Aprendizaje semi-supervisado (SSL)

Teoría y casos prácticos de SSL

José Manuel Cuadra Troncoso

Índice

Aprendizaje no supervisado

- El objetivo del aprendizaje no supervisado es encontrar una estructura interesante en un conjunto de ejemplos $X = \{\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, ..., \mathbf{x}_n\}$ extraídas de una población $\mathscr{X}$.
  - Más precisamente encontrar una f.d.p que pueda haber generado X.
  - Este objetivo se extiende a estimación de cuantiles, clustering, detección de outliers y reducción de dimensionalidad.

Aprendizaje supervisado

- El objetivo del aprendizaje supervisado es aprender un mapeo f de X en $Y = \{y_1, y_2, ..., y_n\}$, donde y_i son las etiquetas asociadas a los ejemplos $\mathbf{x}_i$ extraídas de una población $\mathscr{Y}$.
  - Los pares $(\mathbf{x}_i, y_i)$ se supone que se seleccionan de manera i.i.d. en la población $\mathscr{X} \times \mathscr{Y}$.
  - Este objetivo se extiende a regresión, detección de outliers y de novedad.

Pros y contras de los datos etiquetados

Pros

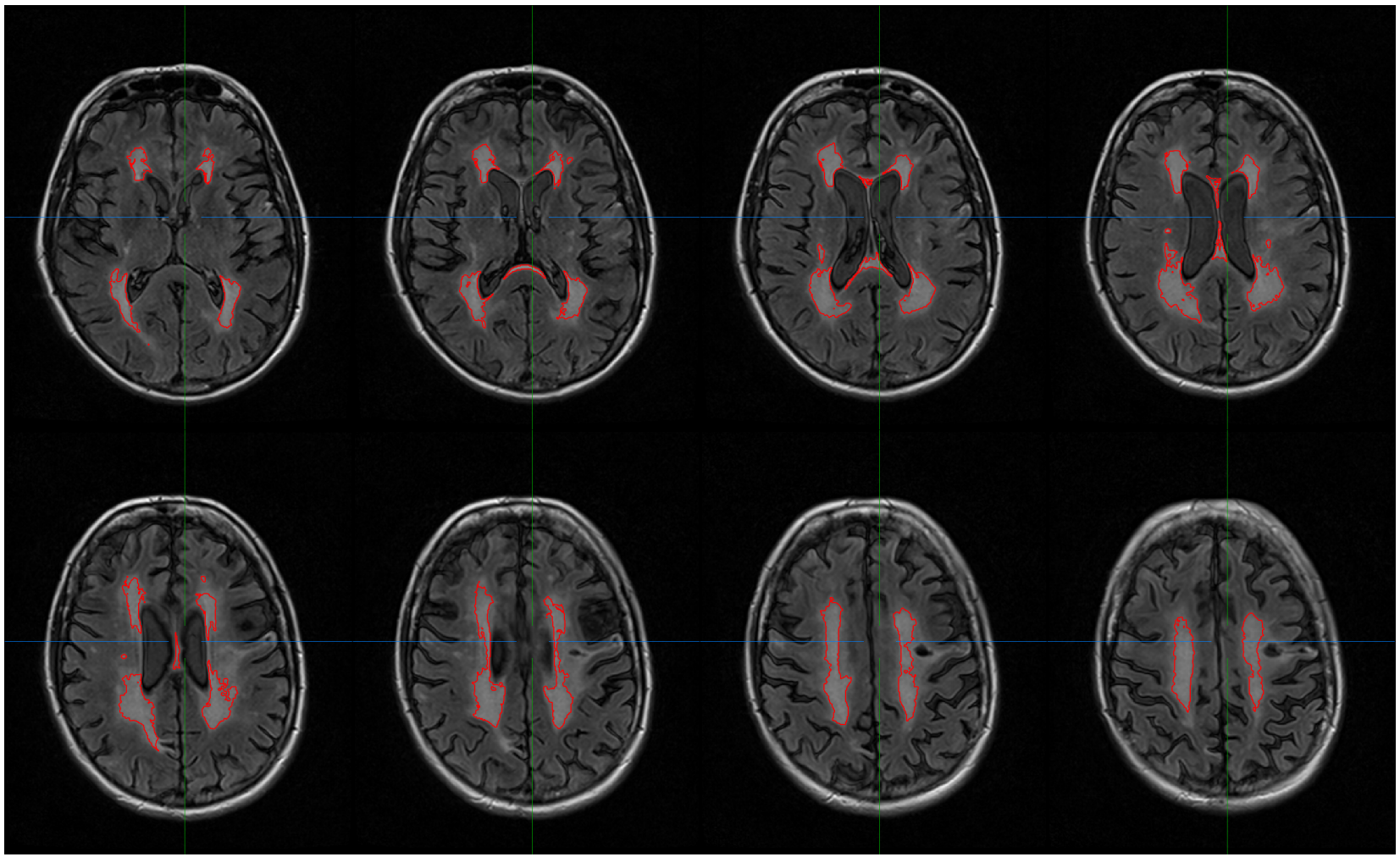
- Con relativamente pocos datos se puede entrenar.

Contras

- Las etiquetas suelen necesitar expertos anotadores, llevan tiempo y dinero.
- Las etiquetas pueden necesitar dispositivos especializados.

Los datos no etiquetados suelen presentar características opuestas.

Ejemplo de obtención de etiquetas
Anotación de imágenes médicas



Uso de juegos para etiquetado

- Juegos de computación basados en humanos o juegos con un propósito (GWAP).
- Para abordar problemas que las computadoras aún no pueden:
  - Etiquetado de imágenes.
  - Anotación de obras de arte, literatura...
  - Genética.
  - Web semántica ...
- `https://en.wikipedia.org/wiki/Human-based_computation_game`

Aprendizaje semi-supervisado

- Clasificación semi-supervisada:
  - Usar l datos etiquetados $\{(\mathbf{x}_i, y_i)\}_{i=1}^{l}$ y u no etiquetados $\{\mathbf{x}_j\}_{j=l+1}^{l+u}$. Normalmente $u \gg l$.
  - Objetivo: obtener un mejor clasificador que con datos etiquetados solo. Extensión de SL.
  - Hay métodos generativos (probabilísticos) y discriminativos (no probabilísticos).
- Clustering con restricciones:
  - Usar n datos no etiquetados $\{\mathbf{x}_j\}_{j=l}^{n}$ y restricciones p. ej. dos puntos están en el mismo cluster (must-links) o no (cannot-links).
  - Objetivo: obtener un mejor agrupamiento que con datos no etiquetados solo. Extensión de USL.

SSL vs aprendizaje transductivo

SSL inductivo

Dados $\{(\mathbf{x}_i, y_i)\}_{i=1}^{l}$ y $\{\mathbf{x}_j\}_{j=l+1}^{l+u}$ aprender $f : \mathscr{X} \longrightarrow \mathscr{Y}$, se espera que f realice buenas predicciones sobre datos futuros.

Aprendizaje transductivo

Dados $\{(\mathbf{x}_i, y_i)\}_{i=1}^{l}$ y $\{\mathbf{x}_j\}_{j=l+1}^{l+u}$ aprender $f : X^{l+u} \longrightarrow Y^{l+u}$, se espera que f realice buenas predicciones solo en la muestra de entrenamiento.

¿Cuándo puede funcionar el SSL?

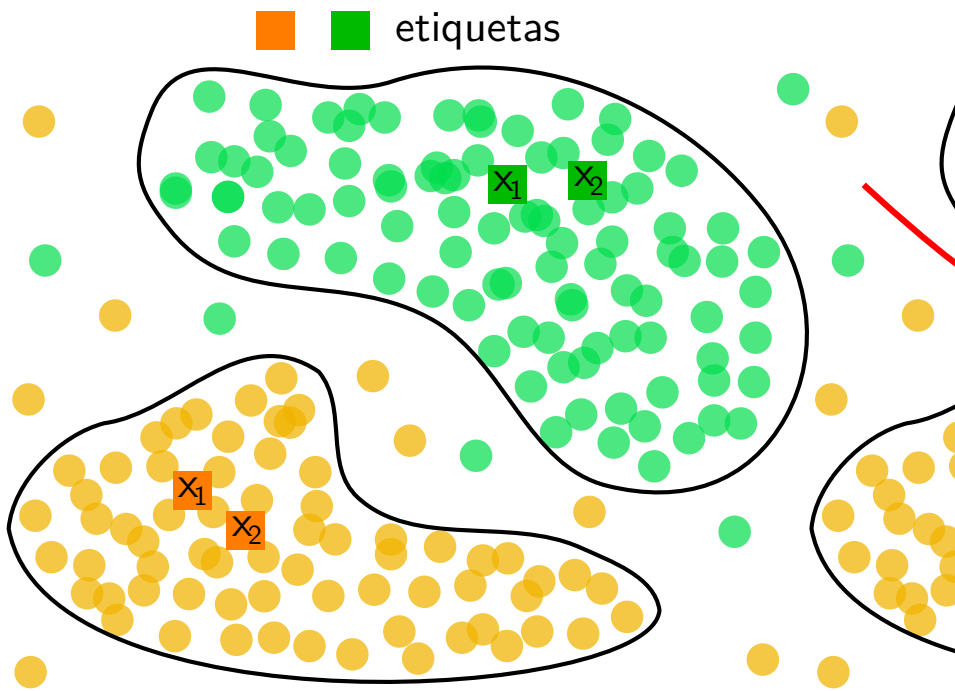
¿Tiene sentido el SSL?

Precisando: en comparación con un algoritmo supervisado ¿se puede esperar mayor precisión empleando datos sin etiquetar?

- Sí, pero la distribución de ejemplo debe ser relevante para el problema de clasificación planteado.
  - El conocimiento sobre $p(\mathbf{x})$ que aportan los datos no etiquetados debe tener información útil sobre $p(y|\mathbf{x})$.
- Para esto deben cumplirse ciertas hipótesis: suavidad/continuidad, agrupamiento y de variedad(manifold).

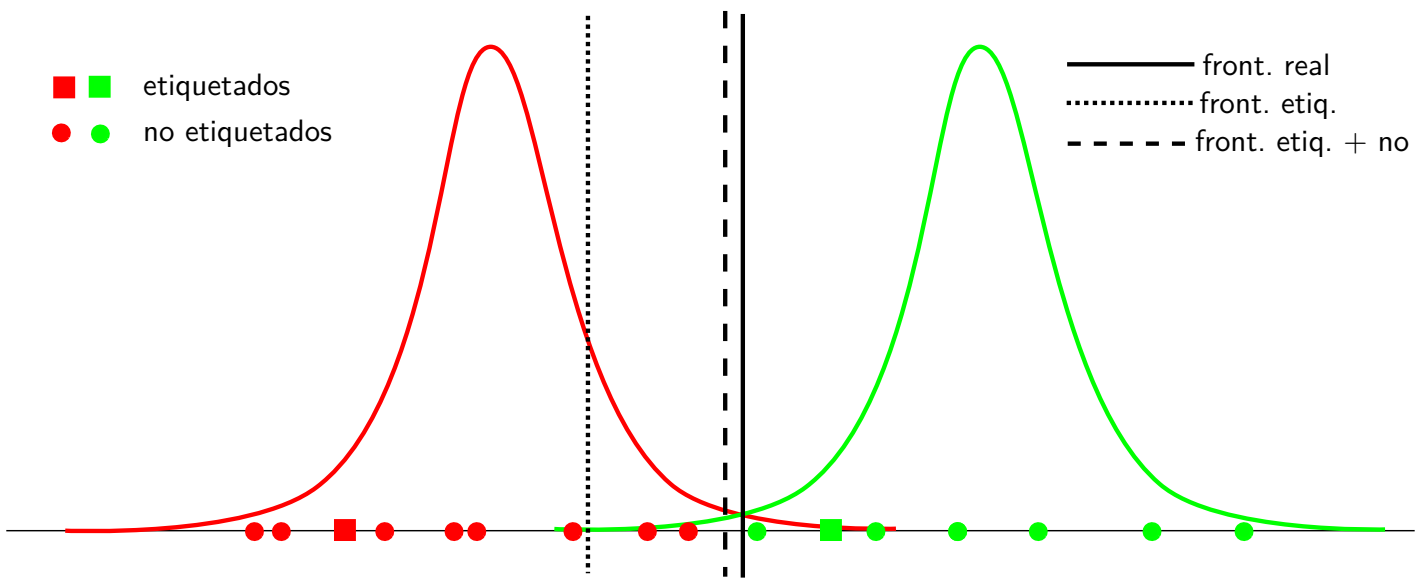
Hipótesis de suavidad/continuidad semi-supervisada

- Si dos puntos $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2$ en una región de alta densidad están cerca, sus etiquetas y_1, y_2 deberían ser iguales.
- La frontera de decisión en región de baja densidad.
- Generalizar a un posible conjunto infinito de casos a partir de un conjunto finito de entrenamiento.



Hipótesis de agrupamiento

- Si dos puntos $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2$ pertenecen al mismo cluster, sus etiquetas y_1, y_2 deberían ser iguales. Aunque datos con la misma etiqueta pueden pertenecer a distintos clusters. Caso particular de la hipótesis de suavidad.
- Los datos no etiquetados pueden ayudar a precisar las fronteras de los clusters.



Hipótesis de variedad (manifold)

- Una variedad es un conjunto localmente homeomórfico a un espacio euclídeo.
  - 1D: recta, círculo, pero no un 8. En 2D: plano, esfera, toro.
- Los datos están en una variedad de una dimensión mucho más pequeña que la del espacio de entrada (evitar la maldición de la dimensionalidad).
  - La voz humana se controla con 4 cuerdas vocales, no es necesario modelar el espacio de todas las señales acústicas.
  - La expresión facial se controla con unos pocos músculos, no es necesario modelar el espacio de todas las imágenes.

Principio de Vapnik

Definición (Principio de Vapnik)

Cuando se trata de resolver un problema no debería resolverse, como paso intermedio, un problema más difícil.

Introducción

Aviso

El software para SSL está muy disperso en distintas herramientas normalmente escritas en MatLab, C o C++.
Consultar la web: Semi-Supervised Learning Software

- Comentaremos el software que emplearemos en las actividades asociadas a los métodos que describiremos.

Scikit-learn

- En scikit-learn dispone de métodos de propagación de etiquetas.
- Hay también módulos externos para scikit-learn.
  - Semisup-learn self-training y S3VM. Para self-training el modelo supervisado tiene que tener el método predict_proba.
  - Sklearn-cotraining.
  - pomegranate modelos generativos.

R

- RSSL self-training, S3VM, métodos basados en grafos, ...
- SSL cotraining, propagación de etiquetas, self-training (xgboost), métodos basados en grafos, ...

Java

- El módulo externo para Weka collective-classification métodos basados en grafos, ...
- Keel self-training y cotraining. Dispone de interfaz gráfica.

Algoritmo básico

1. Entrenar un clasificador supervisado f con el conjunto de datos etiquetados L.
2. Usar el clasificador para clasificar el conjunto de datos no etiquetados U.
3. Pasar datos de U a L.
4. Repetir los pasos 1, 2 y 3 hasta que U quede vacío.

Características

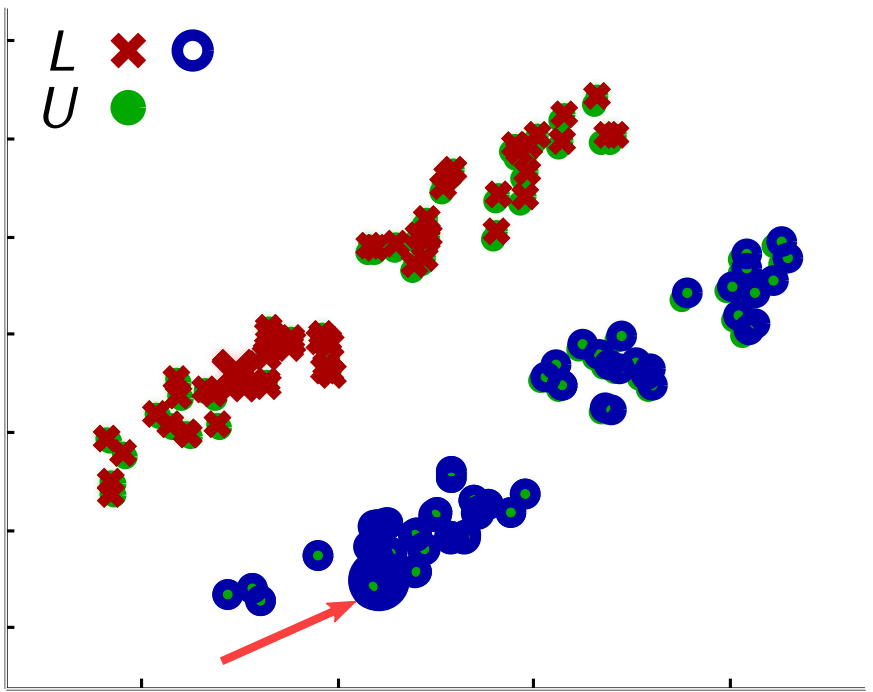
- Es el método más simple de SSL y es usado a menudo.
- Es un método wrapper: envuelve un método SL.
- La elección del clasificador f está abierta.
- Los errores cometidos por f tienden a reforzarse.
  - Como solución se pueden desetiquetar muestras con fiabilidad por debajo de un umbral.
- La convergencia a una solución depende del caso.

Variaciones al método básico

- Añadir a L solo los datos más fiables en cada iteración.
- Añadir a L todos los datos, habría una sola iteración.
- Añadir a L todos los datos ponderando según su fiabilidad, habría una sola iteración.

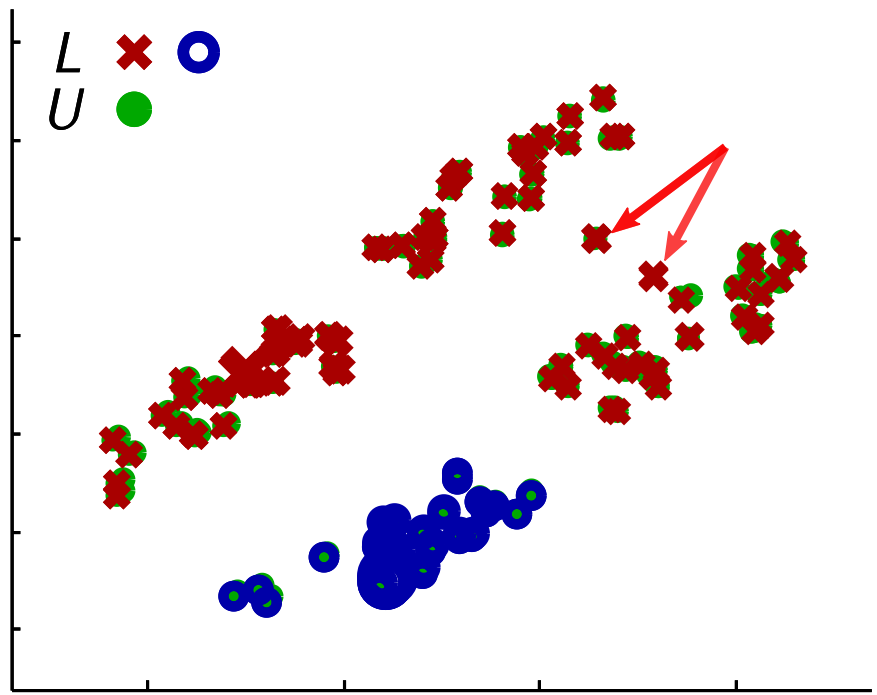
Ejemplo exitoso con 1-NN

- Tenemos L y U.
  1. Seleccionamos elemento de U que esté a la mínima distancia de cualquier elemento de L.
  2. Le damos la etiqueta del elemento de L más cercano a él y lo pasamos a L. Los empates se deshacen aleatoriamente.
- Repetimos 1 y 2 hasta vaciar U.



Ejemplo fallido con 1-NN

- Tenemos L y U, pero ahora hay un outlier.
- Procedemos como en el ejemplo anterior.
- Un outlier situado en el sitio oportuno puede dar al traste con la clasificación.
- El outlier propaga su etiqueta.
- La clasificación no es correcta.



Self-training con semisup-learn (Python)

- Para el ejemplo con semisup-learn cargaremos el notebook self-training-iris.ipynb.
- Clasificar flores iris usando aprendizaje supervisado en los datos etiquetados y self-training con todos los datos.

Self-training con SSL (R)

- Para el ejemplo con SSL cargaremos el notebook ssl-selftraining-example.ipynb.
- Clasificar flores iris usando aprendizaje semi-supervisado.

Self-training con RSSL (R)

- Para el ejemplo con RSSL cargaremos el notebook example-self-learning-rssl.ipynb.
- Ejemplo del uso de LearningCurveSSL para ver cómo puede fallar un self-learning.

Actividades self-training

Actividad

Clasificar mediante self-training los datos de titanic.csv en "Survived" o no usando como características "Pclass", "Sex", "Age". Estudiar los datos antes para ver si hay problemas: datos no disponibles, etc. Dar la matriz de confusión. Usar los tres módulos comentados.
Para cargar csv ver titanic_start_python.ipynb y titanic-start_r.ipynb.

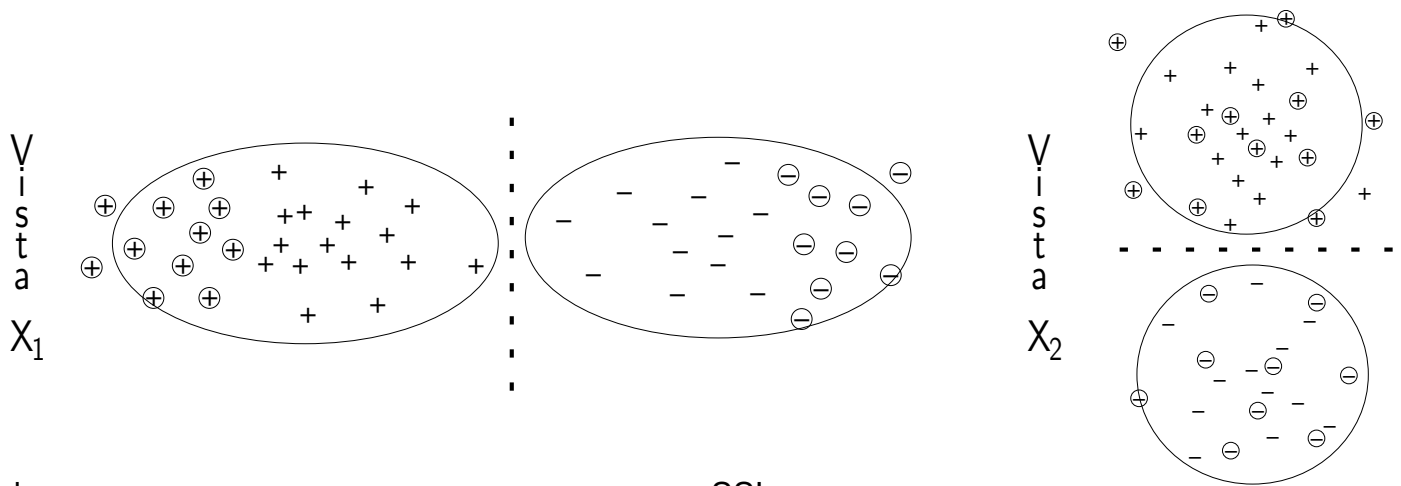
Introducción

- Queremos clasificar web en categorías.
  - Creamos dos vistas (conjuntos de características $X = [X_1, X_2]$ de cada web: contenido X_1 y link X_2.
  - Etiquetamos las vistas de algunas webs según las categorías.
- Entrenamos un clasificador para cada vista y cada uno clasifica algunos datos no etiquetados
- Cada clasificador enseña al otro con los datos que ha etiquetado.
- Como el self-training pero con dos clasificadores que se enseñan mutuamente.

Hipótesis del co-training

Hipótesis del co-training

- La división en vistas $X = [X_1, X_2]$ existe.
- Cada vista es capaz de entrenar un clasificador.
- Las vistas son condicionalmente independientes dada una clase C (X_1 y X_2 no tiene porqué ser independientes pero si nos dan C sí (peso, vocabulario y edad).



Algoritmo básico del co-training

1. Entrenar dos clasificadores f_1 a partir de (X_1^l, Y_1^l), f_2 a partir de (X_2^l, Y_2^l).
2. Clasificar X^u usando f_1 y f_2 de forma independiente.
3. Co-training a velocidad k.
   - Añadir los k datos más fiablemente etiquetados por f_1 a (X_2^l, Y_2^l).
   - Añadir los k datos más fiablemente etiquetados por f_2 a (X_1^l, Y_1^l).
4. Eliminar estos $2k$ datos de X^u.
5. Repetir los pasos 2, 3 y 4 hasta acabar con X^u.

Pros y contras del co-training

Pros

- Es un método wrapper que se puede aplicar a mucho clasificadores supervisados.
- Es menos sensible a errores que el self-training.

Contras

- La división de vistas de forma natural puede no existir.
- Modelos usando ambas vistas pueden funcionar mejor.

Variantes del co-training

- **Co-EM (expectation maximization)**: da etiquetas probabilísticas que pueden cambiar entre iteraciones.
- **Co-regularization**: minimiza una función que depende de la complejidad (normas) de f_1 y f_2, su acuerdo en los datos no etiquetados y una función de pérdida evaluada en los datos etiquetados usando la media entre f_1 y f_2.
- **Co-regression**: usa regresores en lugar de clasificadores, la fiabilidad de las nuevas etiquetas se estima por la disminución del MSE.
- **Co-clustering**: funciona bajo la hipótesis de que el agrupamiento real subyacente asignará los puntos correspondientes en cada vista al mismo grupo.

Modelos multivista

- Son una extensión del co-training en la que se usan más de dos clasificadores.
  - Se entrenan clasificadores de distintos tipos.
  - Se clasifican los datos no etiquetados con cada clasificador.
  - Se añade la etiqueta votada por la mayoría.

Cotraining con sklearn-cotraining (Python)

- Para el ejemplo con sklearn-cotraining cargaremos el notebook sklearn-cotraining-examples.ipynb.
- Coentrenaremos varios clasificadores para clasificar un conjunto con 25000 datos y 1000 características, comparando la clasificación supervisada con la semi-supervisada.

Cotraining con SSL (R)

- Para el ejemplo con SSL cargaremos el notebook ssl-cotraining-example.ipynb.
- Clasificar flores iris usando aprendizaje semi-supervisado.

Actividades cotraining

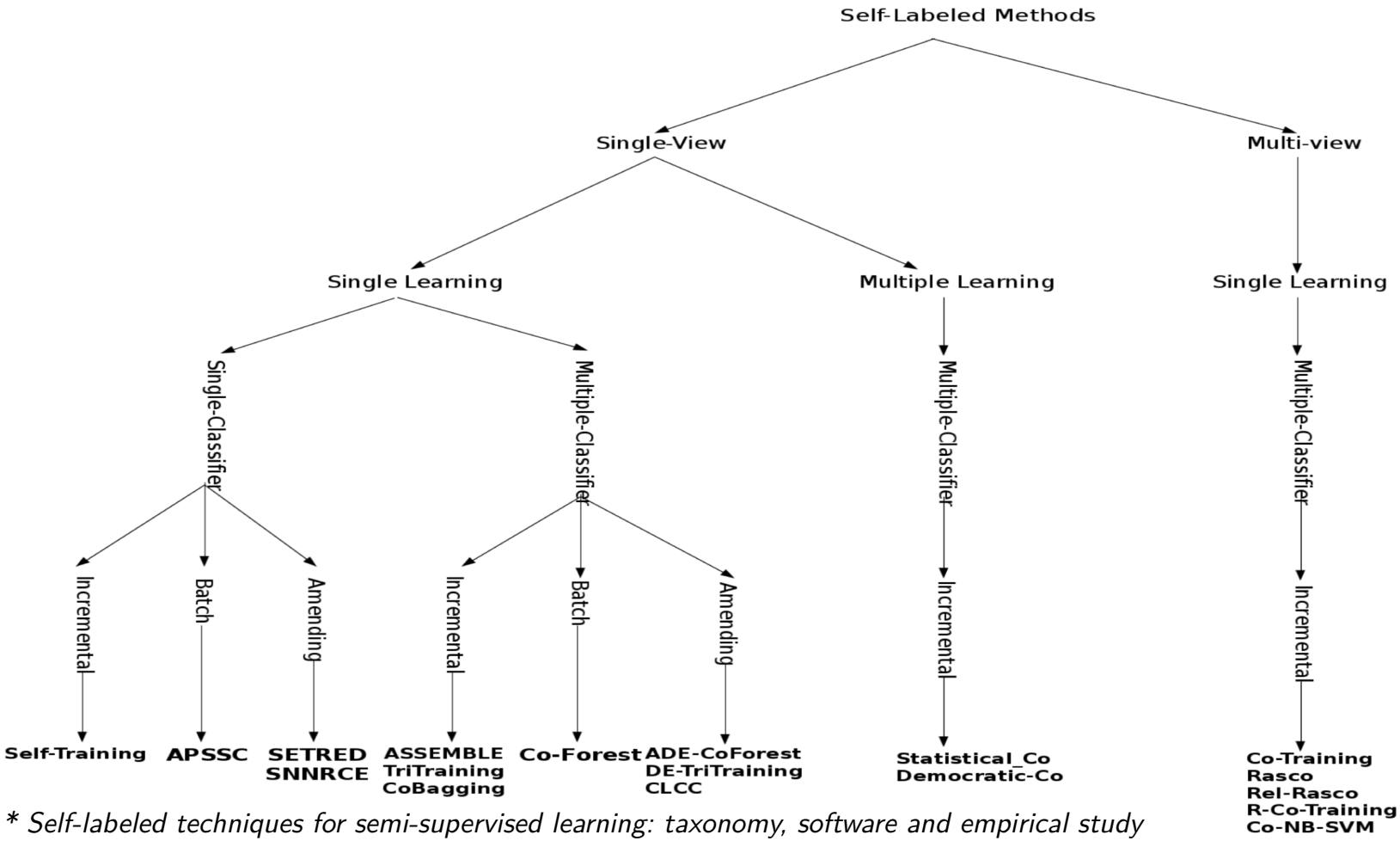
Actividad

Clasificar mediante cotraining los datos de titanic.csv en "Survived" o no usando como características "Pclass", "Sex", "Age". Estudiar los datos antes para ver si hay problemas: datos no disponibles, etc. Dar la matriz de confusión. Usar los dos módulos comentados.

Introducción a self-labeled

1. Estos métodos engloban al self-training y al co-training/multivista.
2. Características para clasificar:
   1. Mecanismo de adición:
      1. Incremental:k más fiables en cada iteración.
      2. Por lotes: Se decide si un dato cumple el criterio de adición pero hasta tomar todas las decisiones no se etiquetan realmente (todos) los datos, se puede cambiar de opinión.
      3. Corrección: se añaden todos lo que cumplen un criterio, los que se etiquetan en una iteración pueden perderla en otra.
   2. Clasificador simple (p. ej. self-learning) vs. múltiple (p. ej. co.training).
   3. Usar uno o varios algoritmos de aprendizaje.
   4. Vista simple o multivista.

Taxonomía de métodos self-labeled



** Self-labeled techniques for semi-supervised learning: taxonomy, software and empirical study*

Uso de KEEL

- Vamos a ver el uso sencillo de KEEL creando un experimento de clasificación como se explica en el manual sección 7.3 (pg. 172) y sección 2.3.1 (pg. 14).

Definición de modelo generativo

Definición (Modelo generativo)

$p(\mathbf{x}, y) = p(y)p(\mathbf{x}|y)$ siendo $p(\mathbf{x}|y)$ una distribución de probabilidad compuesta (mixture distribution MM) identificable.

Una MM es una distribución de probabilidad en la que los parámetros, o parte de ellos, son variables aleatorias.
Una familia de distribuciones $\{p_\theta\}$ es identificable si $\theta_1 \neq \theta_2 \Longrightarrow p_{\theta_1} \neq p_{\theta_2}$.

- Con una cantidad suficiente de datos no etiquetados se pueden identificar los componentes de la composición.

Modelo generativo en SSL

- Asumimos que conocemos $p(\mathbf{x}, y)$ con parámetros θ.
- La distribución conjunta y la marginal $p(X^l, Y^l, X^u|\theta) = \sum_{Y^u} p(X^l, Y^l, X^u, Y^u|\theta)$.
- Estimar θ usando MLE o MAP o por métodos bayesianos.
- Con una cantidad suficiente de datos no etiquetados se pueden identificar los componentes de la suma.

Se puede ver como clustering con información adicional sobre la marginal.

Ejemplos de modelos generativos

- Mixtura de gaussianas (GMM):
  - Clasificación de imágenes usando MLE.
- Mixtura de multinomiales (Naïve Bayes):
  - Categorización de textos usando MLE.
- Modelos de Markov ocultos (HMM):
  - Reconocimiento de voz usando el algoritmo de Baum y Welch.

Clasificación con GMM usando MLE
La mixtura

- Parámetros del modelo: $\theta = \{w_1, w_2, \mu_1, \mu_2, \Sigma_1, \Sigma_2\}$ proporciones de clases, medias y covarianzas.
- La GMM: $p(\mathbf{x}, y) = \sum_{i=1}^{2} w_i \mathcal{N}(\mu_i, \Sigma_i)$.
- Clasificación: $p(y|\mathbf{x}, \theta) = \frac{p(\mathbf{x}, y|\theta)}{\sum_{y'} p(\mathbf{x}, y'|\theta)}$.

Clasificación con GMM usando MLE
Clasificación binaria

- Usando datos etiquetados
  - $\log p(X_l, Y_l|\theta) = \sum_{i=1}^{l} \log p(y_i|\theta)p(\mathbf{x}_i|y_i,\theta)$.
  - La MLE es trivial: $w_i \rightarrow$frecuencias, $\mu_i \rightarrow$medias muestrales $\Sigma_i \rightarrow$covarianzas muestrales para cada clase.
- Con los datos etiquetados y no etiquetados:
  - $$\log p(X_l, Y_l, X_u|\theta) = \sum_{i=1}^{l} \log p(y_i|\theta)p(\mathbf{x}_i|y_i,\theta) + \sum_{i=l+1}^{l+u} \log \left(\sum_{y=1}^{2} p(y|\theta)p(\mathbf{x}_i|y,\theta) \right).$$
- La MLE es difícil, hay variables ocultas (Y^u).
  - Usaremos el algoritmo iterativo EM para obtener un máximo local.

Clasificación con GMM usando MLE
Aplicación de EM

1. Obtenemos una estimación inicial $\theta^0 = \left\{ w_1^0, w_2^0, \mu_1^0, \mu_2^0, \Sigma_1^0, \Sigma_2^0 \right\}$ por MLE usando (X^l, Y^l).
2. Paso E: etiqueta esperada $p(y|\mathbf{x}, \theta^k) = \dfrac{p(\mathbf{x}, y|\theta^k)}{\sum_{y'} p(\mathbf{x}, y'|\theta^k)} \; \forall \mathbf{x} \in X^u$
   - x se etiqueta de clase $c = 1:2$ con proporción $p(y = c|\mathbf{x}, \theta^k)$.
3. Paso M: MLE de θ con los ahora datos etiquetados de X^u.
   - $w_{1:2} \rightarrow$suma de las proporciones de cada clase.
   - $\mu_{1:2}$, $\Sigma_{1:2} \rightarrow$media y covarianza ponderadas de cada clase.
4. Repetimos 2 y 3 hasta alcanzar un máximo local, $k = 1, 2, ...$

- Es una especie de self-training.

Pros y contras de los modelos generativos

Pros

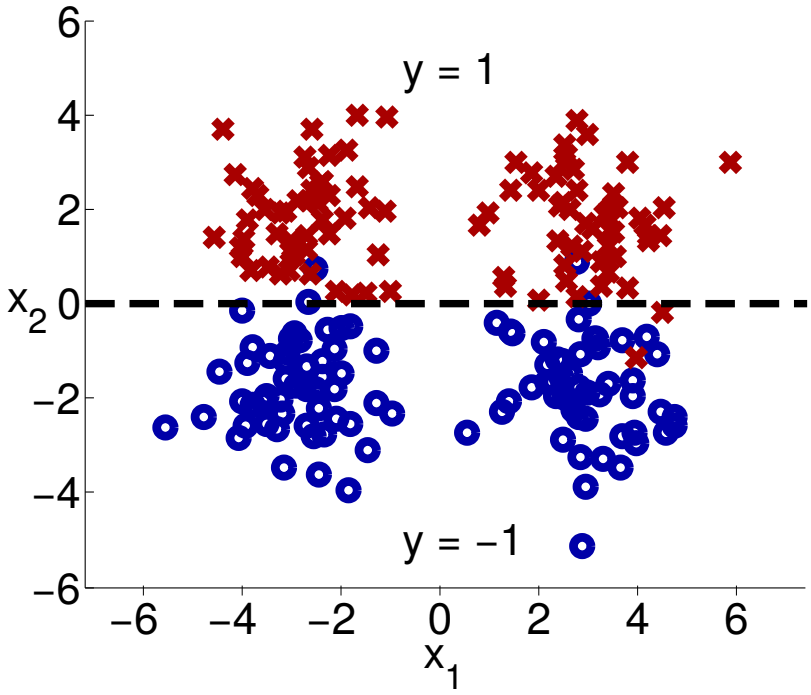
- Es un marco probabilístico claro y bien estudiado.
- Puede ser muy efectivo si es modelo es cercano al correcto.

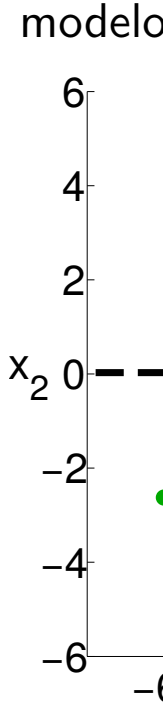
Contras

- A menudo es difícil verificar la corrección del modelo.
- La identificabilidad del modelo, no todas las distribuciones lo son (Gauss sí, Bernouilli y uniforme no).
- EM obtiene óptimo locales no necesariamente globales.
- Los datos no etiquetados pueden dañar si el modelo ($p(y)$ y $p(\mathbf{x}|y)$) no es correcto.

Ejemplo modelo incorrecto

Clasificación de textos por género y tema, un tema puede estar en varios géneros.



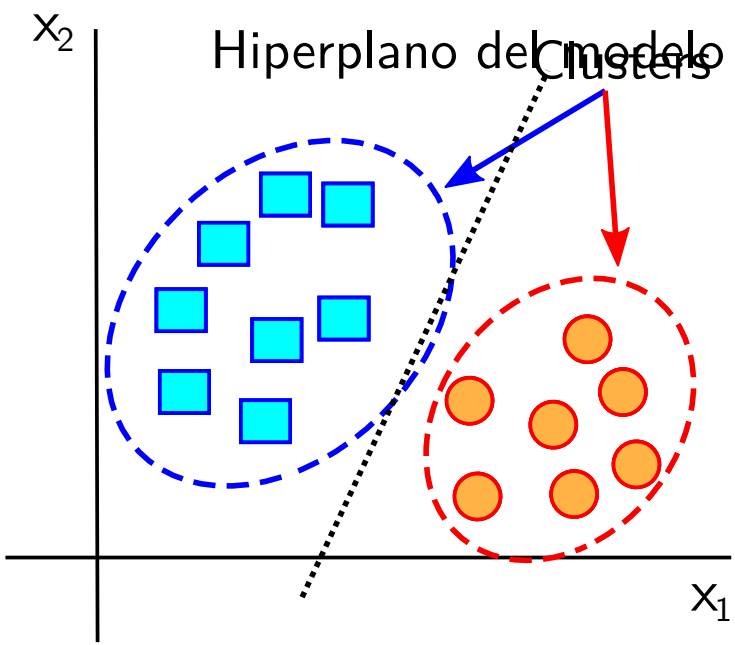


- Posibles soluciones heurísticas:

Variante: cluster-and-label

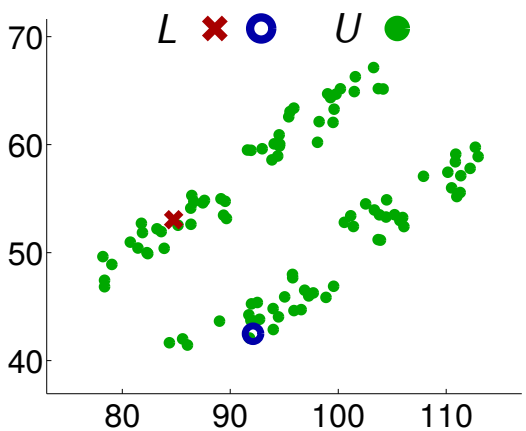
- Cluster-and-label es una variante discriminativa, en lugar de usar modelos probabilísticos usa algoritmos de clustering.

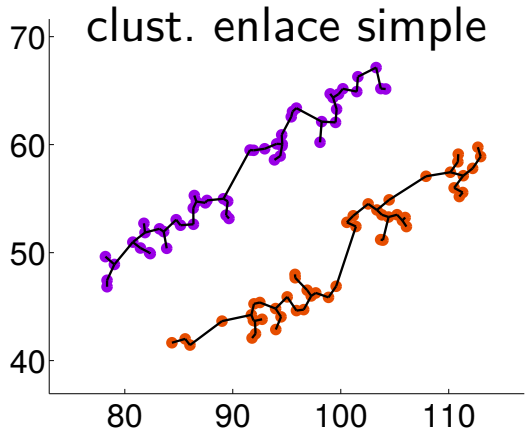
- Entradas $(x_1, y_1), ..., (x_l, y_l)$, $x_{l+1}, ..., x_{l+u}$, un alg. de clustering $\mathscr{A}$ y un alg. de clasificación SL $\mathscr{L}$.
  1. Agrupar $x_1, ..., x_l, x_{l+1}, ..., x_{l+u}$ usando $\mathscr{A}$.
  2. Para cada cluster sea S sus datos etiquetados.
  3. Entrenar un clasificador SL para S, $f_S = \mathscr{L}(S)$.
  4. Aplicar f_S a no etiquetados de S, así obtenemos $y_{l+1}, ..., y_{l+u}$.

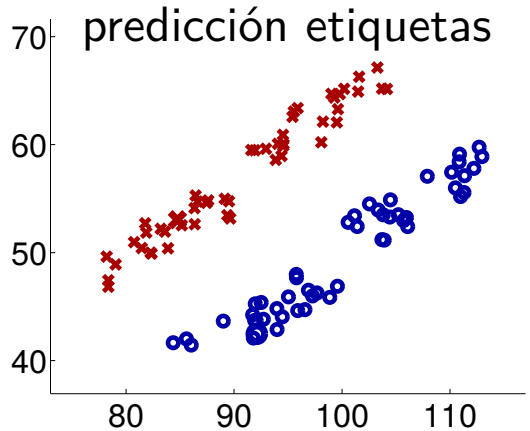


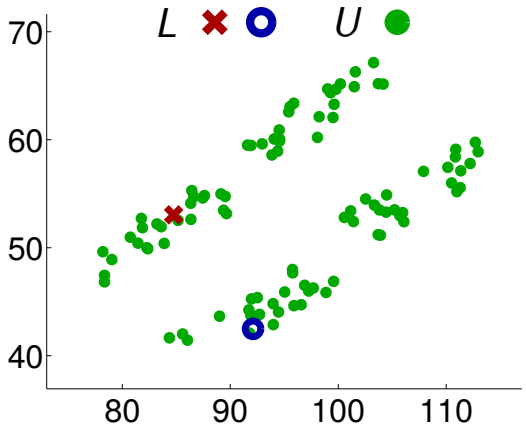
C-and-L puede funcionar o no

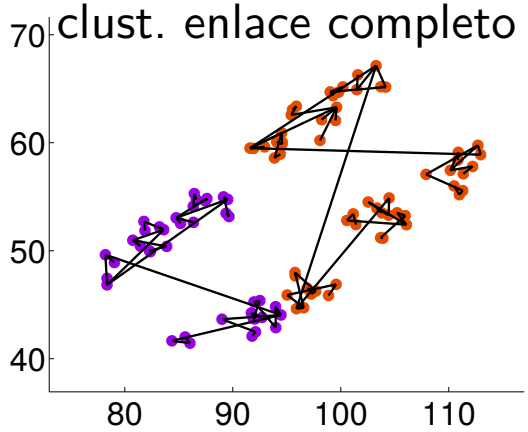
$\mathscr{A}$ clustering jerárquico aglomerativo, $\mathscr{L}$ voto de mayoría

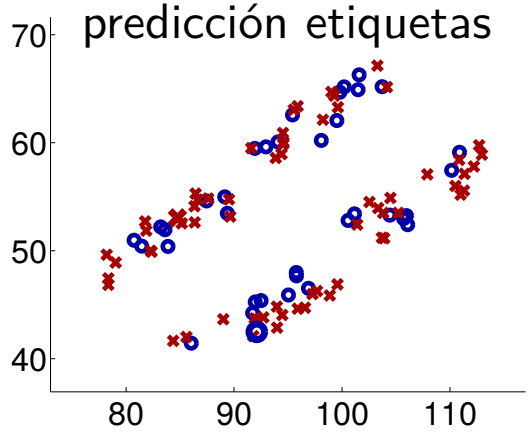












Pros y contras del cluster-and-label

Pros

- Funciona bastante bien cuando la hipótesis de los clusters se cumple y se elige el algoritmo de clustering apropiado.

Contras

- Si el algoritmo tiene muchos parámetros puede no ser aplicable en aplicaciones reales.

Modelos generativos con pomegranate

- Para el ejemplo con pomegranate cargaremos el notebook pomegranate_example.ipynb.
- Para un ejemplo más complejo cargaremos el notebook Tutorial_8_pomegranate_Semisupervised_Learning.ipynb.

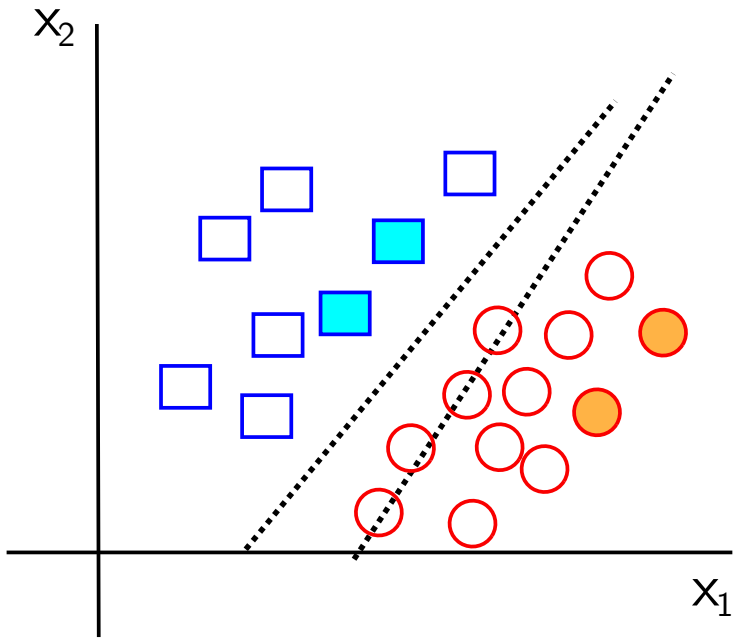
Actividad con pomegranate

Actividad

Clasificar mediante modelos generativos los datos de titanic.csv en "Survived" o no usando como características "Pclass", "Sex", "Age". Estudiar los datos antes para ver si hay problemas: datos no disponibles, etc. Dar la matriz de confusión.

SVM con datos etiquetados y no etiquetados

- SVM con solo datos etiquetados.
- Añadimos datos no etiquetados.
- S3VM con todos los datos.



Hipótesis de separación de baja densidad (de agrupamiento)

Los datos no etiquetados deben estar separados por un margen amplio.

La idea de S3VM

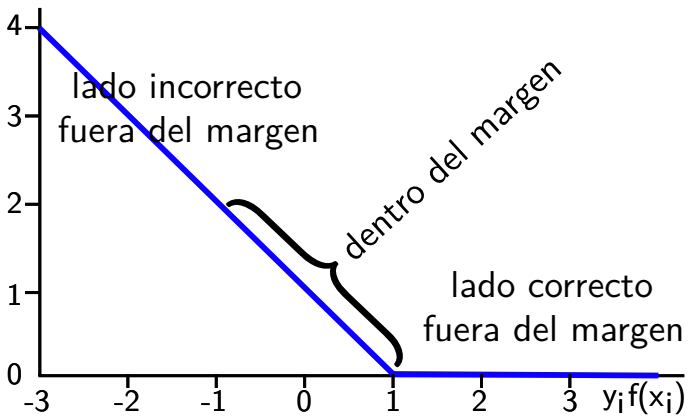
- Enumerar todos los posibles 2^u etiquetados de X^u.
- Entrenar un SVM supervisado para cada etiquetado y X^l.
- Elegir el SMV con margen más amplio.
- Semi-supervised SVMs (S3VMs) = Transductive SVMs (TSVMs)

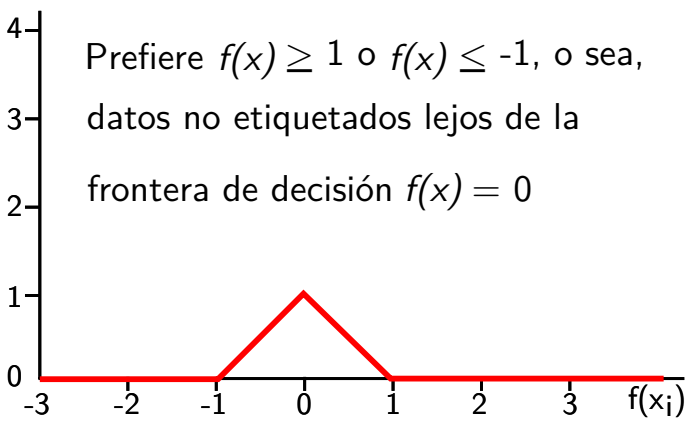
SVM supervisado

- $\min_{\mathbf{w},b,\xi_i} \frac{1}{2}\mathbf{w}^t\mathbf{w} + C\sum \xi_i$, siendo C regularización.
- llamando $f(\mathbf{x}) = \mathbf{w}^t\mathbf{x} + b$, las restricciones quedan: $yf(\mathbf{x}) \geq 1 - \xi_i$.
- Las variables de holgura (slack) $\xi_i \geq 0$, $\xi_i = \max(0, 1 - y_i f(\mathbf{x}_i))$ hinge loss (función de pérdida)
  - Esta función es convexa, garantiza óptimos globales.
- Clasificamos con $\texttt{sign}(f(\mathbf{x}))$.

Función objetivo de S3VM

- $\min_{\mathbf{w},b,\xi_i} \quad \min_{y_u \in \{-1,+1\}^n} \frac{1}{2}\mathbf{w}^t\mathbf{w} + C\sum \xi_i$
- con las restricciones:
  - $yf(\mathbf{x}) \geq 1 - \xi_i \;\; i = 1, \ldots, l$.
  - $yf(\mathbf{x}) \geq 1 - \xi_i \;\; i = l+1, \ldots, l+u$.
- Las variables de holgura (slack) $\xi_i \geq 0$,
  - $\xi_i = \max(0, 1 - y_i f(\mathbf{x}_i))$ para L (hinge loss).
  - $\xi_i = \max(0, 1 - |f(\mathbf{x}_i)|)$ para U (hat loss) .
- Clasificamos con $sign(f(\mathbf{x}))$.





Función objetivo de S3VM escrita sin restricciones

Función objetivo

$$\min_f \frac{1}{2}\mathbf{w}^t\mathbf{w} + C_l \sum_{i=1}^{l} \max(0, 1 - y_i f(x_i)) + C_u \sum_{i=l+1}^{l+u} \max(0, 1 - |f(x_i)|)$$

- La función de pérdida para no etiquetados no es convexa, luego no proporciona óptimos globales.
- Habrá que diseñar métodos de optimización especiales.

Métodos de optimización para S3VM

- Label-switch-retraining (S3VM^{light}).
- Gradient descent (∇S3VM).
- Continuation (cS3VM).
- Concave-convex procedure (CCCP).

Optimization Techniques for Semi-Supervised Support Vector Machines [Chapelle et al., 2008]
An overview on semi-supervised support vector machine [Ding et al.., 2015]

Restricción de clases equilibradas

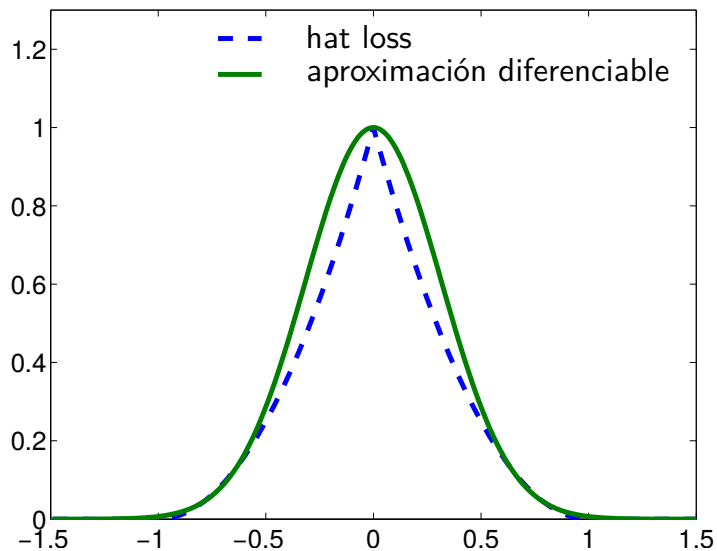
- La optimización directa de S3VM suele producir clasificaciones desequilibradas, más datos de los que debería en un clase.
- Solución: introducir una restricción en el problema a optimizar:
  - Equilibrio heurístico $\frac{1}{u}\sum_{i=l+1}^{l+u} y_i = \frac{1}{l}\sum_{i=1}^{l} y_i$.
  - Equilibrio de clase nivelada $\frac{1}{u}\sum_{i=l+1}^{l+u} f(x_i) = \frac{1}{l}\sum_{i=1}^{l} y_i$, preferible porque f es un número real y es más fácil de optimizar.

S3VM^{light}

- Entrenar un SVM con los datos etiquetados.
- Clasificar los datos no etiquetados.
- Bucle externo: empezar con valores pequeños de C_u e ir aumentando.
  - Obtener nuevo clasificador usando hinge loss para los dos tipos de datos en la función a optimizar.
  - Bucle interno:
    - Dos etiquetas son intercambiables si son distintas y al cambiar sus valores la función de pérdida disminuye.
    - Intercambiar etiquetas hasta que no queden etiquetas intercambiables.

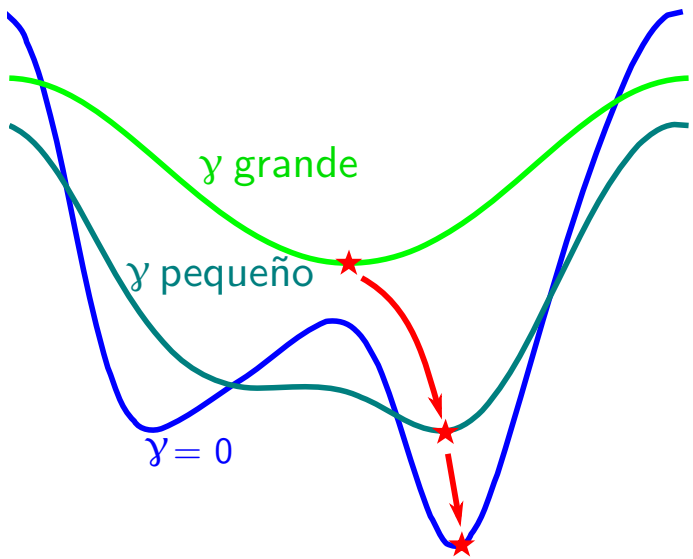
∇S3VM

- Similar a S3VM^{light} pero solo con el bucle externo.
- Usa $\exp(-5x^2)$ (es diferenciable) en lugar de hat loss para los datos no etiquetados en la función a optimizar.
- Hace $b = \frac{1}{l}\sum_{i=1}^{l} y_i$, equilibra las clases automáticamente.



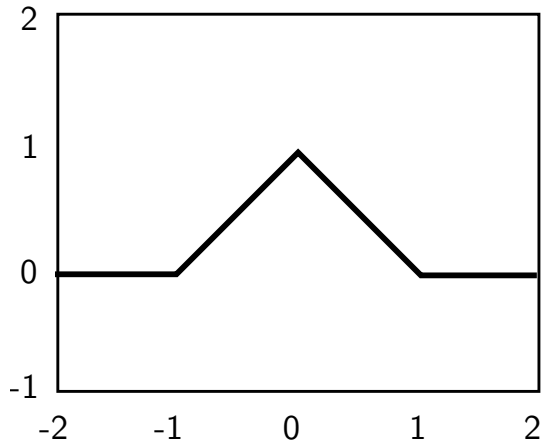
cS3VM

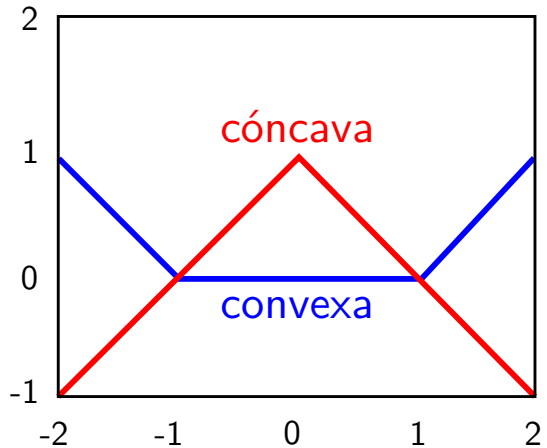
- Similar a $\nabla S3VM$, el bucle externo no varia C_u, sino suaviza la función objetivo por convolución con una gaussiana de varianza γ.
- Se va aumentando γ.
- La suavización llega hasta una función convexa, ¿γ?
- A la que se le halla el óptimo global.
- Recorriendo el camino inverso,
- se llega al óptimo global de la función original.



CCCP

- SVM con los datos etiquetados.
- Se clasifican los datos no etiquetados.
- $\max(0, 1 - |f(x_i)|) =$
  $\max(0, |f(x_i)| - 1) + (1 - |f(x_i)|)$
- La parte cóncava de la función objetivo se aproxima por una tangente.
- La función objetivo transformada es convexa, se halla su mínimo.
- Se va iterando hasta llegar al mínimo global de la función objetivo original.





Pros y contras de S3VM

Pros

- Aplicable donde SVM lo es.
- Dispone de un marco matemático claro.

Contras

- Difícil de optimizar.
- Puede quedar atrapado en óptimos locales.
- Resultados potencialmente peores que otros métodos.

S3VM con semisup-learn

- Para un ejemplo con semisup-learn cargaremos el notebook compare_linsvm_methods.ipynb.

S3VM con RSSL

- Para un ejemplo con RSSL cargaremos el notebook example-S4VM.Rmd.
- Para otro ejemplo con RSSL cargaremos el notebook example-TSVM.Rmd.

Actividades de S3VM

Actividad

Clasificar mediante S3VM los datos de titanic.csv en "Survived" o no usando como características "Pclass", "Sex", "Age". Estudiar los datos antes para ver si hay problemas: datos no disponibles, etc. Dar la matriz de confusión. Usar varios de los módulos comentados.

Introducción

- Construir un grafo con vértices representando a los datos y aristas representando la similitud entre los datos.
- Buscar técnicas para recortar el grafo:
  - Datos etiquetados
  - Heurísticas, p. ej. corte mínimo.

Hipótesis

Vértices unido por una arista de peso alto pertenecerán a la misma clase.

Construcción del grafo

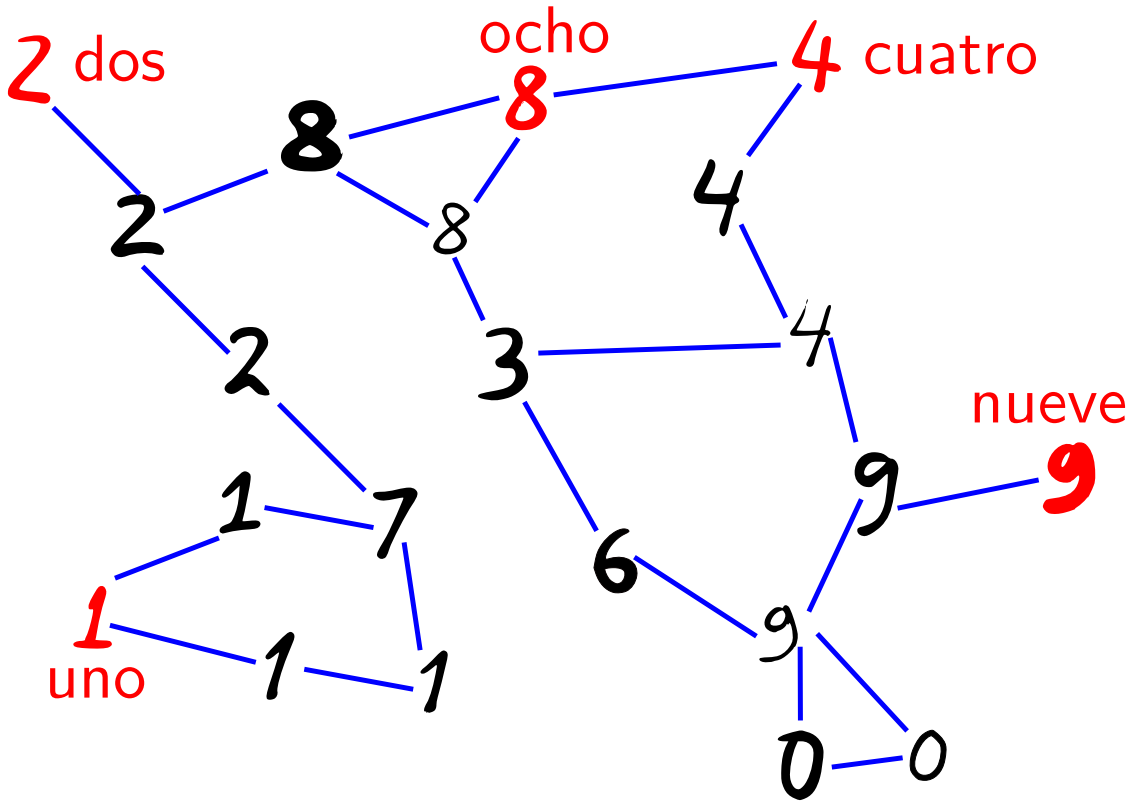
Construcción del grafo

- $\mathscr{G} =< \mathscr{V}, \mathscr{A} >$donde $\mathscr{V} = \{\mathbf{x}_i\}_{i=1}^{l+u}$.
- Conectar lo vértices usando una heurística:
  - ε-NN $\varepsilon > 0$: $\mathbf{x}_i$ y $\mathbf{x}_j$ están conectados si $dist(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) < \varepsilon$.
  - k-NN: $\mathbf{x}_i$ y $\mathbf{x}_j$ están conectados si $\mathbf{x}_j$ es uno de los k-NN de $\mathbf{x}_i$.
- Ponderación del grafo:
  - Ingenua: si $\mathbf{x}_i$ y $\mathbf{x}_j$ están conectados, el peso $w_{ij} = 1$.
  - Kernel gaussiano si $\mathbf{x}_i$ y $\mathbf{x}_j$ están conectados, el peso

$$w_{ij} = \exp\left(-\frac{dist^2(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j)}{\sigma^2}\right).$$

Ejemplo de grafo

Utilizamos la distancia entre píxeles.



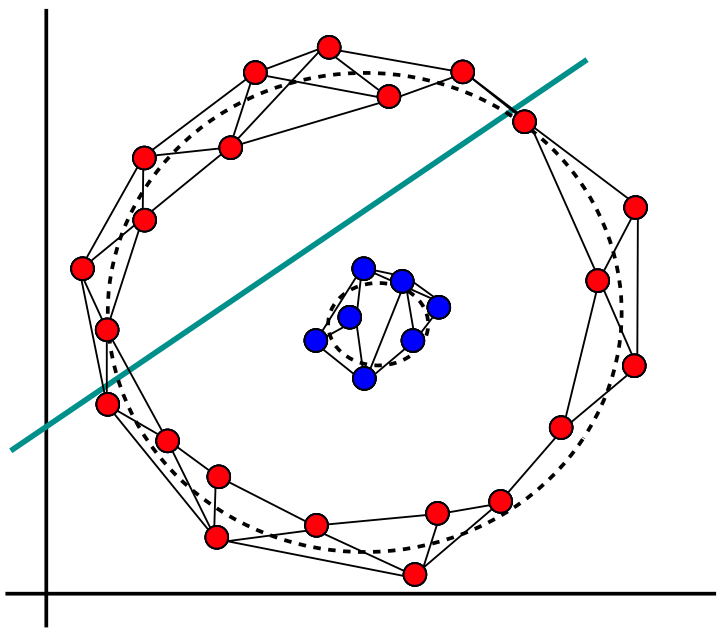
Algoritmos basados en grafos

- Propagación de etiquetas.
- Partición del grafo
  - Corte mínimo.
  - Función armónica.
  - Regularización de variedades.
  - Consistencia local y global.

Robust and Scalable Graph-Based Semisupervised Learning [Liu et al. 2012]

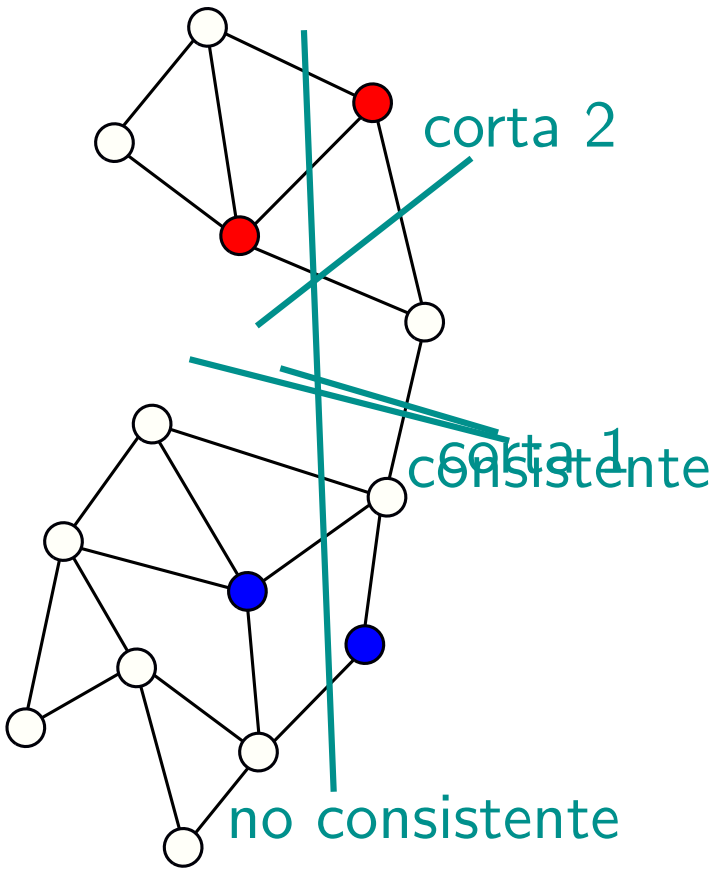
Propagación de etiquetas

- Entrenamiento SVM: no considerar la distribución de los datos.
- Para incluir los no etiquetdos en la predicción de etiquetas:
  - Conectar los puntos cercanos entre sí.
  - Propagar las etiquetas por los nodos conectados...
  - hasta completar el grafo.



Partición del grafo

- La idea es que la clasificación es una partición del grafo.
- Buscar una frontera de clasificación:
  - Consistente con los datos etiquetados
  - Particiones el grafo con cortes pequeños.
- Los distintos métodos varían en la forma de definir la función de corte.



Pros y contras de métodos basados en grafos

Pros

- Dispone de un marco matemático claro.
- El rendimiento es bueno si el grafo se ajusta a la tarea.
- Se puede extender a grafos dirigidos.

Contras

- El rendimiento es malo si el grafo lo es.
- Sensible a la estructura del grafo y a los pesos.

Clasificación mediante grafos con sklearn

- Para un ejemplo con LabelPropagation cargaremos el notebook plot_label_propagation_structure.ipnyb.
- Para un ejemplo con LabelSpreading cargaremos el notebook plot_label_propagation_digits.ipynb.

Actividad con sklearn

Actividad

Clasificar mediante sklearn los datos de titanic.csv en "Survived" o no usando como características "Pclass", "Sex", "Age". Estudiar los datos antes para ver si hay problemas: datos no disponibles, etc. Dar la matriz de confusión. Usar varios de los módulos comentados.

Clasificación mediante grafos con Weka

Explicar el uso de Weka en aprendizaje semi-supervisado.

Actividad listado métodos de SSl y RSSL

Actividad

Leer los manuales SLL.pdf y RSSL.pdf y clasificar los métodos que aparecen en las categoría que se han explicado.

Bibliografía I

- Semi-Supervised Learning, Olivier Chapelle; Bernhard Schölkopf; Alexander Zien. MIT-Press
- Semi-Supervised Learning Literature Survey, Xiaojin Zhu
- Hands-on Machine Learning with Scikit-Learn and TensorFlow, Aurélien Géron
- Python: Deeper Insights into Machine Learning, Sebastian Raschka; David Julian; John Hearty
- Scikit-learn : Machine Learning Simplified, Raúl Garreta; Guillermo Moncecchi; Trent Hauck; Gavin Hackeling
- Python: Real World Machine Learning, Prateek Joshi; John Hearty; Bastiaan Sjardin; Luca Massaron; Alberto Boschetti

Bibliografía II

- Machine Learning: End-to-End guide for Java developers, Richard M. Reese; Jennifer L. Reese; Boštjan Kaluža; Dr. Uday Kamath; Krishna Choppella
- Robust and Scalable Graph-Based Semisupervised Learning, Wei Liu; Jun Wang
- RSSL: Semi-supervised Learning in R, Jesse H. Krijthe
- Self-labeled techniques for semi-supervised learning: taxonomy, software and empirical study, Isaac Triguero; Salvador García; Francisco Herrera

Thank You

Aprendizaje semi-supervisado (SSL)

José Manuel Cuadra Troncoso