

Лекция б Semi-supervised Learning

Владимир Гулин https://goo.gl/SmqIOz

11 марта 2016 г.

План лекции

Мотивация

Semi-supervised learning

Generalized Regularization Theory

Semi-supervised Trees

Semi-supervised Boosting

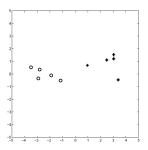
Проблемы применения обучения с учителем на практике

- 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

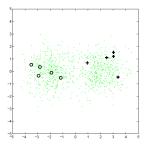
Вопрос:

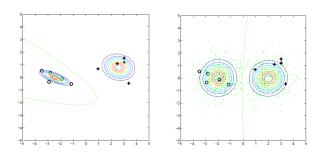
▶ Можем ли мы как-то использовать неразмеченные данные для обучения?

Где провести границу между классами?



Где провести границу между классами?





Semi-supervized learning

- ▶ Дано: Множество размеченных данных $\mathcal{L} = \{\mathbf{x}_i, y_i\}_{i=1}^{N_L}$, множество неразмеченных данных $\mathcal{U} = \{\mathbf{x}_i\}_{i=1}^{N_L}$
- lacktriangle 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 $\mathcal{U} = \{\mathbf{x}_j\}_{i=1}^{N_U}$.
- lacktriangle Все возможные внешние данные находятся в ${\cal U}$
- lacktriangle Все точки из ${\cal U}$ доступны в момент обучения

Простой алгоритм: Self training

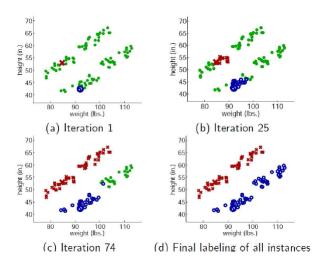
- ▶ Дано: Небольшое количество размеченных данных
- ▶ Идея: Обучаться, предсказывать и переобучаться, используя свои собственные предсказания, в которых наиболее уверены



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

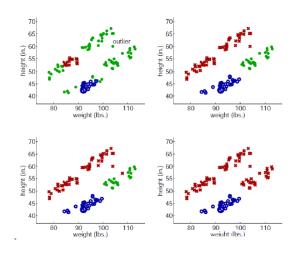
Self training: Хороший случай

▶ Базовый классификатор: KNN



Self training: Плохой случай

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



Expectation Maximization Approach

- lacktriangle Размеченное ${\cal L}$ и неразмеченное ${\cal U}$ множества
- Expectation Maximization based Semi-Supervised learning
 - ightharpoonup 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 $\{-1,+1\}$

$$E[y_j] = +1 \cdot P(y_j = +1 | \theta, \mathbf{x}_j) + (-1) \cdot P(y_j = -1 | \theta, \mathbf{x}_j)$$

- lacktriangle Перестроить модель используя ${\mathcal L}$ и ${\mathcal U}$ с оценками меток классов
- > Использовать новую модель θ 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

- lacktriangle Размеченное ${\cal L}$ и неразмеченное ${\cal U}$ множества
- ▶ Два существенно различных метода обучения μ_1 и μ_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

- lacktriangle Размеченное ${\cal L}$ и неразмеченное ${\cal U}$ множества
- ightharpoonup Создать два размеченных датасета \mathcal{L}_1 и \mathcal{L}_2 используя два различных представления
- ightharpoonup Обучить классификатор a_1 используя \mathcal{L}_1 и классификатор a_2 используя \mathcal{L}_2
- ightharpoonup Применить a_1 и a_2 на неразмеченном пуле данных ${\cal U}$
 - 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?
- lacktriangle Удалить данные примеры из неразмеченного пула данных ${\cal U}$
- ▶ 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 Т алгоритмов
- Ключевая идея: Большое количество независимых алгоритмов должны соглашаться на неразмеченном примере
- ▶ Bonus: На тестовых данных можно использовать композицию из обученных моделей

Semi-supervised Learning vs Active Learning

▶ Пытаются зафиксить одну и ту же проблему

uncertainty sampling

query instances the model is least confident about



self-training expectation-maximization (EM) entropy regularization (ER) propagate confident labelings

propagate confident labelings among unlabeled data

query-by-committee (QBC)

use ensembles to rapidly reduce the version space

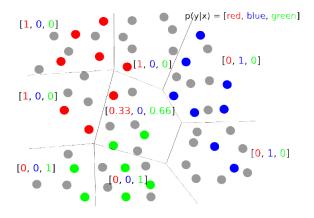


co-training multi-view learning

use ensembles with multiple views to constrain the version space w.r.t. unlabeled data

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!!!

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

Борьба с переобучение

Способы борьбы с переобучением

- Выбрать простую модель
- Использовать критерий ранней остановки в алгоритме оптимизации
- ▶ Добавить "шум" в обучающие данные
- Сделать модель более "гладкой" (регуляризация)

Regularization

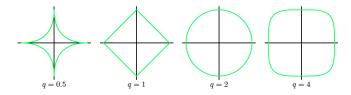
Linear regression with regularization

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

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

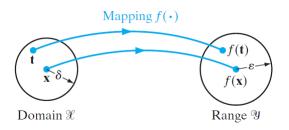
Регуляризация

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



Корректно поставленные задачи

Hadamar (1902)



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

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

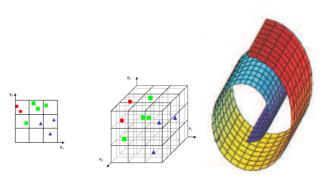


Для простоты можно предсталять данные многообразия, как некоторые гладкие поверхности заключенные в Евклидово пространство

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

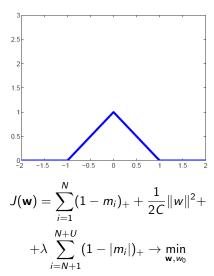
$$J(\mathbf{w}) = \sum_{i=1}^{N} (1 - m_i)_+ + \frac{1}{2C} \|w\|^2 \to \min_{\mathbf{w}, w_0}$$
 $f_+ = \max(0, f)$

Идея:

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

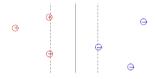
TSVM

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

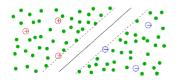


TSVM

SVMs



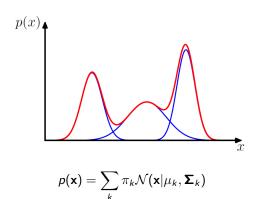
 $Semi-supervised\ SVMs\ (S3VMs) = Transductive\ SVMs\ (TSVMs)$



- ▶ Решение неустойчиво, если нет зазора между классами
- lacktriangle Требуется настройка дополнительного параметра λ

Напоминание

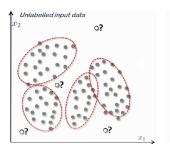
Смесь нормальных распределений

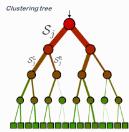


Оценка плотности при помощи деревьев решений

Идея:

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





Оценка плотности при помощи деревьев решений Пусть **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

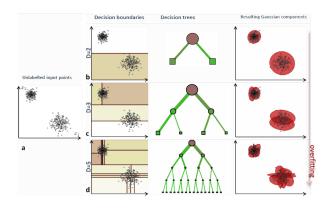
$$H(\mathbf{X}) = \frac{1}{2}\log((2\pi e)^d|\mathbf{\Sigma}(\mathbf{X})|)$$

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

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

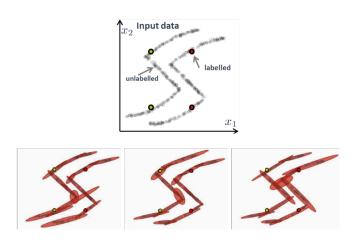
Information gain

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

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

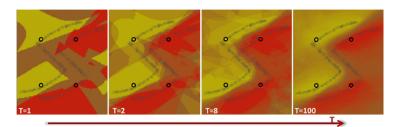
$$\mathcal{I}^{U} = \log |\mathbf{\Sigma}(\mathbf{X})| - \frac{|\mathbf{X}_{D \cup U}^{L}|}{|\mathbf{X}_{D \cup U}|} \log |\mathbf{\Sigma}(\mathbf{X}_{D \cup U}^{L})| - \frac{|\mathbf{X}_{D \cup U}^{R}|}{|\mathbf{X}_{D \cup U}|} \log |\mathbf{\Sigma}(\mathbf{X}_{D \cup U}^{R})|$$

Semi supervised trees



Semi supervised Random Forest

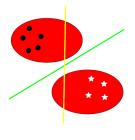
$$p(y|\mathbf{x}) = \frac{1}{T} \sum_{t=1}^{T} p_t(y|\mathbf{x})$$



Semi supervised boosting

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

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

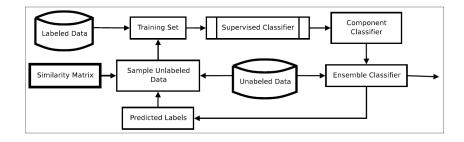






(b) Manifold assumption

SemiBoost



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

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

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
- ightharpoonup Инициализировать $H(\mathbf{x})=0$
- ▶ Для t = 1, ..., T
 - ▶ Вычислить p_i и q_i для каждого примера

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

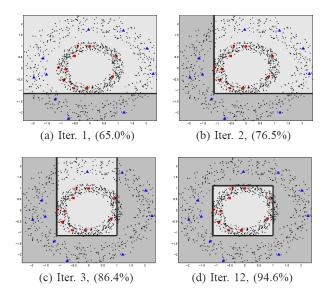
- lacktriangle Выбрать примеры ${f x}_i$ по весу $|{m p}_i-{m q}_i|$
- ightharpoonup Обучить классификатор h_t на семплированных данных
- Вычислить

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

Обновить финальную модель

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

SemiBoost with Decision Stumps



Gradient Boosting with Priors and Manifold regularization

Общий вид функции потерь

$$egin{aligned} L(h) &= \sum_{i=1}^{N_L} L(y_i, h(\mathbf{x}_i)) + \ &+ \lambda J_p(p,q) + (1-\lambda) \sum_{i=1}^{N_L} \sum_{i=1}^{N_U} s(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) J_m(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j, h) \end{aligned}$$

 $p(y|\mathbf{x})$ - 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!!!

Дз по частичному обучения:

Задание:

Для варианта из вашего первого дз модифицировать алгоритм обучения с добалением возможности работы в режиме частичного обучения. Использовать prior regularization и/или manifold regularization.

Варианты возможных регуляризаторов, представлены в приложении к данной презентации. Для того, чтобы узнать свой вариант необходимо по традиции воспользоваться функцией

```
def ComputeMyTaskNumber(your_name):
    return 1 + hash(your_name) % number_of_cases
```

где your_name - это ваши фамилия и имя латиницей (например 'Pupkin Vasiliy')

number_of_cases - количество доступных для выбора вариантов

Дз по частичному обучения:

Имеется 5 дополнительных опций к заданию. Для первой опции нужно использовать функцию

```
def ComputeMyTaskNumber(your_name):
    return 1 + hash(your_name) % number_of_cases
```

Для 2-его задания

```
def ComputeMyTaskNumber(your_name):
    return 1 + hash(hash(your_name)) % number_of_cases
```

Для остальных по аналогии :)

Manifolds

- 1. Principal Component Analysis
- 2. Linear Discriminant Analysis
- 3. Isomap
- 4. Locally Linear Embedding
- 5. Modified Locally Linear Embedding
- 6. Hessian Eigenmapping
- 7. Spectral Embedding
- 8. Local Tangent Space Alignment
- 9. Multi-dimensional Scaling
- 10. t-distributed Stochastic Neighbor Embedding (t-SNE)

ВАЖНОЕ ЗАМЕЧАНИЕ

BCE РЕАЛИЗОВАНО В scikitlearne. ПРЕОБРАЗОВАНИЯ САМИМ РЕАЛИЗОВЫВАТЬ НЕ НУЖНО!

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

$$S(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = exp(-\gamma ||\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j||)$$

3. Inverse quadratic

$$S(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = \frac{1}{1 + \|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_i\|^2}$$

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

$$J_m(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j, h) = (h(\mathbf{x}_i) - h(\mathbf{x}_j))^k, \dots k = 2, 4, 6, \dots$$

3. Sublinear

$$J_m(\mathbf{x}_i,\mathbf{x}_j,h) = \ln(1+|h(\mathbf{x}_i)-h(\mathbf{x}_j)|)$$

Clustering

- 1. K-Means
- 2. DBSCAN
- 3. Affinity Propagation
- 4. Mean Shift
- 5. Spectral clustering
- 6. Hierarchical clustering
- 7. Birch

ВАЖНОЕ ЗАМЕЧАНИЕ

Опять же ничего самим имплементить не нужно. Берем из sclearna.

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

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

5. Euclidean distance

$$J_{p}(p, q) = \sum_{i=1}^{N_{U}} (p(y|x_{i}) - q(y|x_{i}))^{2}$$

6. Bhattacharyya distance

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

Вопросы

