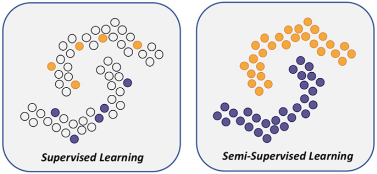
Частичное обучение

Виктор Китов

victorkitov.github.io

Курс поддержан фондом 'Интеллект'



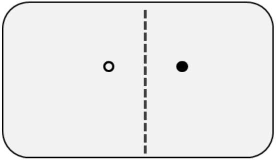
Победитель конкурса VK среди курсов по IT

Частичное обучение

- Доступны данные:
  $L = \{(x_1, y_1), ... (x_N, y_N)\}; \;\; U = \{x_{N+1}, ...x_{N+M}\}$.
- Использование частичного обучения (semi-supervised learning):
  - N мало, а $M \gg N$ - велико.
- Достаточно типичная ситуация:
  - классификация документов, много документов в интернете
  - классификация изображений, много изображений в интернете
  - распознавание речи, записи речи в свободном режиме
- Также применимо к трансдуктивному обучению (transductive learning)
  - когда тестовая выборка известна заранее, например kaggle
- Будем рассматривать только задачу классификации.

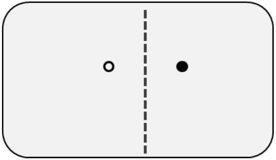
Мотивационный пример

Обучение с учителем:

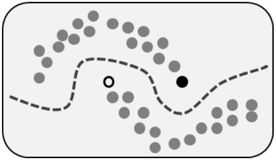


Мотивационный пример

Обучение с учителем:

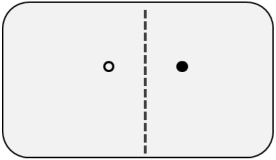


Частичное обучение:

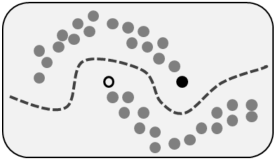


Мотивационный пример

Обучение с учителем:



Частичное обучение:



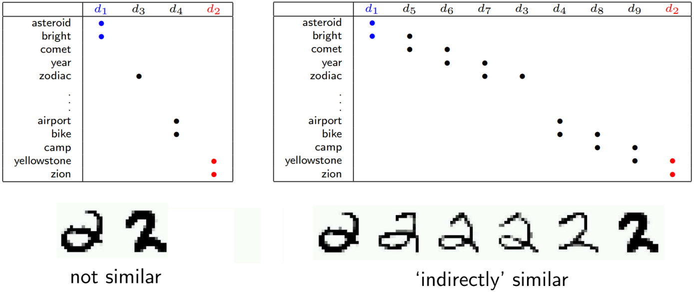
Предположение частичного обучения

Выход зависит плавно от входа.

- Кластеры/многообразия похожих объектов должны принадлежать одному классу.
- Если предположение не выполнено, то частичное обучение может работать хуже обучения с учителем.

Мотивационный пример[1]

Рассмотрим классификацию документов на "астрономию" и "путешествия" или классификацию рукописных цифр.



Напрямую объекты несравнимы, но могут быть сравнимы за счет попарной схожести с неразмеченными объектами.

[1] Источник иллюстрации.

Методы частичного обучения

- **Типы методов частичного обучения:**
    - препроцессинг на основе большой неразмеченной выборки
        - $\downarrow$ размерности, используя PCA
        - word2vec.
        - оценка расстояния Махаланобиса
    - мета-алгоритмы, использующие любой базовый алгоритм
        - самообучение (self-learning)
        - совместное обучение (co-learning)
    - специальные алгоритмы, использующие как размеченные, так и неразмеченные данные
        - кластеризация с метками
        - частичная генеративная классификация
        - трансдуктивный метод опорных векторов (transductive SVM)

Содержание

Самообучение

$$\text{классификатор: } f(x) = \arg\max_c g_c(x)$$

$$\text{уверенность: } M_f(x) = g_{f(x)}(x) - \max_{c \in C \setminus f(x)} g_c(x) \quad (\text{можно по } p(y|x))$$

Самообучение

$$\text{классификатор: } f(x) = \arg\max_c g_c(x)$$

$$\text{уверенность: } M_f(x) = g_{f(x)}(x) - \max_{c \in C \setminus f(x)} g_c(x) \quad (\text{можно по } p(y|x))$$

- Метод самообучения (self-training):

```
Z=L  # выборка, по которой учимся
ПОВТОРЯТЬ до условия остановки:
    обучить f(x) на Z
    применить f(x) к U\Z
    зададим расширение Δ = {(x_i, f(x_i)) ∈ U\Z : M_f(x) ≥ t}
    Z = Z ∪ Δ
```

- Выход: обученный $f(x)$ либо разметка тестовой выборки.
- Параметр t может выбираться, чтобы $|\Delta| = 0.05|U|$

Самообучение

- Условия остановки:
  - вся тестовая выборка размечена
  - точность на валидации перестала $\uparrow$
- Можно составлять Δ по наиболее уверенным предсказаниям, *сохраняя исходное распределение на классах*.
- Применим к любому $f(x)$
- Предположение: прогнозы, полученные с большой уверенностью, считаются верными.
  - самообучение сильно увеличивает переобученность $f(x)$.
  - отчасти исправляется совместным обучением (co-training)

Содержание

Совместное обучение через ансамбль

- Самообучение усиливает переобученность метода.
- Для $\downarrow$ переобучения будем использовать разные методы для разметки.

Идея совместного обучения

Разные методы дообучают друг друга.

- Совместное обучение через ансамбль:
  - применяем самообучение к ансамблю $f_1(x), ...f_K(x)$.
  - объекты, на которых большинство прогнозов базовых моделей сходятся, добавляются в выборку
- Снижается степень переобучения индивидуальной модели $f(x)$.

Совместное обучение

- Пусть $f_1(\cdot)$ и $f_2(\cdot)$ - одинаковые классификаторы, использующие различные наборы признаков F_1 и F_2, $F_1 \cap F_2 = \emptyset$.
- Совместное обучение (co-training):

```
Z₁=L на признаках F₁
Z₂=L на признаках F₂

ПОВТОРЯТЬ до условия остановки:
    обучить f₁(x) на Z₁
    применить f₁(x) к U\Z₂
    Δ₁ = {(xᵢ, f₁(xᵢ)) ∈ U\Z₂ : M_f1(xᵢ) ≥ t}
    Z₂ = Z₂ ∪ Δ₁

    обучить f₂(x) на Z₂
    применить f₂(x) к U\Z₁
    Δ₂ = {(xᵢ, f₂(xᵢ)) ∈ U\Z₁ : M_f2(xᵢ) ≥ t}
    Z₁ = Z₁ ∪ Δ₂
```

$Z_1 = L$ на признаках F_1
$Z_2 = L$ на признаках F_2

ПОВТОРЯТЬ до условия остановки:

- обучить $f_1(x)$ на Z_1
- применить $f_1(x)$ к $U \backslash Z_2$
- $\Delta_1 = \{(x_i, f_1(x_i)) \in U \backslash Z_2 : M_{f1}(x_i) \geq t\}$
- $Z_2 = Z_2 \cup \Delta_1$
- обучить $f_2(x)$ на Z_2
- применить $f_2(x)$ к $U \backslash Z_1$
- $\Delta_2 = \{(x_i, f_2(x_i)) \in U \backslash Z_1 : M_{f2}(x_i) \geq t\}$
- $Z_1 = Z_1 \cup \Delta_2$

Совместное обучение

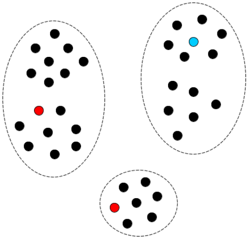
- Выход: обученные $f_1(x)$, $f_2(x)$ или разметка тестовой выборки.
- Предположение метода (когда прогнозы одной модели случайны для другой):

$$p(F_1, F_2|y) = p(F_1|y)p(F_2|y)$$

- Альтернативно $f_1(\cdot)$ и $f_2(\cdot)$ используют одинаковые признаки, но разные модели.
    - в этом случае инициализация $Z_1 = Z_2 = L$.

Содержание

Расширение меток на кластер



- Кластеризовать $L \cup U$.
- Расширить метки на кластер.
    - если нет меток - оставить неразмеченными / взять ближайшие
    - если несколько - голосование по большинству
- Простой, но слишком грубый метод обобщения меток
    - особенно если разные метки в одном кластере

K-средних для частичного обучения

Инициализировать μ_k, $k = 1, 2, ... K$.

ПОВТОРЯТЬ до сходимости:

для $n = N + 1, 2, ... N + M$:

определить кластер для x_i:

$$z_n = \arg\min_{k \in \{1,2,...K\}} ||x_n - \mu_k||_2^2$$

для $k = 1, 2, ... K$:

пересчитать центры:

$$\mu_k = \frac{1}{|C_k|} \sum_{n \in C_k} x_n$$

- $\mu_1, \mu_2, ...$ инициализируются средними для размеченных объектов.

Агломеративная кластеризация - алгоритм

инициализировать матрицу попарных расстояний $M \in \mathbb{R}^{N \times N}$ между кластерами из отдельных объектов $\{x_1\}, \ldots \{x_N\}$

ПОВТОРЯТЬ:

1) выбрать ближайшие кластеры i и j
2) объединить $i, j \to \{i + j\}$, если нет разных меток
3) удалить строки/столбцы i, j из матрицы расстояний
4) добавить строку/столбец для нового $\{i + j\}$ в матрицу

ПОКА не выполнено условие остановки

ВЕРНУТЬ иерархическую кластеризацию

Объединяем самые близкие $\{i\}$ и $\{j\}$,
в которых нет меток разных классов.

Содержание

Частичное обучение в генеративных моделях

- Генеративная модель оценивает $p\left(x, y|\theta\right)$, поэтому можем оценить $p(x|\theta) = \sum_y p(x, y|\theta)$ для U.

Частичное обучение в генеративных моделях

- Генеративная модель оценивает $p\left(x, y|\theta\right)$, поэтому можем оценить $p(x|\theta) = \sum_y p(x, y|\theta)$ для U.

$$\ln p(X, Y|\theta) = \sum_{n=1}^{N} \ln p(x_n, y_n|\theta) + \lambda \sum_{i=N+1}^{N+M} \ln p(x_i|\theta)$$

$$= \sum_{n=1}^{N} \ln p(x_n, y_n|\theta) + \lambda \sum_{n=N+1}^{N+M} \ln \left[\sum_{y=1}^{C} p(x_n, y|\theta) \right]$$

$$= \sum_{n=1}^{N} \ln \left[p(y_n|\theta) p(x_n|y_n, \theta) \right] + \lambda \sum_{n=N+1}^{N+M} \ln \left[\sum_{y=1}^{C} p(y) p(x_n|y, \theta) \right]$$

Частичное обучение в генеративных моделях

- Генеративная модель оценивает $p(x, y|\theta)$, поэтому можем оценить $p(x|\theta) = \sum_y p(x, y|\theta)$ для U.

$$\ln p(X, Y|\theta) = \sum_{n=1}^{N} \ln p(x_n, y_n|\theta) + \lambda \sum_{i=N+1}^{N+M} \ln p(x_i|\theta)$$

$$= \sum_{n=1}^{N} \ln p(x_n, y_n|\theta) + \lambda \sum_{n=N+1}^{N+M} \ln \left[\sum_{y=1}^{C} p(x_n, y|\theta) \right]$$

$$= \sum_{n=1}^{N} \ln \left[p(y_n|\theta) p(x_n|y_n, \theta) \right] + \lambda \sum_{n=N+1}^{N+M} \ln \left[\sum_{y=1}^{C} p(y) p(x_n|y, \theta) \right]$$

- $\lambda \in [0, 1]$ - значимость неразмеченной части.
- Важна адекватность генеративной модели $p(x|y)$.
- $\ln(\sum \cdots)$ - нет численного решения, используем EM-алгоритм (латентные переменные $y_{N+1}, ...y_{N+M}$).

EM алгоритм

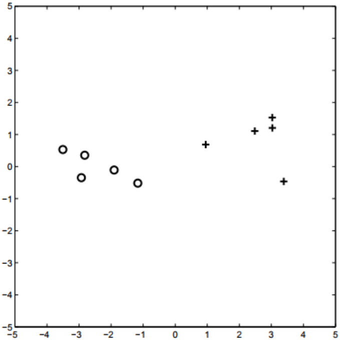
EM алгоритм: повторять до сходимости

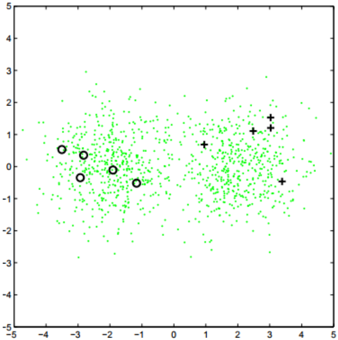
- для $n = N+1, ...N+M$, $c = 1, ...C$:
    - найти $p_{ny} = p(y_n = y|x_n, \widehat{\theta})$
    - уточнить $\widehat{\theta}$, решив:

$$\sum_{n=1}^{N} \ln\left[p(y_n|\theta)p(x_n|y_n,\theta)\right] + \lambda \sum_{n=N+1}^{N+M} \sum_{y=1}^{C} p_{ny} \ln\left[p(y|\theta)p(x_n|y,\theta)\right] \to \max_{\theta}$$

Пример использования

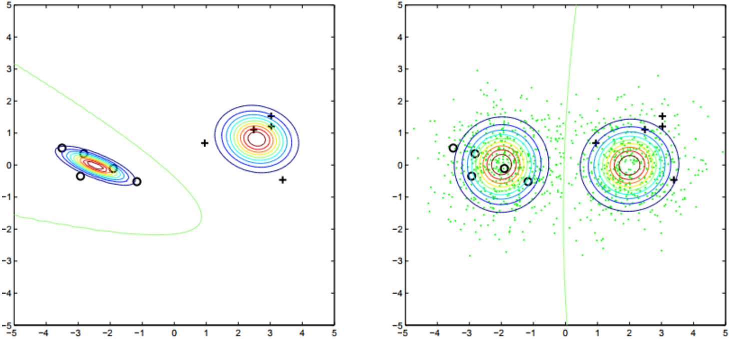
Пусть $y \in \{+1, -1\}$, $p(x|y) = \mathcal{N}(x|\mu_y, \Sigma_y)$
Размеченные и неразмеченные данные:





Пример использования

Решение без/с использованием неразмеченных данных:



Мультиномиальная модель

- $w_1, w_2, ...w_D$ - уникальные токены языка
- Решающее правило:

$$\widehat{y}(x) = \arg\max_y p(y)p(x|y)$$

- $x \in \mathbb{R}^D$, $x^i =$[сколько раз w_i встретилось в документе], $i = \overline{1, D}$
- $\theta_i^y = p\left(w_i \text{ на словопозиции } i|y\right)$ - не зависит от i и др. слов документа
- Генерация документа класса y:
  - для каждой словопозиции $i = 1, 2, ...n_{document}$:
    - сгенерировать слово $z_i \sim \textbf{Categorical}\left(\theta_1^y, \theta_2^y, ...\theta_D^y\right)$

Мультиномиальная модель

- $\left(\sum_i x^i\right)!$ - # перестановок всех слов документа
- $\prod_i \left(x^i\right)!$ - # перестановок в рамках встречи каждого слова
- $\frac{\left(\sum_i x^i\right)!}{\prod_i (x^i)!}$ - # документов где $w_1, w_2, \dots$ встретились $x^1, x^2, \dots$ раз.
- Вероятность:

$$p(x|y) = \frac{\left(\sum_i x^i\right)!}{\prod_i \left(x^i\right)!} \prod_{i=1}^{D} \left(\theta_i^y\right)^{x^i}$$

Оценка параметров

$$p(y) = \frac{\sum_{d=1}^{N} \mathbb{I}[y_d = y] + \lambda \sum_{d=N+1}^{N+M} p_{dy}}{N + \lambda M}$$

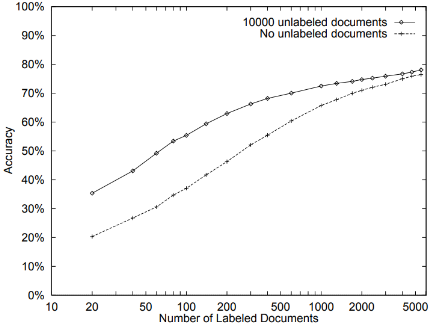
$$\theta_i^y = \frac{\sum_{d=1}^{N} n_{di}\mathbb{I}[y_d = y] + \alpha + \lambda \sum_{d=N+1}^{N+M} p_{dy} n_{di}}{\sum_{d=1}^{N} \sum_{i=1}^{D} n_{di}\mathbb{I}[y_d = y] + \alpha D + \lambda \sum_{d=N+1}^{N+M} \sum_{i=1}^{D} p_{dy} n_{di}}$$

- n_{di}=# раз w_i встретилось в документе d
- D=# документов
- $\alpha \geq 0$ - сглаживание Лапласа
- $\lambda \in [0,1]$ - важность частичного обучения

$$p_{dy} = p(y|d) = \frac{p(y,d)}{p(d)} = \frac{p(y)\,p(d|y)}{\sum_y p(y)\,p(d|y)}$$

Эксперимент

- Классификация новостей (20NewsGroups).
- 20 - 5000 размеченных документов, 10000 неразмеченных.
- Частичное обучение работает лучше:



Содержание

Обычный метод опорных векторов

- Метод опорных векторов (SVM) - линейный классификатор:

$$f(x) = \text{sign}\left(w^T x + w_0\right), \quad w, x \in \mathbb{R}^D, w_0 \in \mathbb{R}$$

- Отступ объекта x_n:

$$M(x_n, y_n) = \left(w^T x_n + w_0\right) y_n$$

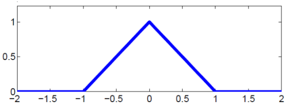
- Оптимизационная задача:

$$\frac{1}{2C} \|w\|^2 + \sum_{n=1}^{N} [1 - M(x_n, y_n)]_+ \to \min_{w, w_0}$$

- $\mathcal{L}(M) = [1 - M]_+$ штрафует за $M \leq 1$.

Трансдуктивный метод опорных векторов

$$\tilde{\mathcal{L}}(M) = [1 - |M|]_+ = \left[1 - \left|w^T x_n + w_0\right|\right]_+$$

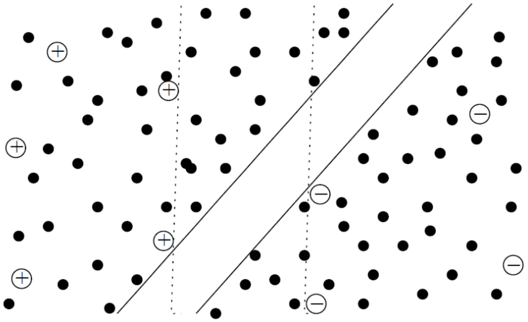


- не зависит от y_n
- штрафует объекты за близость к разделяющей гиперплоскости

Трансдуктивный метод опорных векторов (transductive SVM, TSVM, S3VM):

$$\frac{1}{2C}\|w\|^2 + \sum_{n=1}^{N}[1 - M(x_n, y_n)]_+ + \lambda \sum_{n=N+1}^{N+M}[1 - |M(x_n, y_n)|]_+ \to \min_{w, w_0}$$

Иллюстрация



- В кругах - размеченные объекты.
- Пунктиром - разделяющая граница SVM
- Сплошные линии - разделяющая граница TSVM

Идея метода - разделение областей низкой плотности.

Обсуждение

Преимущества:

- может быть обобщено ядрами
- существуют эффективные реализации

Недостатки:

- задача перестаёт быть выпуклой:
  - много локальных минимумов, нужно искать наилучший
- поощряет тривиальное решение, когда гиперплоскость далека от всех объектов
  - т.е. прогноз одним классом, поэтому рекомендуется оптимизировать при доп. ограничении[2]

$$\frac{1}{M}\sum_{n=N+1}^{N+M}\text{sign}\left(w^T x + w_0\right) = \frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N}\mathbb{I}\left[y_n = +1\right]$$

[2] Large Scale Transductive SVMs.

Содержание

Алгоритм распространения меток[3]

1. строим граф связей похожих объектов:
   - узлы - $x \in L \cup U$ и связи между близкими x_i, x_j:

   $$w_{ij} = e^{\left\|x_i - x_j\right\|^2 / \left(2\sigma^2\right)} = w_{ji} \text{ (можно и по-другому)}$$

2. вычисляем матрицу переходов $P \in \mathbb{R}^{(N+M)x(N+M)}$

$$P_{ij} = P\left(x_i \to x_j\right) = \frac{w_{ij}}{\sum_{k=1}^{N+M} w_{ik}}$$

3. Инициализируем ответы на объектах $f \in \mathbb{R}^{N+M}$.
   - $f_n := y_n$ для $n = 1, 2, ...N$.
   - $f_n := 0$ (не принципиально) для $n = N+1, ...N+M$.

[3] Детали метода.

Алгоритм распространения меток

- Алгоритм распространения меток (label propagation)
  - повторять до сходимости f:
    1. усреднить ответы по исходам из каждой вершины

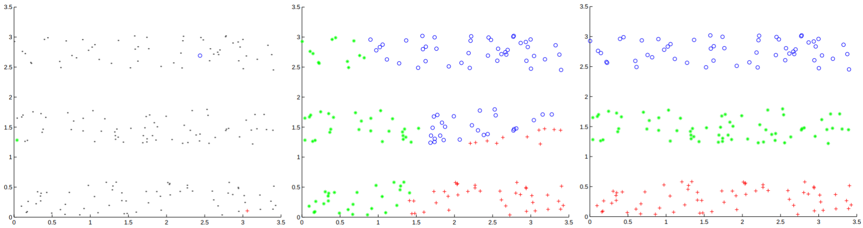
$$f := Pf \quad (\text{покомпонентно } \mathrm{f}(x_i) := \sum_{j \sim i} p_{ij} \mathrm{f}(x_j))$$

       либо по входам в каждую вершину

$$f^T := f^T P \quad (\text{покомпонентно } \mathrm{f}(x_j) := \sum_{i \sim j} \mathrm{f}(x_i) p_{ij})$$

    2. перезадать известные метки: $f_L := Y_L$
- Идейно это self-learning для KNN.

Визуализация работы



(a) The data (b) 1NN (c) Label Propagation

Регуляризация энергии графа

- Воспользуемся графом из алгоритма распространения меток.
- Энергия графа измеряет согласованность меток для соседних узлов

$$E(f) = \frac{1}{2}\sum_{i,j} w_{ij}\left(f(x_i) - f(x_j)\right)^2 = f^T \Delta f$$

- Найдем $f(x)$ из задачи

$$\sum_{n=1}^{N} \mathcal{L}(f(x_n), y_n) + \lambda_1 R(f) + \lambda_2 E(f) \to \min_f$$

- Варианты оптимизации:
  - по значениям $f \in \mathbb{R}^{N+M}$
  - по параметрам $f_w(x)$

Лапласиан графа

$$E(f) = \frac{1}{2}\sum_{i,j} w_{ij}\left(f(x_i) - f(x_j)\right)^2 = f^T \Delta f$$

где $\Delta = D - W$ - Лапласиан графа, $D, W \in \mathbb{R}^{(N+M)x(N+M)}$

$$D = \text{diag}\left(\sum_{j=1}^{N+M} w_{1j}, \sum_{j=1}^{N+M} w_{2j}, \ldots \sum_{j=1}^{N+M} w_{(N+M)j}\right)$$

$$W = \{w_{ij}\}_{i,j=1,\ldots N+M.}$$

Разобьём Лапласиан на блоки: $\Delta = \begin{bmatrix} \Delta_{LL} & \Delta_{LU} \\ \Delta_{UL} & \Delta_{UU} \end{bmatrix}$

$$\sum_{n=1}^{N} (f_n - y_n)^2 + f^T \Delta f \to \min_{f \in \mathbb{R}^{N+M}} \quad => \quad f_U = -\Delta_{UU}^{-1} \Delta_{UL} Y_L$$

Заключение

- Частичное обучение - использование неразмеченных объектов для уточнения прогнозов.
- Наиболее эффективно, когда N мало, $M \gg N$ велико.
  - при $N \gg 1$ не так эффективно.
- Предположение: близким объектам соответствуют похожие отклики.
- Подходы к частичному обучению:
  - мета-алгоритмы, строящиеся на базе других
    - самообучение, совместное обучение
  - кластеризация
    - обобщение меток на кластер, кластеризация с учётом меток
  - генеративные модели, учитывающие $p(x)$ для $x \in U$.
  - разделение областей высокой плотности (transductive SVM)
  - минимизация энергии на графе