить модель используя $\mathcal{L}$ и $\mathcal{U}$ с оценками меток классов
  - Использовать новую модель $\theta$ для вычисления оценок меток $E[y]$ на $\mathcal{U}$
  - Повторять пока не сойдется
- Общая схема, которая может быть использована с любой вероятностной моделью

# Co-training

- Размеченное $\mathcal{L}$ и неразмеченное $\mathcal{U}$ множества
- Два существенно различных метода обучения $\mu_1$ и $\mu_2$, порождающих алгоритмы $a_1(\mathbf{x})$ и $a_2(\mathbf{x})$
  - разные наборы признаков
  - разные обучающие наборы
  - разные алгоритмы обучения
- **Идея:** Алгоритмы поочереди обучают друг друга
- **Замечание:** Хотим добиться статистической независимости между ответами алгоритмов и размечать только те, в которых более всего уверены

# Co-training

- Размеченное $\mathcal{L}$ и неразмеченное $\mathcal{U}$ множества
- Создать два размеченных датасета $\mathcal{L}_1$ и $\mathcal{L}_2$ используя два различных представления
- Обучить классификатор $a_1$ используя $\mathcal{L}_1$ и классификатор $a_2$ используя $\mathcal{L}_2$
- Применить $a_1$ и $a_2$ на неразмеченном пуле данных $\mathcal{U}$
  - Предсказания делаются только при помощи тех представлений, которые использовались для обучения
- Добавить $K$ наиболее уверенных предсказаний $(\mathbf{x}, a_1(\mathbf{x}))$ классификатора $a_1$ в $\mathcal{L}_2$
- Добавить $K$ наиболее уверенных предсказаний $(\mathbf{x}, a_2(\mathbf{x}))$ классификатора $a_2$ в $\mathcal{L}_1$
- Как измерить уверенность?
- Удалить данные примеры из неразмеченного пула данных $\mathcal{U}$
- Перестроить $a_1$ используя $\mathcal{L}_1$ и $a_2$ используя $\mathcal{L}_2$
- В итоге, использовать модель голосования двух моделей при предсказании на тестовых данных

# Multi-view Learning

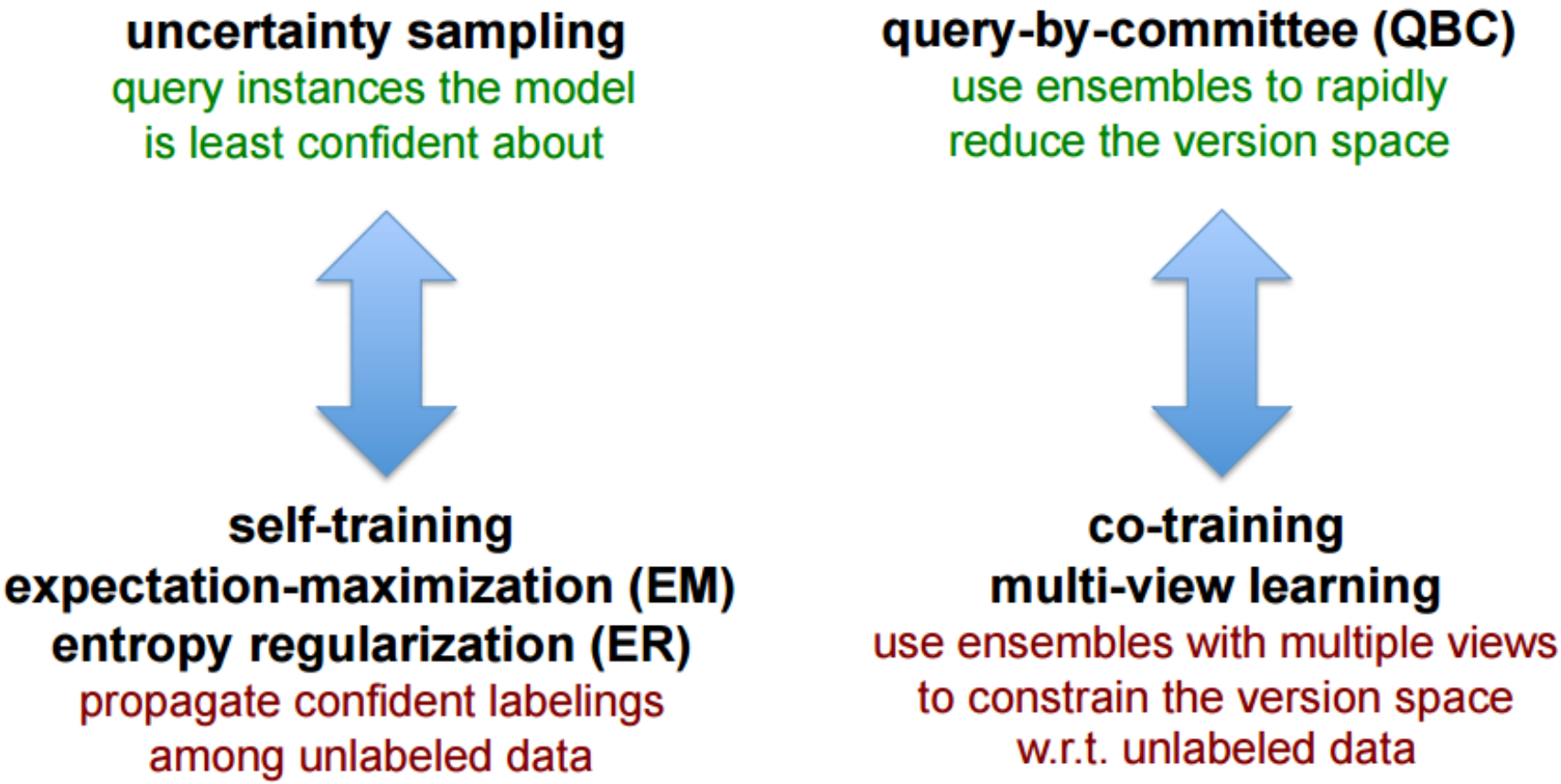
- Общий класс алгоритмов частичного обучения
- Обобщение метода co-training
- Вместо 2-х используем $T$ алгоритмов
- Ключевая идея: Большое количество независимых алгоритмов должны соглашаться на неразмеченном примере
- Bonus: На тестовых данных можно использовать композицию из обученных моделей

## Вопрос:

Что напоминают все перечисленные алгоритмы?

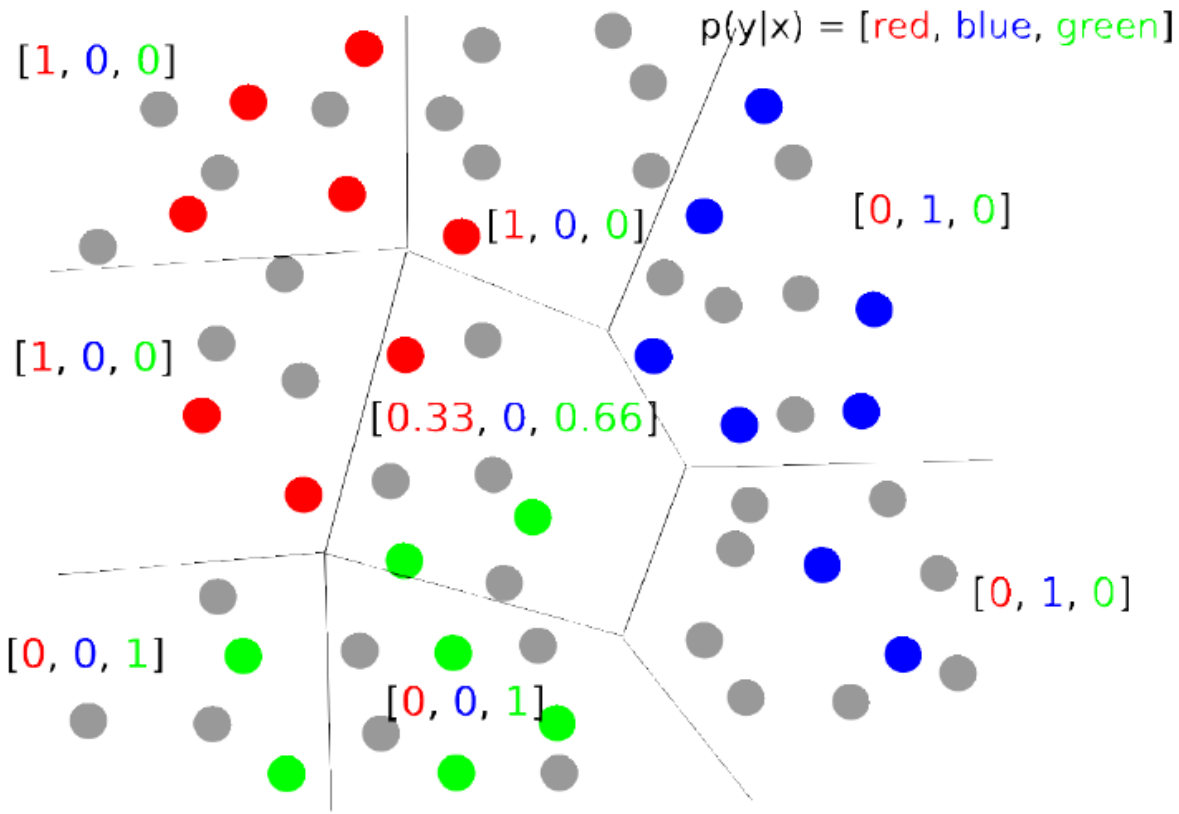
# Semi-supervised Learning vs Active Learning

- Пытаются зафиксить одну и ту же проблему



# Cluster and Label Approach

## Интуиция



# Cluster and Label Approach

**Input:** $\mathcal{L}$, $\mathcal{U}$, алгоритм кластеризации $k$, алгоритм обучения с учителем $a$

1. Кластеризовать все данные $\mathcal{L} \cup \mathcal{U}$ используя $k$
2. Для каждого кластера выбрать размеченные данные в нем $S$:
3. Обучить на этих данных алгоритм $a$: $a_S$
4. Разметить этим алгоритмом $a_S$ оставшиеся неразмеченные данные

**Output:** Метки неразмеченных данных $y_1, \ldots, y_U$

- Предположение: Кластера согласуются с истинными разделяющими поверхностями, иначе все плохо!!!

## Источники переобучения

- В чем заключаются причины переобучения?

# Overfitting

## Источники переобучения

- “Шумные” признаки данных
- Смещенная обучающая выборка
- Слишком сложная модель
- “Шумные” ответы для обучающих данных
- Выбросы в данных
- Все возможные комбинации выше перечисленного

## Вопрос:

- Как бороться с переобучением?

# Борьба с переобучение

## Способы борьбы с переобучением

- Выбрать простую модель
- Использовать критерий ранней остановки в алгоритме оптимизации
- Использовать внешний контроль
- Добавить “шум” в обучающие данные
- ...
- Сделать модель более “гладкой” (регуляризация)

# Regularization

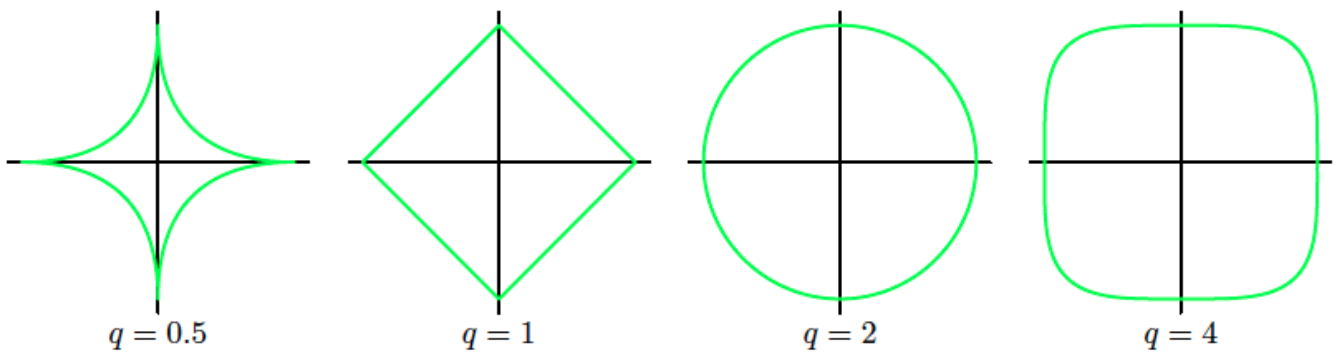
## Linear regression with regularization

$h(\mathbf{x}) = \mathbf{w}^T\mathbf{x} + w_0$ - линейная модель

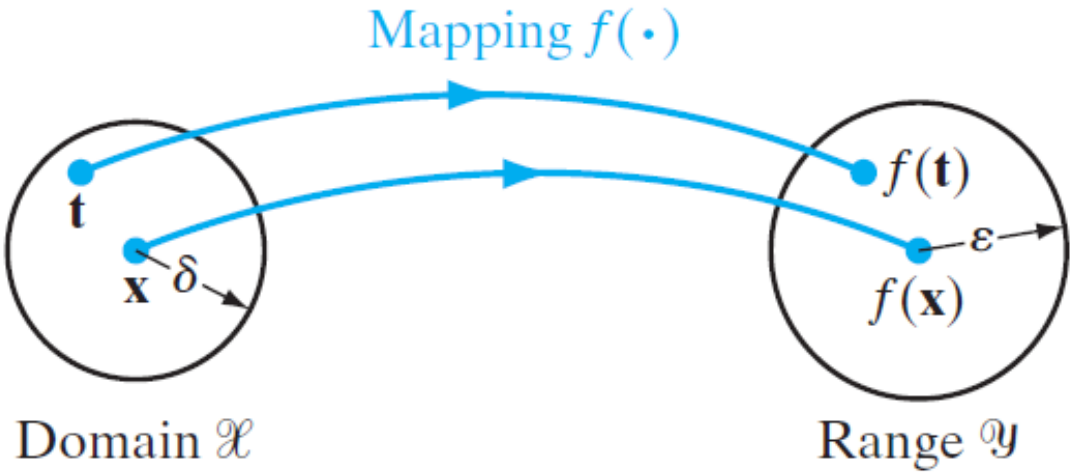
$$err(h) = \sum_{i=1}^{N}(h(x_i) - y_i)^2$$

## Регуляризация

$$err(h) = \sum_{i=1}^{N}(h(x_i) - c_i)^2 + \lambda\|\mathbf{w}\|_q$$



# Обратные задачи



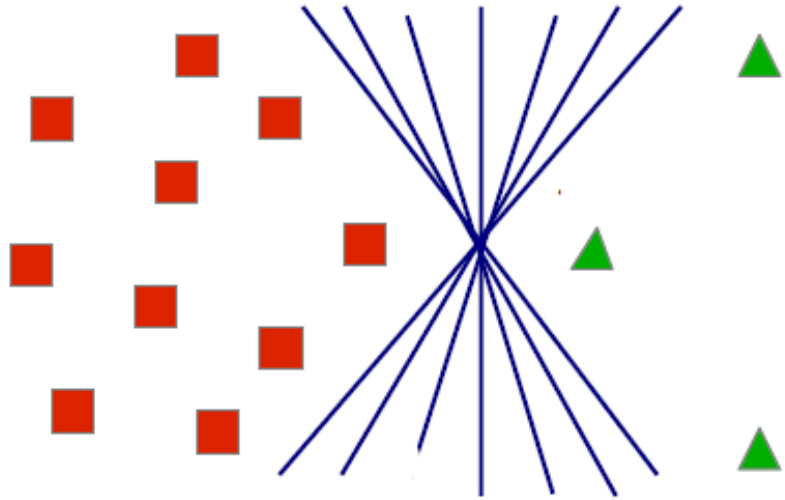

- Задача состоит в нахождении отображения $f$

## Пример:

Какие 2 натуральных числа в сумме дают 1000?

# Корректно поставленные задачи

## Hadamar (1902)



- Решение существует
- Решение единственно
- Решение непрерывно зависит от входных данных

## Пример:

Какие 2 натуральных числа в сумме дают 1000, если одно больше другого в 3 раза?

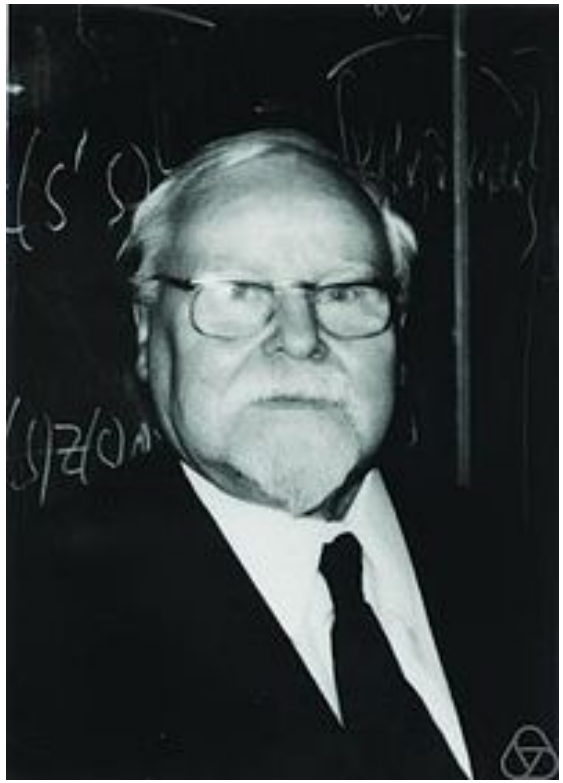
# Корректно поставленные задачи

Вопрос:

Является ли задача обучения с учителем корректно поставленной?

# Теория регуляризации Тихонова

- В 1967 году предложил метод решения некорректно поставленных задач
- Идея заключалась в введении вспомогательного неотрицательного функционала, учитывающего априорную информацию о решении



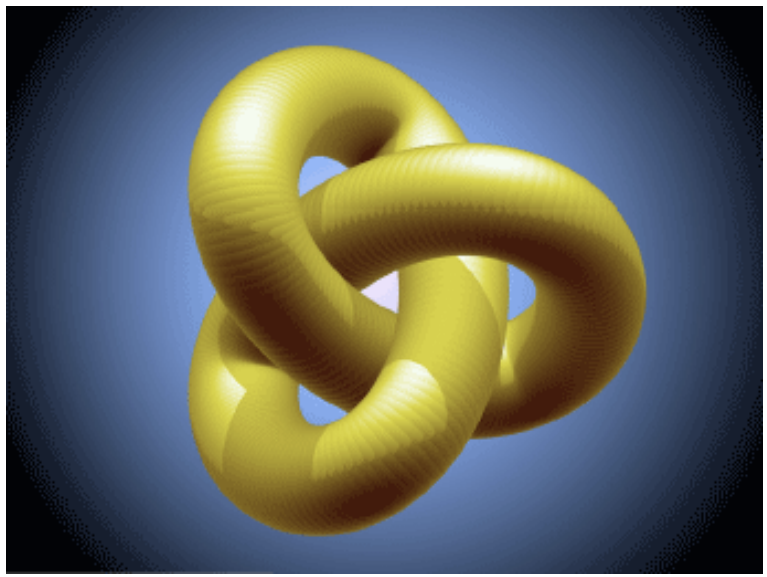
$$err(h) = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}(y_i - h(\mathbf{x}_i))^2 + \frac{1}{2}\|\mathbf{D}h\|^2$$

**D** - линейный дифференциальный оператор, несущий априорную информацию о решении

# Manifold assumption

## Идея

Будем предполагать, что данные лежат на некотором многообразии меньшей размерности, включенном в Евклидово пространство

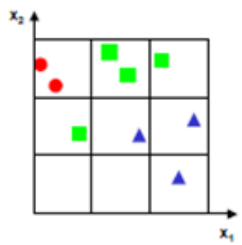


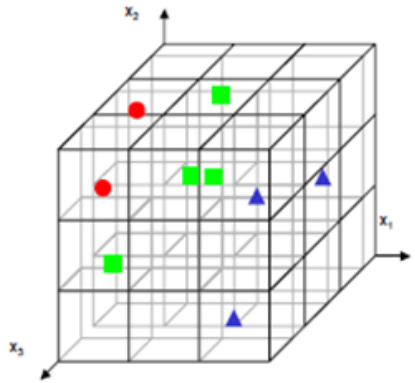
Для простоты можно предсталять данные многообразия, как некоторые гладкие поверхности заключенные в Евклидово пространство

# Manifold assumption

## В чем смысл?

Хотим добиться “гладкости” решения в соответсвии с внутренней структурой данных





- Расстояния в многомерных пространствах неинформативны (проклятие размерности)
- Работаем с расстояниями в пространстве меньшей размерности, отражающим внутреннюю структуру данных

# Обобщенная теория регуляризации

## Дополнительное ограничение на решение

Если две точки $\mathbf{x}_i$ $\mathbf{x}_j \in \mathbf{X}$ находятся близко на многообразии, описывающим скрытую геометрию данных, то значения модели на этих точках также должны быть близки $h(\mathbf{x}_i) \approx h(\mathbf{x}_j)$

## Функционал эмпирического риска с manifold regularization

$$err(h) = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}(y_i - h(\mathbf{x}_i))^2 + \frac{1}{2}\alpha_A\|h\|_K^2 + \frac{1}{2}\alpha_I\|h\|_I^2$$

$\|h\|_K^2$ - внешний регуляризатор, контролирущий сложность модели в исходном пространстве
$\|h\|_I^2$ - внутренний регуляризатор, отражает согласованность модели со скрытой внутренней геометрией данных

# SVM

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

$$h(x) = sign(\mathbf{w}^T\mathbf{x} - w_0)$$

Отступ объекта $\mathbf{x}_i$

$$m_i(\mathbf{w}) = y_i(\mathbf{w}^T\mathbf{x}_i - w_0)$$

Функционал качества

$$J(\mathbf{w}) = \sum_{i=1}^{N}(1 - m_i)_+ + \frac{1}{2C}\|w\|^2 \to \min_{\mathbf{w}, w_0}$$

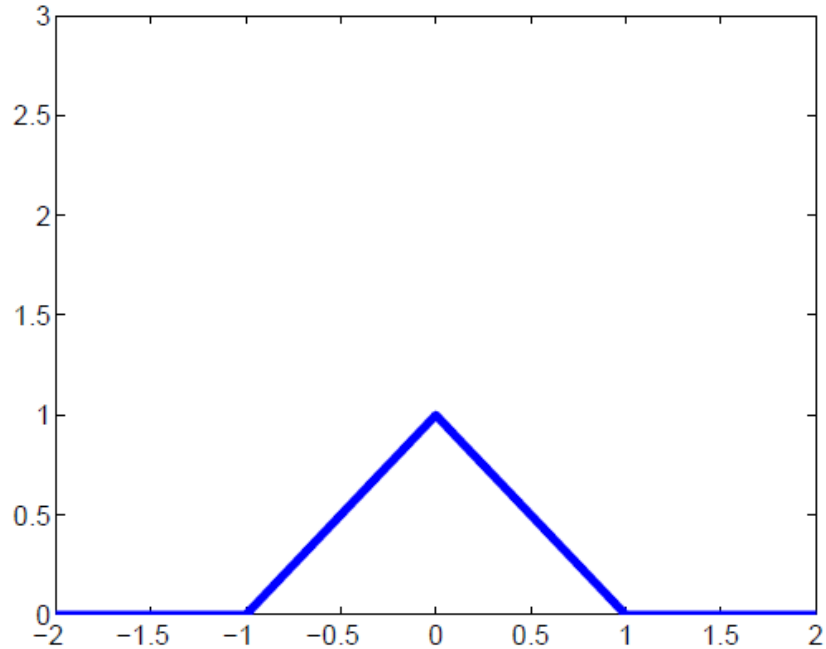
$$f_+ = \max(0, f)$$

## Идея:

Функция $L(m) = (1 - m)_+$ штрафует за попадание объекта внутрь разделяющей полосы

# TSVM

- **Наблюдение:** Величина отступа на неразмеченных данных есть $(1 - |m|)_+$

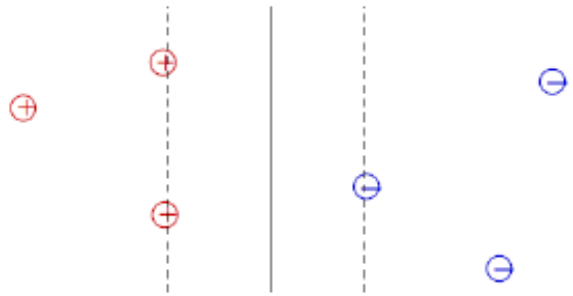



$$J(\mathbf{w}) = \sum_{i=1}^{N}(1 - m_i)_+ + \frac{1}{2C}\|w\|^2 +$$

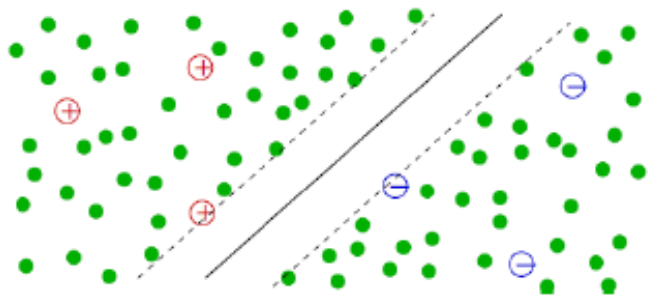
$$+\lambda \sum_{i=N+1}^{N+U}(1 - |m_i|)_+ \to \min_{\mathbf{w}, w_0}$$

# TSVM

SVMs



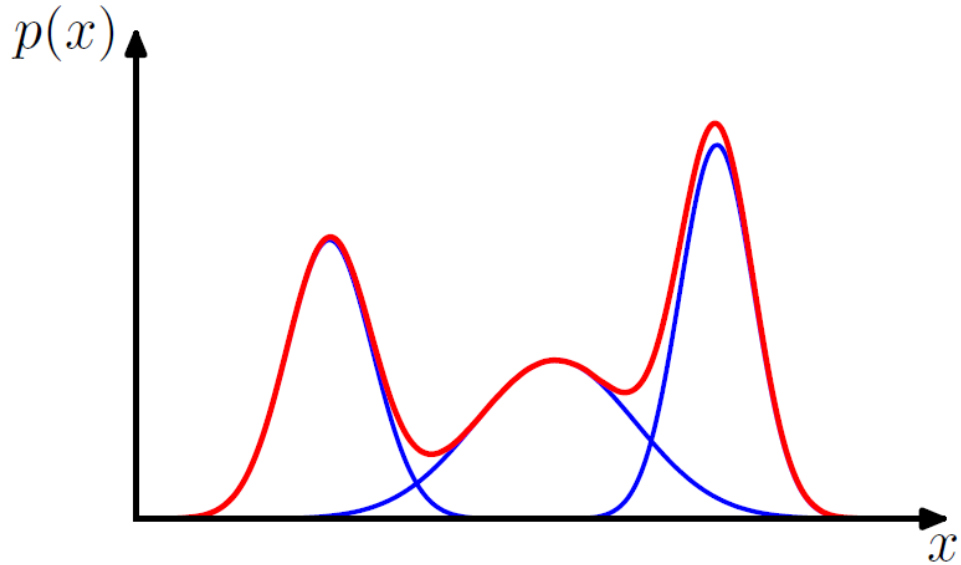
Semi-supervised SVMs (S3VMs) = Transductive SVMs (TSVMs)



- Решение неустойчиво, если нет зазора между классами
- Требуется настройка дополнительного параметра $\lambda$

# Напоминание

## Смесь нормальных распределений

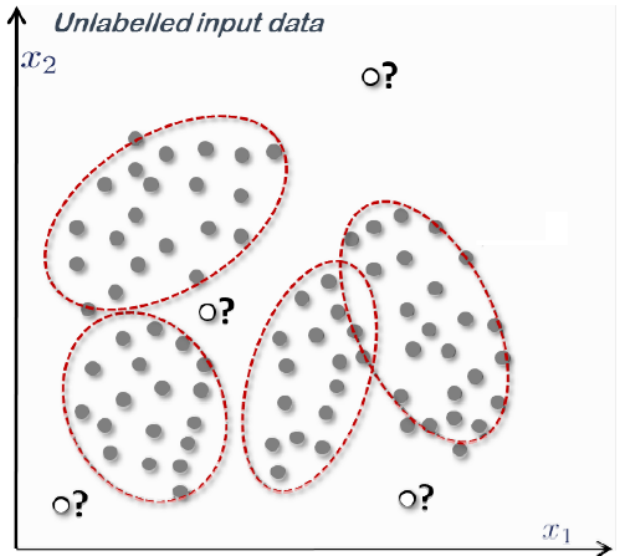


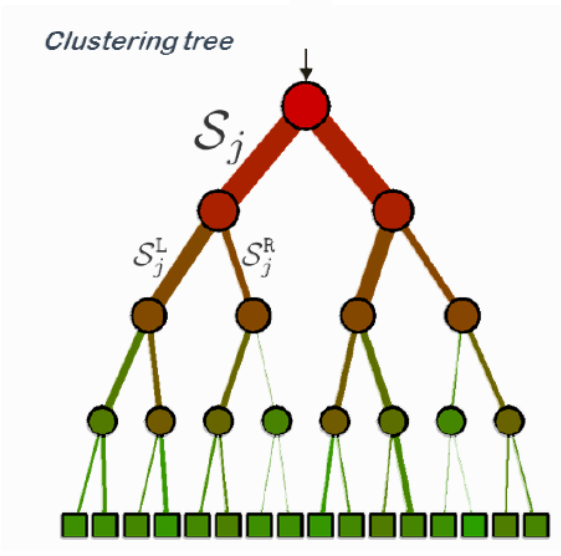

$$p(\mathbf{x}) = \sum_k \pi_k \mathcal{N}(\mathbf{x}|\mu_k, \mathbf{\Sigma}_k)$$

# Оценка плотности при помощи деревьев решений

## Идея:

Вместо того, чтобы подбирать линейную модель давайте подбирать нелинейную в виде дерева решений



# Оценка плотности при помощи деревьев решений

Пусть $\mathbf{X}$ - данные попадающие в текущий лист дерева

Критерий выбора разделяющего предиката

$$\theta^* = arg\max_{\theta} \mathcal{I}$$

Information gain

$$\mathcal{I} = H(\mathbf{X}) - \frac{|\mathbf{X}^L|}{|\mathbf{X}|} H(\mathbf{X}^L) - \frac{|\mathbf{X}^R|}{|\mathbf{X}|} H(\mathbf{X}^R)$$

Энтропия $d$-мерного нормального распределения

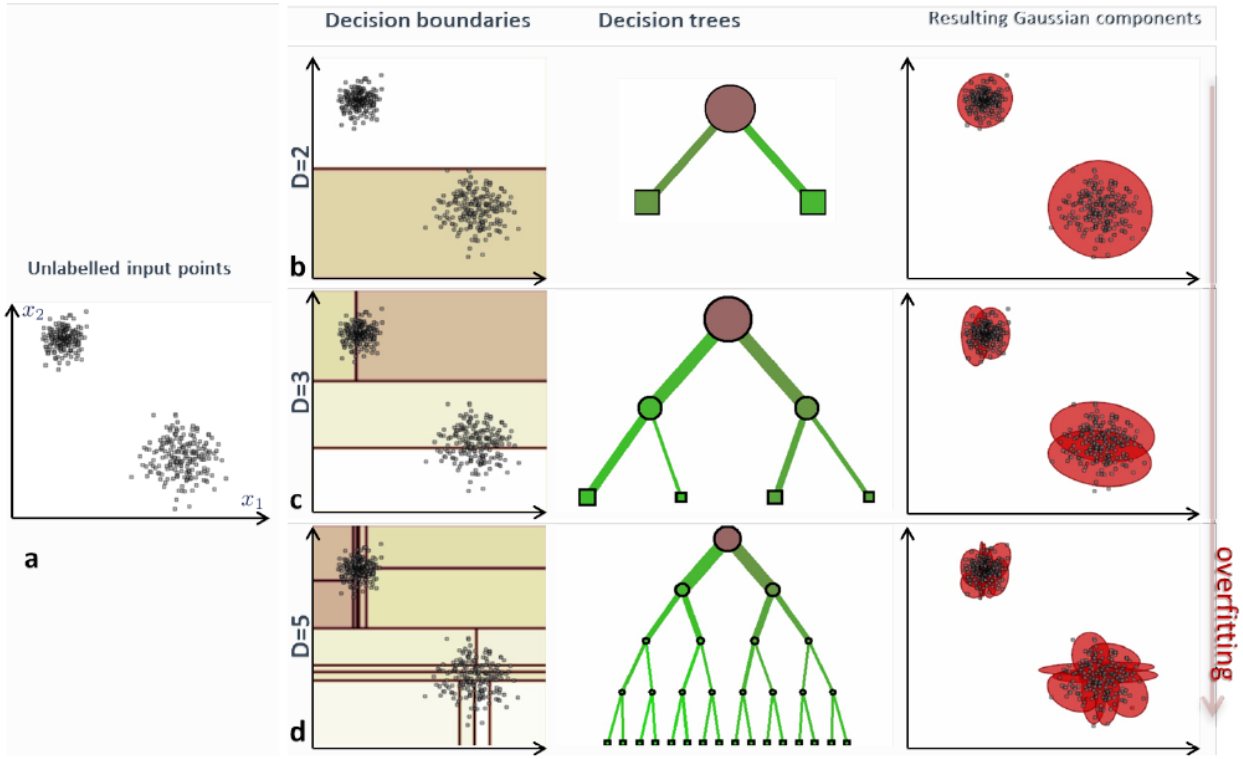
$$H(\mathbf{X}) = \frac{1}{2} \log((2\pi e)^d |\mathbf{\Sigma}(\mathbf{X})|)$$

где $|\mathbf{\Sigma}(\mathbf{X})|$ - определитель ковариационной матрицы

$$\mathcal{I} = \log |\mathbf{\Sigma}(\mathbf{X})| - \frac{|\mathbf{X}^L|}{|\mathbf{X}|} \log |\mathbf{\Sigma}(\mathbf{X}^L)| - \frac{|\mathbf{X}^R|}{|\mathbf{X}|} \log |\mathbf{\Sigma}(\mathbf{X}^R)|$$

# Оценка плотности при помощи деревьев решений

## Зависимость от глубины дерева



# Semi supervised trees

Критерий выбора разделяющего предиката

$$\theta^* = arg\max_{\theta} \mathcal{I}$$

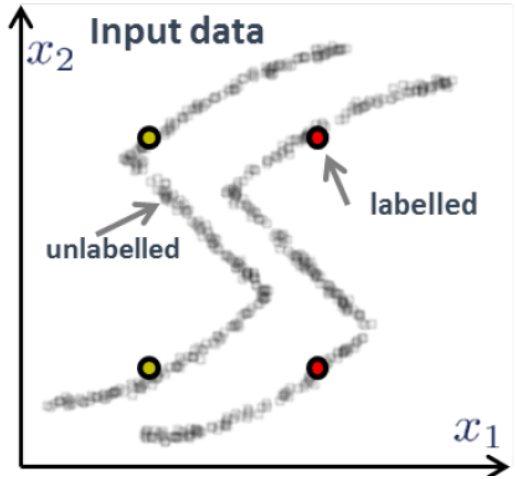
Information gain

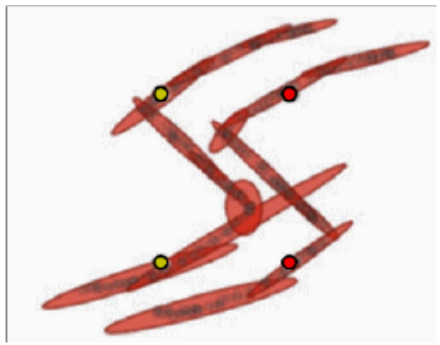
$$\mathcal{I} = \mathcal{I}^S + \alpha \mathcal{I}^U$$

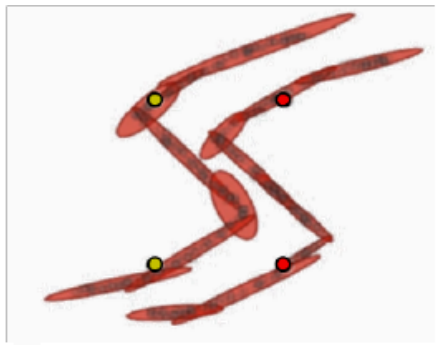
$$\mathcal{I}^S = H(\mathbf{X}_D) - \frac{|\mathbf{X}_D^L|}{|\mathbf{X}_D|} H(\mathbf{X}_D^L) - \frac{|\mathbf{X}_D^R|}{|\mathbf{X}_D|} H(\mathbf{X}_D^R)$$

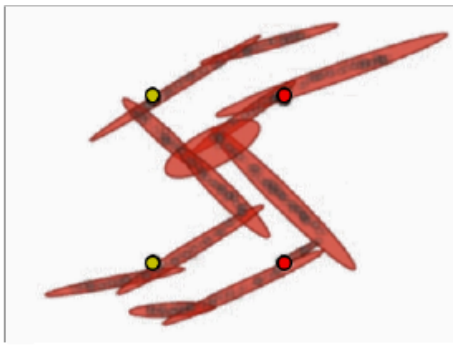
$$\mathcal{I}^U = \log|\mathbf{\Sigma}(\mathbf{X})| - \frac{|\mathbf{X}_{D\cup U}^L|}{|\mathbf{X}_{D\cup U}|} \log|\mathbf{\Sigma}(\mathbf{X}_{D\cup U}^L)| - \frac{|\mathbf{X}_{D\cup U}^R|}{|\mathbf{X}_{D\cup U}|} \log|\mathbf{\Sigma}(\mathbf{X}_{D\cup U}^R)|$$

# Semi supervised trees



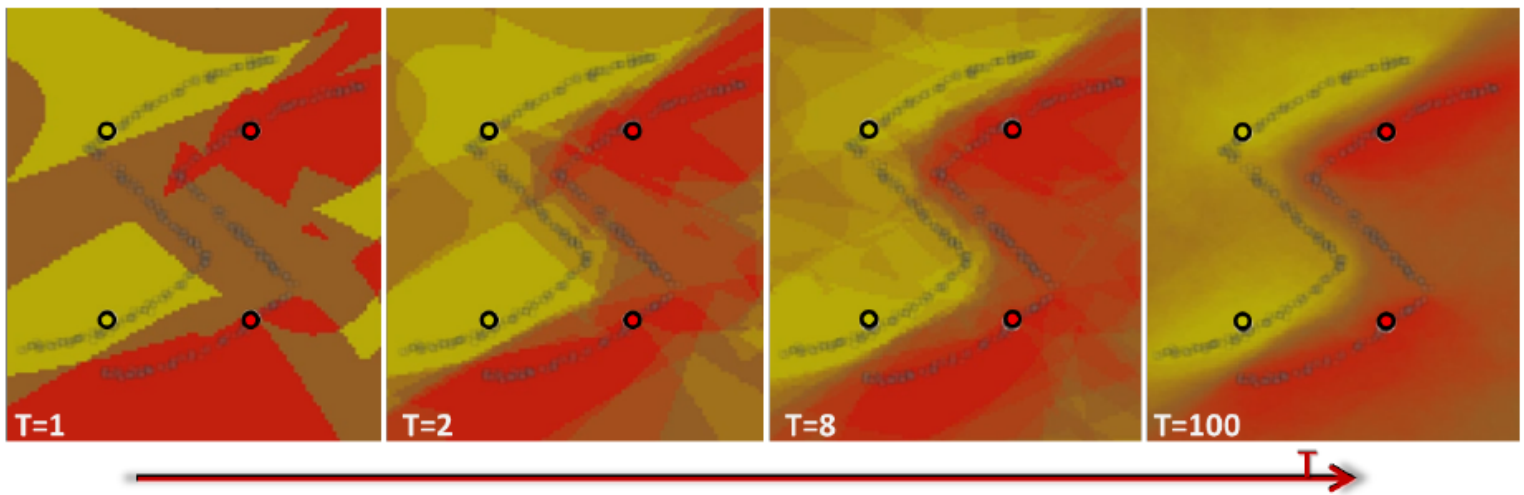







# Semi supervised Random Forest

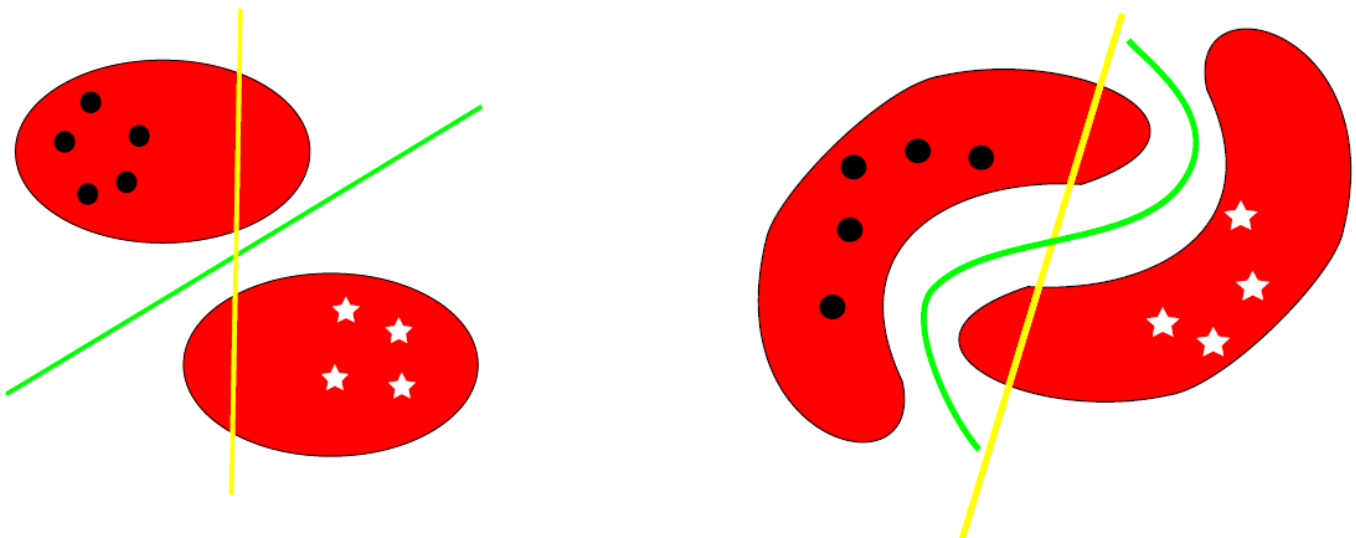
$$p(y|\mathbf{x}) = \frac{1}{T}\sum_{t=1}^{T} p_t(y|\mathbf{x})$$



# Semi supervised boosting

$$h(\mathbf{x}) : \mathcal{X} \rightarrow Y = \{-1, +1\}$$

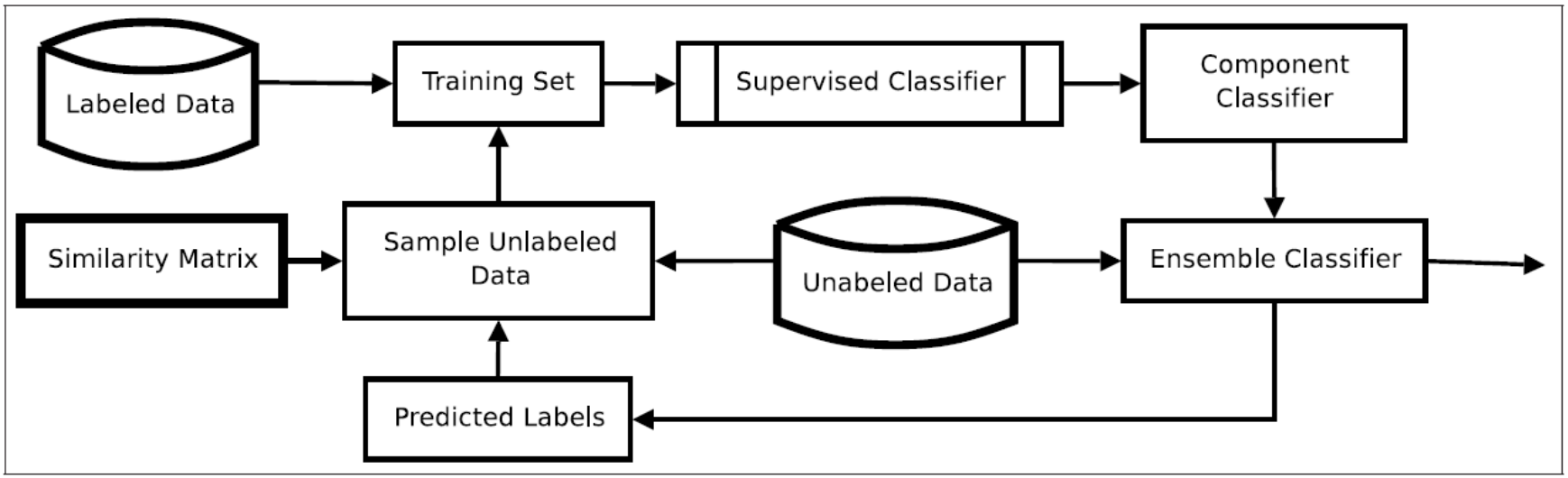
$$H(\mathbf{x}) = \sum_{t=1}^{T} \alpha_t h_t(\mathbf{x})$$



(a) Cluster assumption

(b) Manifold assumption

# SemiBoost


Labeled Data
Training Set
Supervised Classifier
Component Classifier
Similarity Matrix
Sample Unlabeled Data
Unabeled Data
Ensemble Classifier
Predicted Labels

# SemiBoost

## Схема:

1. Start with empty ensemble
2. At each iteration
   - **Compute the pseudolabel (and its confidence)**
     for each unlabeled example, using existing ensemle, and pairwise similarity
   - **Sample most confident pseudolabeled examples;**
     combine them with labeled samples and train new model $h$ with supervised learning algorithm
   - **Add new model to ensemble**
     with an appropriate weight

# SemiBoost

- Неразмеченные точки, похожие друг на друга должны иметь одну метку класса
- Точки похожие на размеченные должны иметь такую же метку класса

$$L(h(\mathbf{x})) = L_{\mathcal{L}}(y, H(\mathbf{x})) + \lambda L_{\mathcal{U}}(H(\mathbf{x}))$$

## Supervised

$$L_{\mathcal{L}}(\mathbf{y}, S) = \sum_{i=1}^{N_{\mathcal{L}}} \sum_{i=1}^{N_{\mathcal{U}}} S_{ij} exp(-2 y_i^l y_j^u)$$

## Unsupervised

$$L_{\mathcal{U}}(\mathbf{y}_u, S) = \sum_{i=1}^{N_{\mathcal{U}}} \sum_{i=1}^{N_{\mathcal{U}}} S_{ij} cosh(y_i^u - y_j^u)$$

# SemiBoost

- Вычислить матрицу похожести между каждой парой примеров
- Инициализировать $H(\mathbf{x}) = 0$
- Для $t = 1, \ldots, T$
  - Вычислить $p_i$ и $q_i$ для каждого примера

$$p_i = \sum_{j=1}^{N_L} S_{ij} e^{-2H_i} I(y_j = 1) + \frac{\lambda}{2} \sum_{j=1}^{N_U} S_{ij} e^{H_j - H_i}$$

$$q_i = \sum_{j=1}^{N_L} S_{ij} e^{2H_i} I(y_j = -1) + \frac{\lambda}{2} \sum_{j=1}^{N_U} S_{ij} e^{H_i - H_j}$$

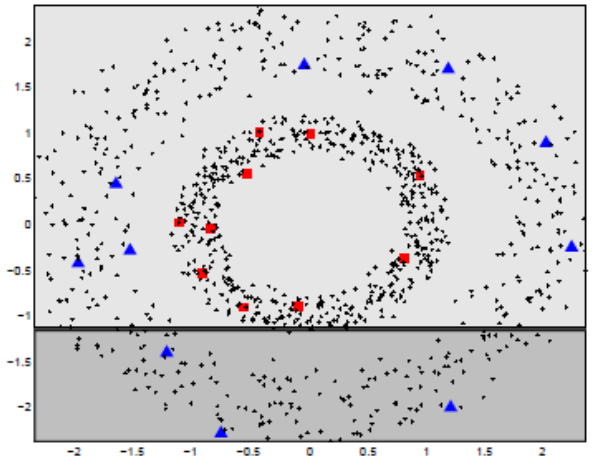
  - Выбрать примеры $\mathbf{x}_i$ по весу $|p_i - q_i|$
  - Обучить классификатор $h_t$ на семплированных данных
  - Вычислить

$$\alpha_t = \frac{1}{4} ln \left( \frac{1 - \epsilon_t}{\epsilon_t} \right), \quad \epsilon_t = \frac{\sum_i^{N_U} p_i I(h_i = -1) + \sum_i^{N_U} q_i I(h_i = 1)}{\sum_i (p_i + q_i)}$$

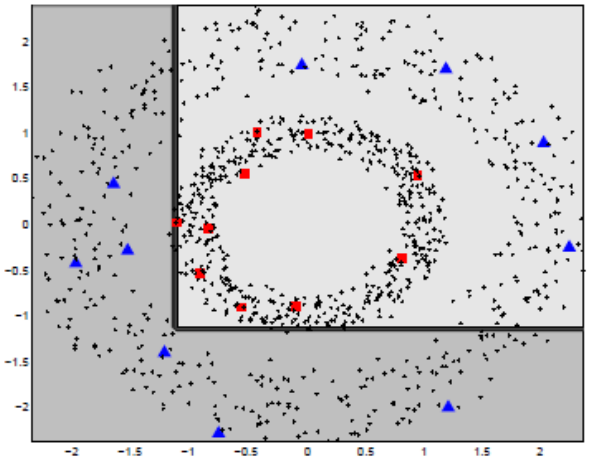
  - Обновить финальную модель

$$H(\mathbf{x}) \leftarrow H(\mathbf{x}) + \alpha_t h_t(\mathbf{x})$$

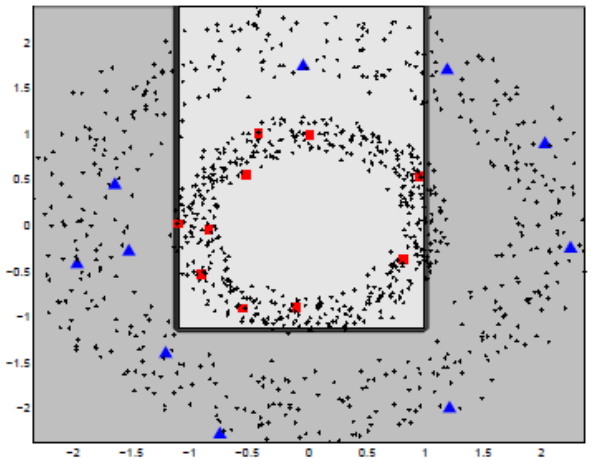
# SemiBoost with Decision Stumps



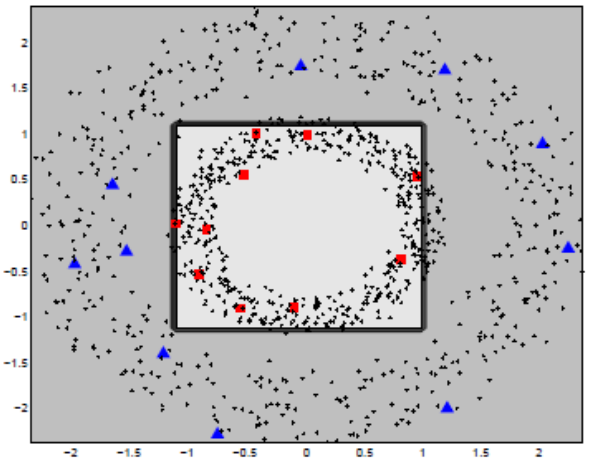
(a) Iter. 1, (65.0%)



(b) Iter. 2, (76.5%)



(c) Iter. 3, (86.4%)



(d) Iter. 12, (94.6%)

# Training with Priors and Manifold regularization

## Общий вид функции потерь

$$L(h) = \sum_{i=1}^{N_L} L(y_i, h(\mathbf{x}_i)) +$$

$$+\lambda J_p(p, q) + (1 - \lambda) \sum_{i=1}^{N_L} \sum_{j=1}^{N_U} s(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) J_m(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j, h)$$

$p(y|\mathbf{x})$ - априорное распределение классов по кластерам
$q(y|\mathbf{x})$ - апостериорное (выдаваемое моделью) распределение классов по кластерам

# Итоги

- Частичное обучение занимает положение между обучением с учителем и обучением без учителя
- Методы обучения без учителя легче адаптируются к задаче частичного обучения, чем методы обучения с учителем
- Как правило, применение методов обучения с учителем к задаче частичного обучения приводит к лучшим результатам, чем применение метода обучения без учителя
- На практике часто используется вместе с активным обучением
- Если ваша выборка несостоятельна по фичам, то ничего не работает!!!

# Similarity

1. Gauss
$$S(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = exp\left(\frac{-\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\|^2}{2\sigma^2}\right)$$
2. Laplas
$$S(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = exp\left(-\gamma\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\|\right)$$
3. Inverse quadratic
$$S(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = \frac{1}{1 + \|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\|^2}$$
4. Inverse multiquadric
$$S(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = \frac{1}{\sqrt{1 + \|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\|^2}}$$
5. Epanechnikov
$$S(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = \frac{3}{4}(1 - \|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\|^2)$$

# Penalty

1. Exponential
$$J_m(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j, h) = cosh(h(\mathbf{x}_i) - h(\mathbf{x}_j))$$
2. Polynomial
$$J_m(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j, h) = (h(\mathbf{x}_i) - h(\mathbf{x}_j))^k, \ldots k = 2, 4, 6, \ldots$$
3. Sublinear
$$J_m(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j, h) = \ln(1 + |h(\mathbf{x}_i) - h(\mathbf{x}_j)|)$$

# Probability Distance Measures

1. **Chi-square**

$$J_p(p, q) = \sum_{i=1}^{N_U} \frac{(p(y|x_i) - q(y|x_i))^2}{q(y|x_i)}$$

2. **Hellinger distance**

$$J_p(p, q) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N_U} (\sqrt{p(y|x_i)} - \sqrt{q(y|x_i)})^2$$

3. **Kullback–Leibler divergence**

$$J_p(p, q) = \sum_{i=1}^{N_U} p(y|x_i) \ln \frac{p(y|x_i)}{q(y|x_i)}$$

4. **Jensen-Shannon divergence**

$$J_p(p, q) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N_U} p(y|x_i) \ln \frac{p(y|x_i)}{q(y|x_i)} + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N_U} q(y|x_i) \ln \frac{q(y|x_i)}{p(y|x_i)}$$

5. **Euclidean distance**

$$J_p(p, q) = \sum_{i=1}^{N_U} (p(y|x_i) - q(y|x_i))^2$$

6. **Bhattacharyya distance**

$$J_p(p, q) = -ln(\sum_{i=1}^{N_U} \sqrt{p(y|x_i)q(y|x_i)})$$

# Вопросы