Кластеризация и частичное обучение

К. В. Воронцов
vokov@forecsys.ru

Этот курс доступен на странице вики-ресурса
http://www.MachineLearning.ru/wiki
«Машинное обучение (курс лекций, К.В.Воронцов)»

МФТИ • 5 декабря 2020

Содержание

Постановка задачи кластеризации

Дано:

X — пространство объектов;

$X^\ell = \{x_1, \ldots, x_\ell\}$ — обучающая выборка;

$\rho\colon X \times X \to [0, \infty)$ — функция расстояния между объектами.

Найти:

Y — множество кластеров,

$a\colon X \to Y$ — алгоритм кластеризации,

такие, что:

— каждый кластер состоит из близких объектов;

— объекты разных кластеров существенно различны.

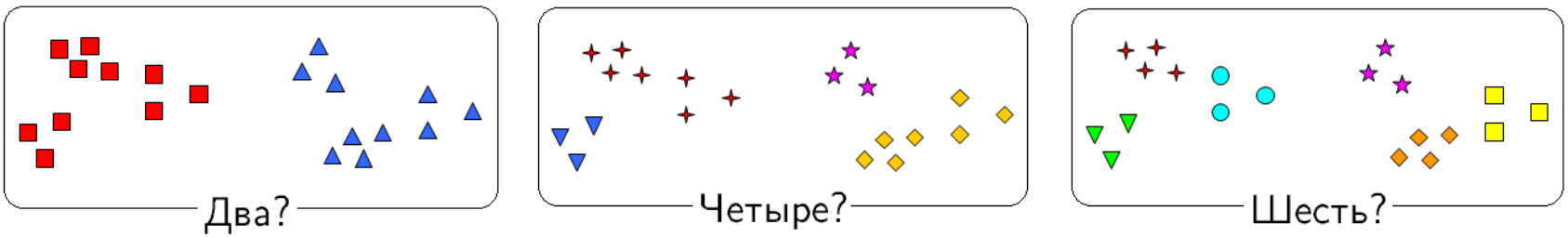
Это задача *обучения без учителя* (unsupervised learning).

Некорректность задачи кластеризации

Решение задачи кластеризации принципиально неоднозначно:

- точной постановки задачи кластеризации нет;
- существует много критериев качества кластеризации;
- существует много эвристических методов кластеризации;
- число кластеров $|Y|$, как правило, неизвестно заранее;
- результат кластеризации сильно зависит от метрики ρ, выбор которой также является эвристикой.

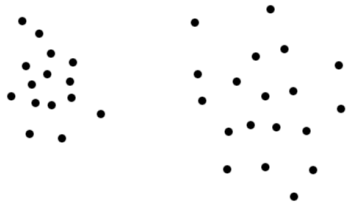
Пример: сколько здесь кластеров?



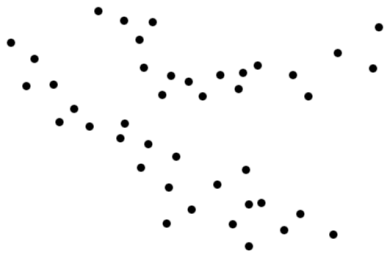
Цели кластеризации

- **Упростить дальнейшую обработку данных**,
  разбить множество X^ℓ на группы схожих объектов
  чтобы работать с каждой группой в отдельности
  (задачи классификации, регрессии, прогнозирования).
- **Сократить объём хранимых данных**,
  оставив по одному представителю от каждого кластера
  (задачи сжатия данных).
- **Выделить нетипичные объекты**,
  которые не подходят ни к одному из кластеров
  (задачи одноклассовой классификации).
- **Построить иерархию множества объектов,**
  пример — классификация животных и растений К.Линнея
  (задачи таксономии).

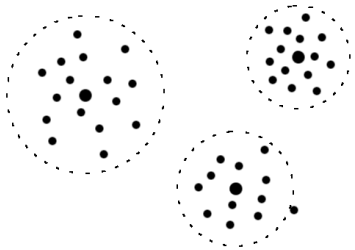
Типы кластерных структур



внутрикластерные расстояния, как правило, меньше межкластерных

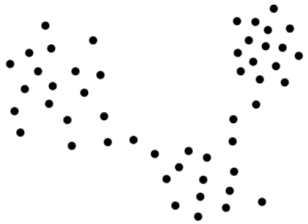


ленточные кластеры

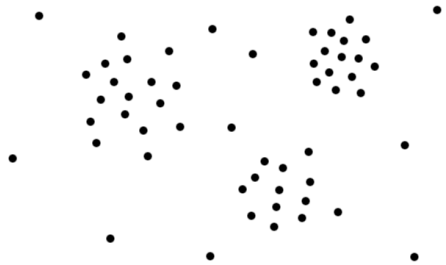


кластеры с центром

Типы кластерных структур



кластеры могут соединяться перемычками



кластеры могут накладываться на разрежен-
ный фон из редко расположенных объектов

кластеры могут перекрываться

Типы кластерных структур

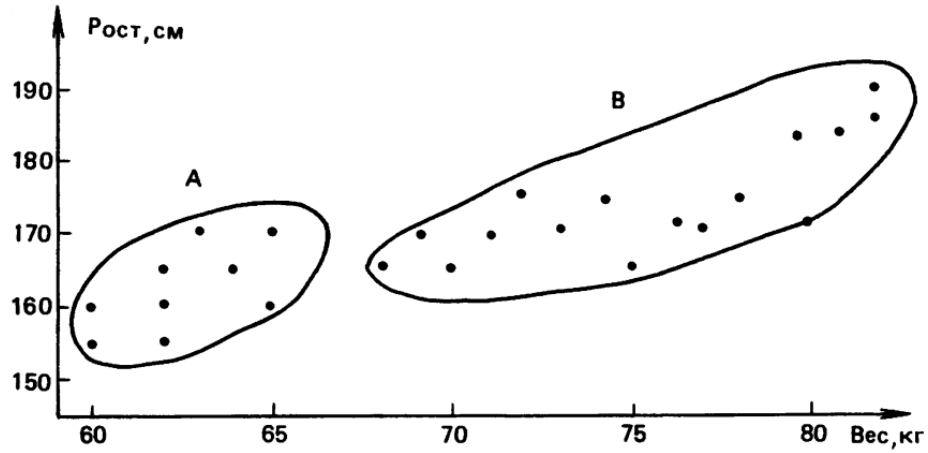
кластеры могут образовываться не по сходству, а по иным типам регулярностей

кластеры могут вообще отсутствовать

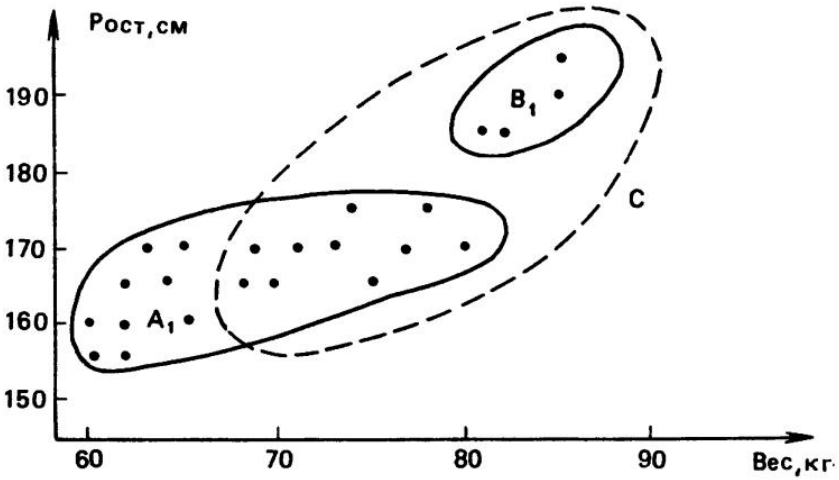
- Каждый метод кластеризации имеет свои ограничения и выделяет кластеры лишь некоторых типов.
- Понятие «тип кластерной структуры» зависит от метода и также не имеет формального определения.

Проблема чувствительности к выбору метрики

Результат зависит от нормировки признаков:



A — студентки,
B — студенты



после перенормировки
(сжали ось «вес» вдвое)

Постановка задачи частичного обучения (SSL)

Дано:

множество объектов X, множество классов Y;

$X^k = \{x_1, \ldots, x_k\}$ — размеченные объекты (labeled data);
$\{y_1, \ldots, y_k\}$

$U = \{x_{k+1}, \ldots, x_\ell\}$ — неразмеченные объекты (unlabeled data).

Два варианта постановки задачи:

- *Частичное обучение* (semi-supervised learning):
  построить алгоритм классификации $a\colon X \to Y$.
- *Трансдуктивное обучение* (transductive learning):
  зная все $\{x_{k+1}, \ldots, x_\ell\}$, получить метки $\{a_{k+1}, \ldots, a_\ell\}$.

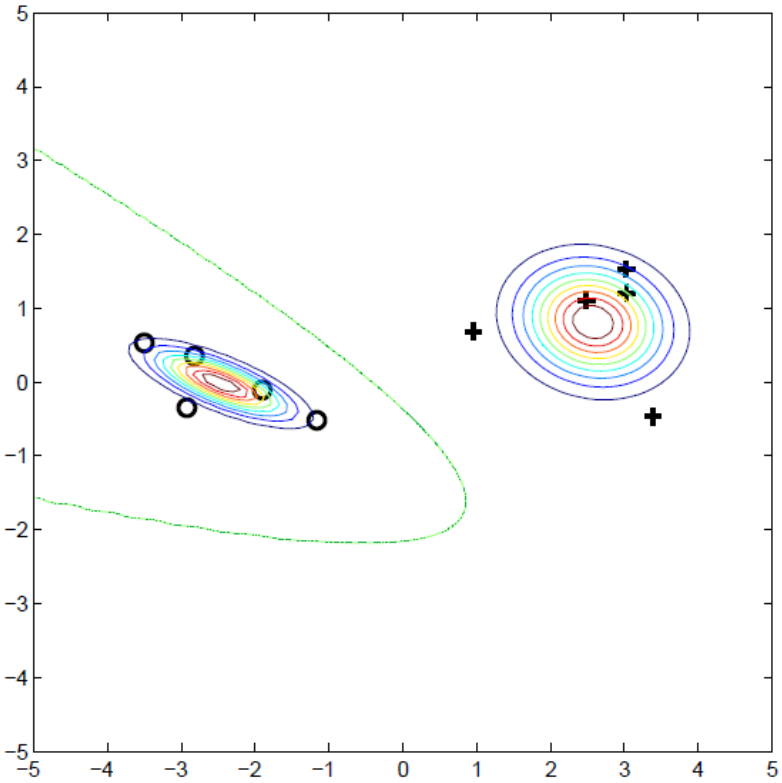
Типичные приложения:

классификация и каталогизация текстов, изображений, и т. п.

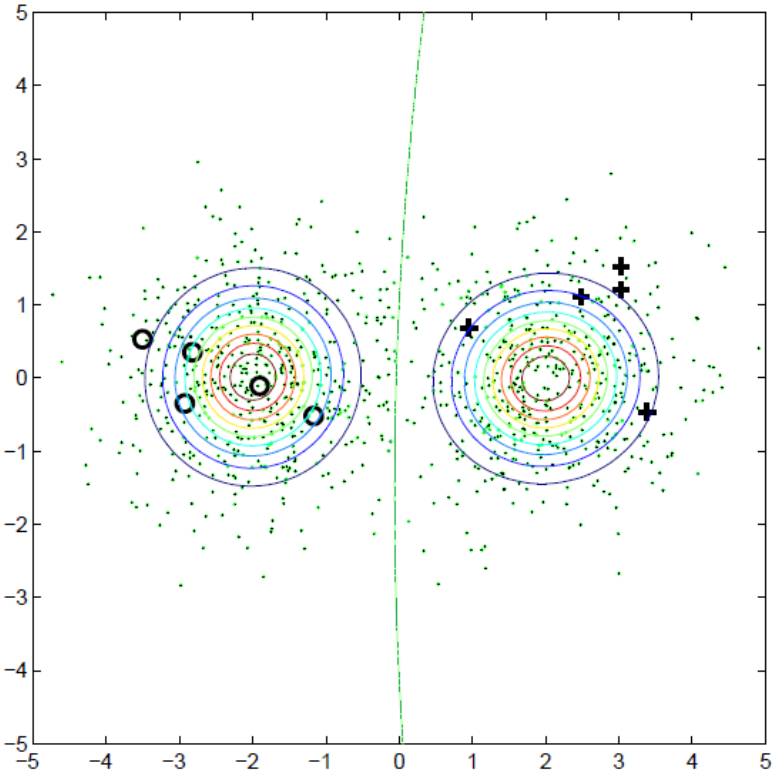
SSL не сводится к классификации

Пример 1. плотности классов, восстановленные:

по размеченным данным X^k

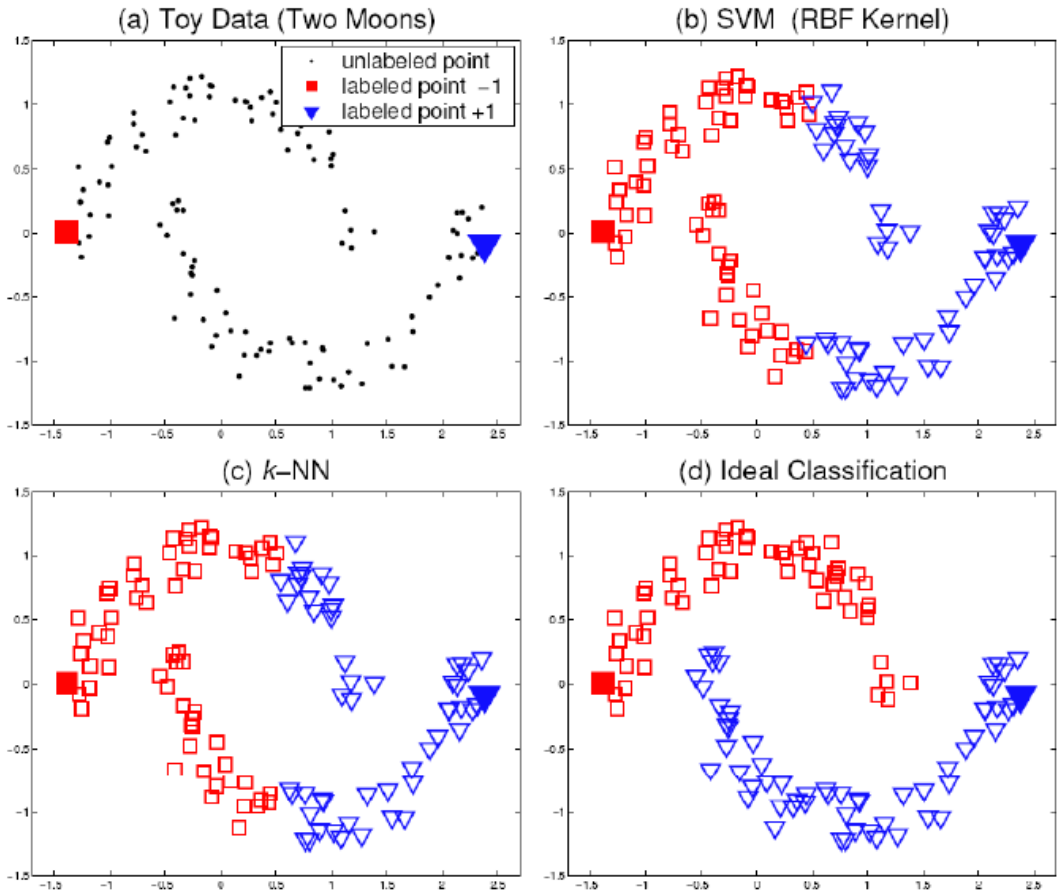


по полным данным X^ℓ



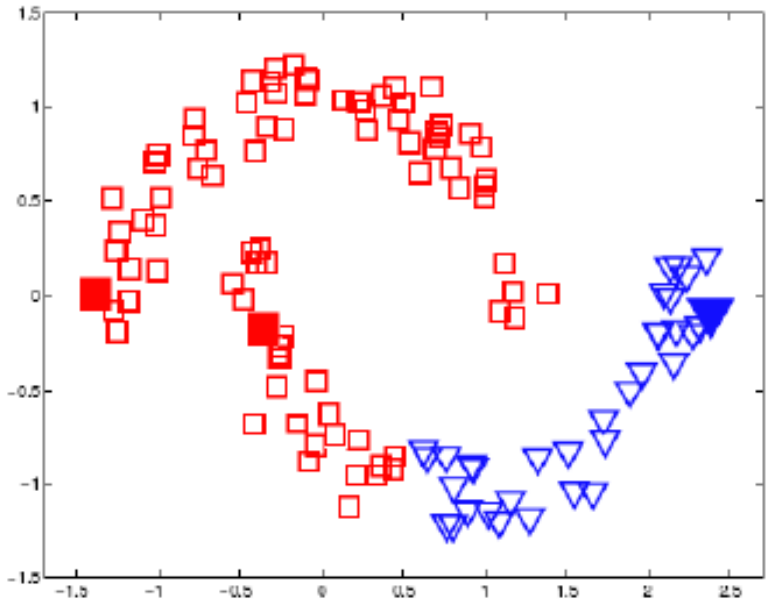
SSL не сводится к классификации

Пример 2. Методы классификации не учитывают кластерную структуру неразмеченных данных



Однако и к кластеризации SSL также не сводится

Пример 3. Методы кластеризации не учитывают приоритетность разметки над кластерной структурой.



Качество кластеризации в метрическом пространстве

Пусть известны только попарные расстояния между объектами.

- Среднее внутрикластерное расстояние:

$$F_0 = \frac{\sum\limits_{i<j} [a_i = a_j]\, \rho(x_i, x_j)}{\sum\limits_{i<j} [a_i = a_j]} \to \min .$$

- Среднее межкластерное расстояние:

$$F_1 = \frac{\sum\limits_{i<j} [a_i \neq a_j]\, \rho(x_i, x_j)}{\sum\limits_{i<j} [a_i \neq a_j]} \to \max .$$

- Отношение пары функционалов: $F_0 / F_1 \to \min$.

Качество кластеризации в линейном векторном пространстве

Пусть объекты x_i задаются векторами $\big(f_1(x_i), \ldots, f_n(x_i)\big)$.

- Сумма средних внутрикластерных расстояний:

$$\Phi_0 = \sum_{a \in Y} \frac{1}{|X_a|} \sum_{i:\, a_i = a} \rho(x_i, \mu_a) \to \min,$$

$X_a = \{x_i \in X^\ell \mid a_i = a\}$ — кластер a,
μ_a — центр масс кластера a.

- Сумма межкластерных расстояний:

$$\Phi_1 = \sum_{a,b \in Y} \rho(\mu_a, \mu_b) \to \max.$$

- Отношение пары функционалов: $\Phi_0 / \Phi_1 \to \min$.

Метод K-средних (K-means) для кластеризации

Минимизация суммы квадратов внутрикластерных расстояний:

$$\sum_{i=1}^{\ell} \|x_i - \mu_{a_i}\|^2 \to \min_{\{a_i\},\{\mu_a\}}, \quad \|x_i - \mu_a\|^2 = \sum_{j=1}^{n} \big(f_j(x_i) - \mu_{aj}\big)^2$$

Алгоритм Ллойда

вход: X^ℓ, $K = |Y|$; **выход:** центры кластеров μ_a, $a \in Y$;

$\mu_a :=$ начальное приближение центров, для всех $a \in Y$;

повторять

отнести каждый x_i к ближайшему центру:

$a_i := \arg\min\limits_{a \in Y} \|x_i - \mu_a\|, \quad i = 1, \ldots, \ell$;

вычислить новые положения центров:

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

пока a_i не перестанут изменяться;

Метод K-средних (K-means) для частичного обучения

Модификация алгоритма Ллойда

при наличии размеченных объектов $\{x_1, \ldots, x_k\}$

вход: X^ℓ, $K = |Y|$;

выход: центры кластеров μ_a, $a \in Y$;

$\mu_a :=$ начальное приближение центров, для всех $a \in Y$;

повторять

отнести каждый $x_i \in U$ к ближайшему центру:

$a_i := \arg\min\limits_{a \in Y} \|x_i - \mu_a\|, \quad i = k+1, \ldots, \ell$;

вычислить новые положения центров:

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

пока a_i не перестанут изменяться;

Метод K-средних — упрощение EM-алгоритма для GMM

EM-алгоритм: максимизация правдоподобия для разделения смеси гауссиан (GMM, Gaussian Mixture Model)

начальное приближение w_a, μ_a, Σ_a для всех $a \in Y$;

повторять

E-шаг: отнести каждый x_i к ближайшим центрам:

$$g_{ia} := P(a|x_i) \equiv \frac{w_a p_a(x_i)}{\sum_y w_y p_y(x_i)}, \quad a \in Y, \quad i = 1, \ldots, \ell;$$

$$a_i := \arg\max_{a \in Y} g_{ia}, \quad i = 1, \ldots, \ell;$$

M-шаг: вычислить новые положения центров:

$$\mu_{ad} := \frac{1}{\ell w_a} \sum_{i=1}^{\ell} g_{ia} f_d(x_i), \quad a \in Y, \quad d = 1, \ldots, n;$$

$$\sigma^2_{ad} := \frac{1}{\ell w_a} \sum_{i=1}^{\ell} g_{ia} (f_d(x_i) - \mu_{ad})^2, \quad a \in Y, \; d = 1, \ldots, n;$$

$$w_a := \frac{1}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} g_{ia}, \quad a \in Y;$$

пока a_i не перестанут изменяться;

Сравнение EM-алгоритма для GMM и метода k-средних

Основные отличия GMM-EM и k-means:

- GMM-EM: мягкая кластеризация: $g_{ia} = \mathrm{P}(a|x_i)$
  k-means: жёсткая кластеризация: $g_{ia} = [a_i = a]$
- GMM-EM: кластеры эллиптические, настраиваемые
  k-means: кластеры сферические, не настраиваемые

Гибриды (упрощение GMM-EM — усложнение k-means):

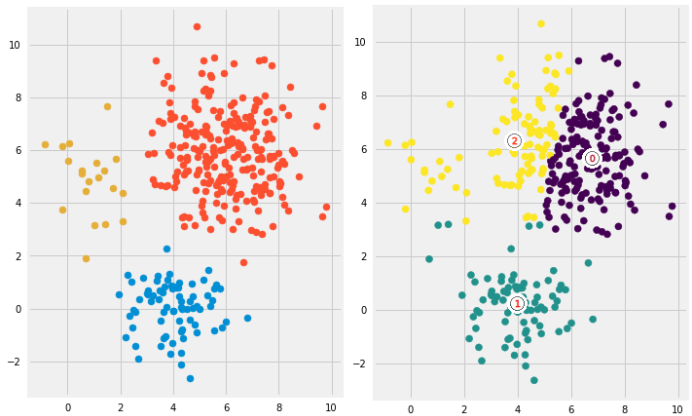
- GMM-EM с жёсткой кластеризацией на E-шаге
- GMM-EM без настройки дисперсий (сферические гауссианы)

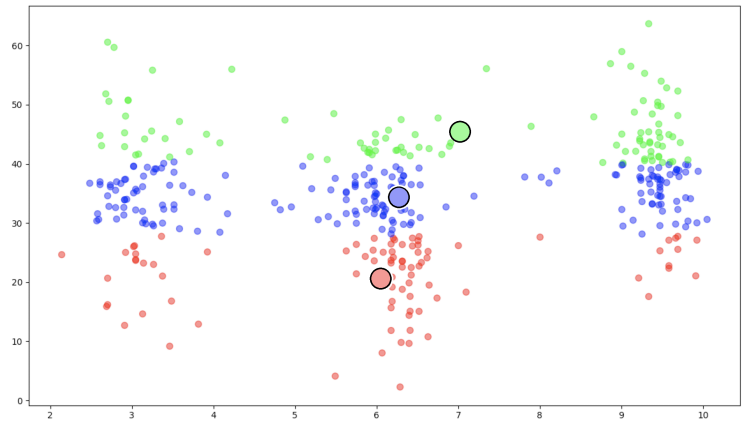
Недостатки k-means:

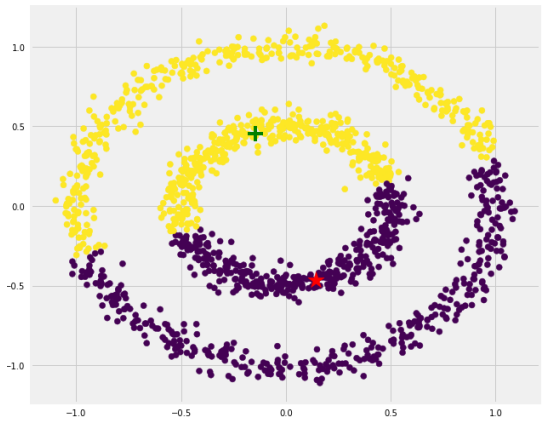
- чувствительность к выбору начального приближения
- медленная сходимость (пользуйтесь k-means++)

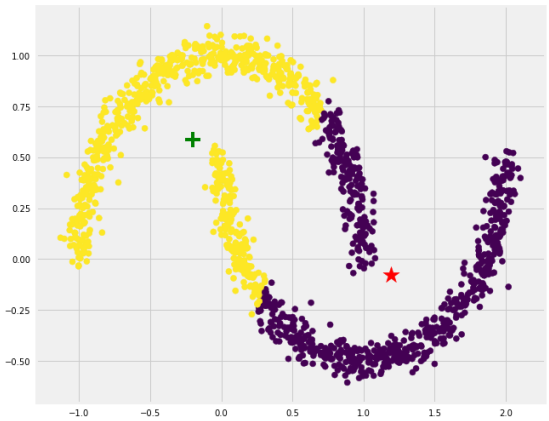
Примеры неудачной кластеризации k-means

Причина — неудачное начальное приближение или существенная негауссовость кластеров







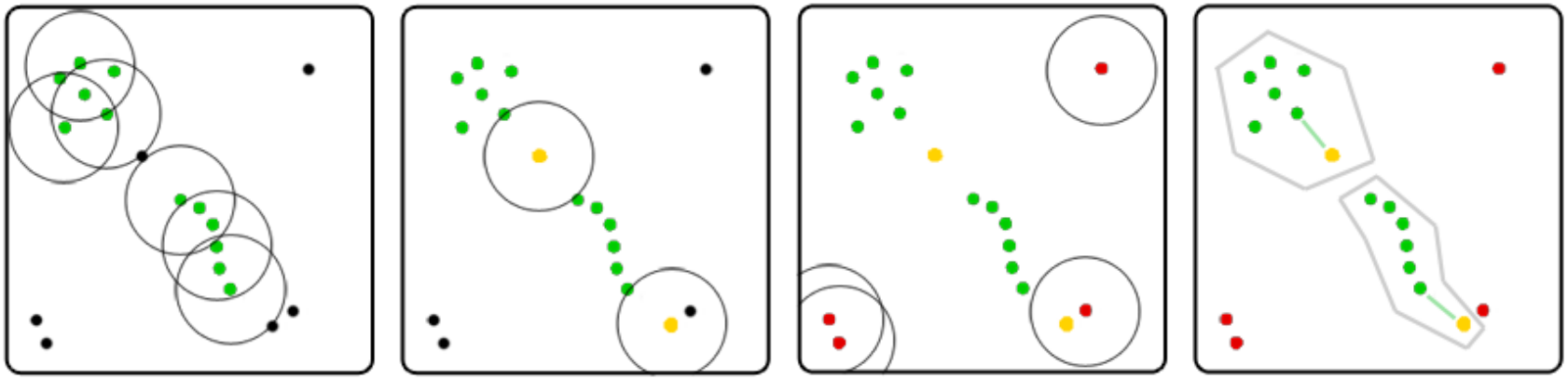


Алгоритм кластеризации DBSCAN
(Density-Based Spatial Clustering of Applications with Noise)

Объект $x \in U$, его ε-окрестность $U_\varepsilon(x) = \{u \in U : \rho(x,u) \leqslant \varepsilon\}$

Каждый объект может быть одного из трёх типов:

- корневой: имеющий плотную окрестность, $|U_\varepsilon(x)| \geqslant m$
- граничный: не корневой, но в окрестности корневого
- шумовой (выброс): не корневой и не граничный



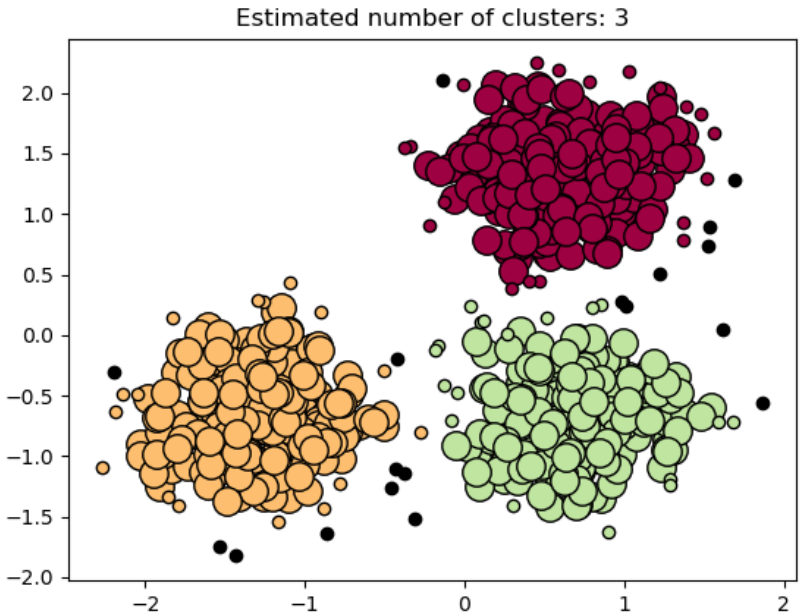
Ester, Kriegel, Sander, Xu. A density-based algorithm for discovering clusters in large spatial databases with noise. KDD-1996.

Алгоритм кластеризации DBSCAN

вход: выборка $X^\ell = \{x_1, \ldots, x_\ell\}$; параметры ε и m;
выход: разбиение выборки на кластеры и шумовые выбросы;
$U := X^\ell$ — непомеченные; $a := 0$;
пока в выборке есть непомеченные точки, $U \neq \varnothing$:
  взять случайную точку $x \in U$;
  если $|U_\varepsilon(x)| < m$ **то**
    пометить x как, возможно, шумовой;
  иначе
    создать новый кластер: $K := U_\varepsilon(x)$; $a := a + 1$;
    для всех $x' \in K$, не помеченных или шумовых
      если $|U_\varepsilon(x')| \geqslant m$ **то** $K := K \cup U_\varepsilon(x')$;
      иначе пометить x' как граничный кластера K;
    $a_i := a$ для всех $x_i \in K$;
    $U := U \setminus K$;

Преимущества алгоритма DBSCAN

- быстрая кластеризация больших данных:
  $O(\ell^2)$ в худшем случае,
  $O(\ell \ln \ell)$ при эффективной реализации $U_\varepsilon(x)$;
- кластеры произвольной формы (долой центры!);
- деление объектов на корневые, граничные, шумовые.



Агломеративная иерархическая кластеризация

Алгоритм иерархической кластеризации (Ланс, Уильямс, 1967): итеративный пересчёт расстояний R_{UV} между кластерами U, V.

$C_1 := \{\{x_1\}, \ldots, \{x_\ell\}\}$ — все кластеры 1-элементные;
$R_{\{x_i\}\{x_j\}} := \rho(x_i, x_j)$ — расстояния между ними;
для всех $t = 2, \ldots, \ell$ (t — номер итерации):
    найти в C_{t-1} пару кластеров (U, V) с минимальным R_{UV};
    слить их в один кластер:
    $W := U \cup V$;
    $C_t := C_{t-1} \cup \{W\} \setminus \{U, V\}$;
    для всех $S \in C_t$
        вычислить R_{WS} по формуле Ланса-Уильямса:
        $R_{WS} := \alpha_U R_{US} + \alpha_V R_{VS} + \beta R_{UV} + \gamma \left| R_{US} - R_{VS} \right|$;

Алгоритм Ланса-Уильямса для частичного обучения

Алгоритм иерархической кластеризации (Ланс, Уильямс, 1967): итеративный пересчёт расстояний R_{UV} между кластерами U, V.

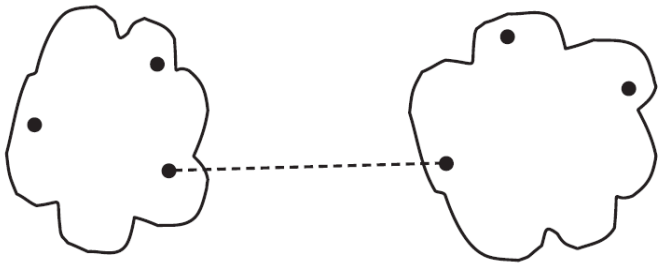
$C_1 := \{\{x_1\}, \ldots, \{x_\ell\}\}$ — все кластеры 1-элементные;
$R_{\{x_i\}\{x_j\}} := \rho(x_i, x_j)$ — расстояния между ними;
для всех $t = 2, \ldots, \ell$ (t — номер итерации):
  найти в C_{t-1} пару кластеров (U, V) с минимальным R_{UV},
  при условии, что в $U \cup V$ нет объектов с разными метками;
  слить их в один кластер:
  $W := U \cup V$;
  $C_t := C_{t-1} \cup \{W\} \setminus \{U, V\}$;
  для всех $S \in C_t$
    вычислить R_{WS} по формуле Ланса-Уильямса:
    $R_{WS} := \alpha_U R_{US} + \alpha_V R_{VS} + \beta R_{UV} + \gamma \left| R_{US} - R_{VS} \right|$;

Частные случаи формулы Ланса-Уильямса

1. Расстояние ближнего соседа:

$$R^{\text{б}}_{WS} = \min_{w \in W, s \in S} \rho(w,s);$$

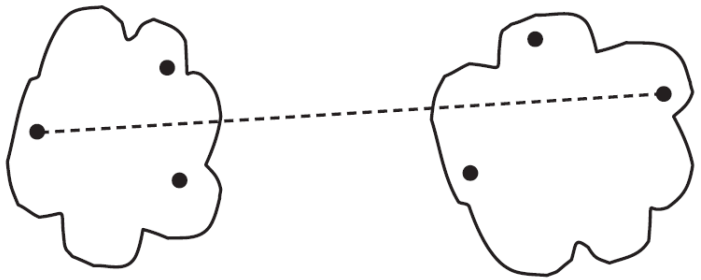
$$\alpha_U = \alpha_V = \tfrac{1}{2}, \ \ \beta = 0, \ \ \gamma = -\tfrac{1}{2}.$$



2. Расстояние дальнего соседа:

$$R^{\text{д}}_{WS} = \max_{w \in W, s \in S} \rho(w,s);$$

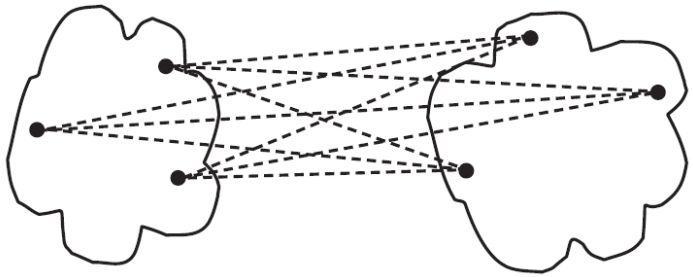
$$\alpha_U = \alpha_V = \tfrac{1}{2}, \ \ \beta = 0, \ \ \gamma = \tfrac{1}{2}.$$



3. Групповое среднее расстояние:

$$R^{\text{г}}_{WS} = \frac{1}{|W||S|} \sum_{w \in W} \sum_{s \in S} \rho(w,s);$$

$$\alpha_U = \frac{|U|}{|W|}, \ \ \alpha_V = \frac{|V|}{|W|}, \ \ \beta = \gamma = 0.$$



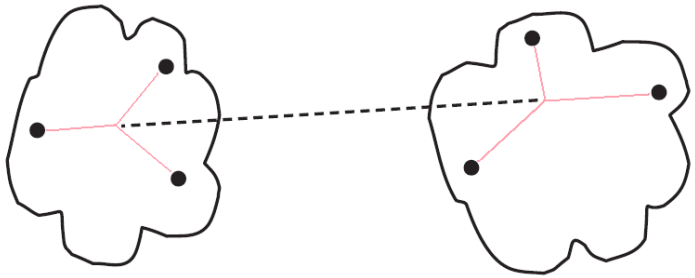
Частные случаи формулы Ланса-Уильямса

4. Расстояние между центрами:

$$R^{\text{ц}}_{WS} = \rho^2\Big(\sum_{w\in W}\frac{w}{|W|}, \sum_{s\in S}\frac{s}{|S|}\Big);$$

$$\alpha_U = \frac{|U|}{|W|}, \quad \alpha_V = \frac{|V|}{|W|},$$

$$\beta = -\alpha_U\alpha_V, \quad \gamma = 0.$$



5. Расстояние Уорда:

$$R^{\text{у}}_{WS} = \frac{|S||W|}{|S|+|W|}\,\rho^2\Big(\sum_{w\in W}\frac{w}{|W|}, \sum_{s\in S}\frac{s}{|S|}\Big);$$

$$\alpha_U = \frac{|S|+|U|}{|S|+|W|}, \quad \alpha_V = \frac{|S|+|V|}{|S|+|W|}, \quad \beta = \frac{-|S|}{|S|+|W|}, \quad \gamma = 0.$$

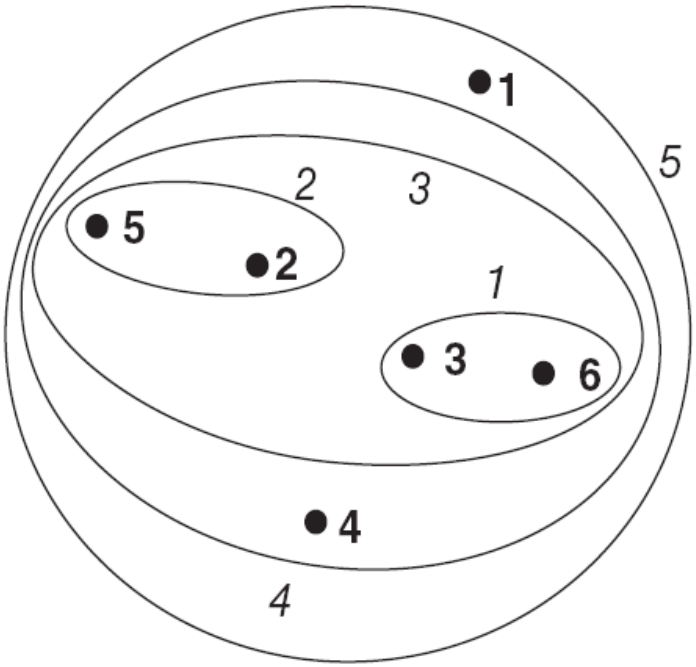
Проблема выбора

Какая функция расстояния лучше?

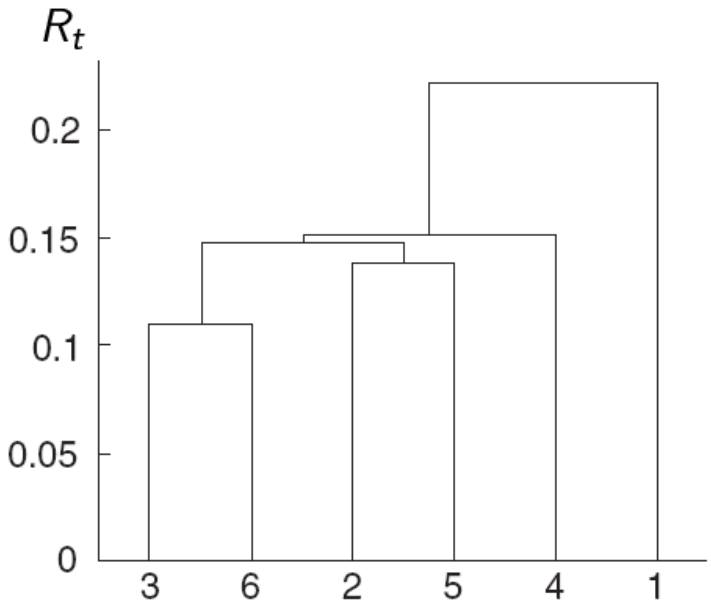
Визуализация кластерной структуры

1. Расстояние ближнего соседа:

Диаграмма вложения



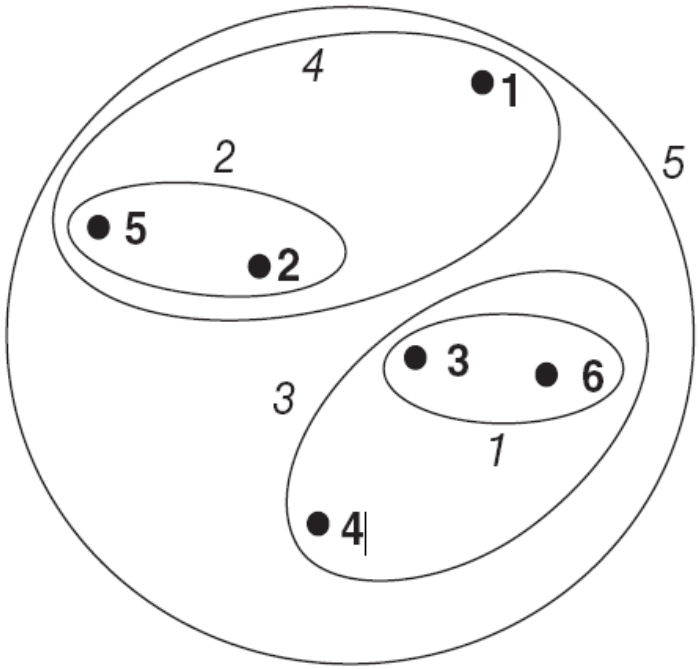
Дендрограмма



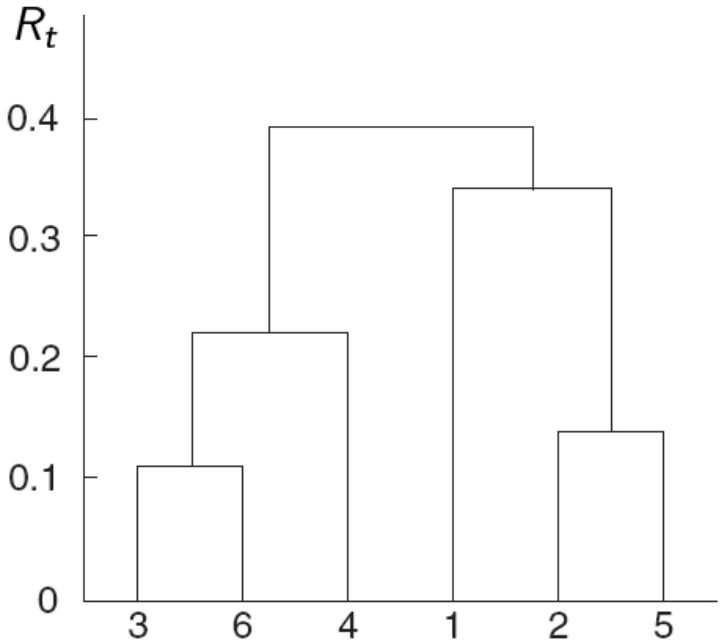
Визуализация кластерной структуры

2. Расстояние дальнего соседа:

Диаграмма вложения



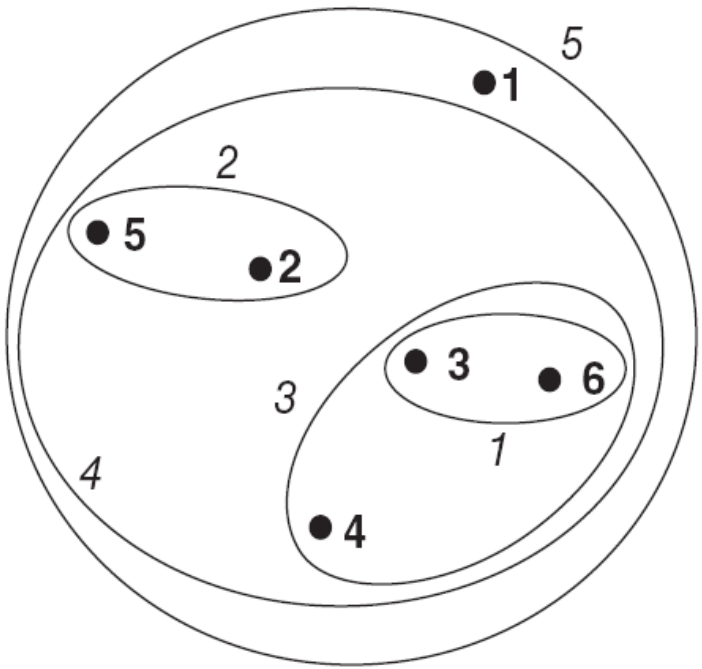
Дендрограмма



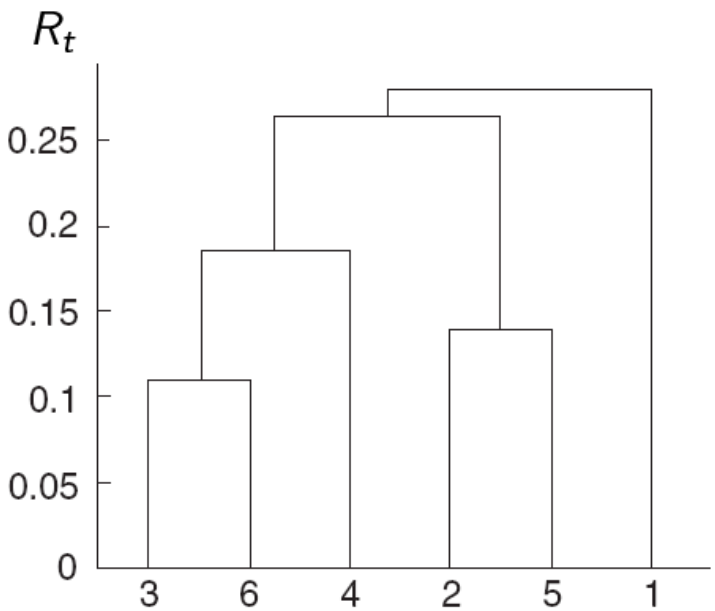
Визуализация кластерной структуры

3. Групповое среднее расстояние:

Диаграмма вложения



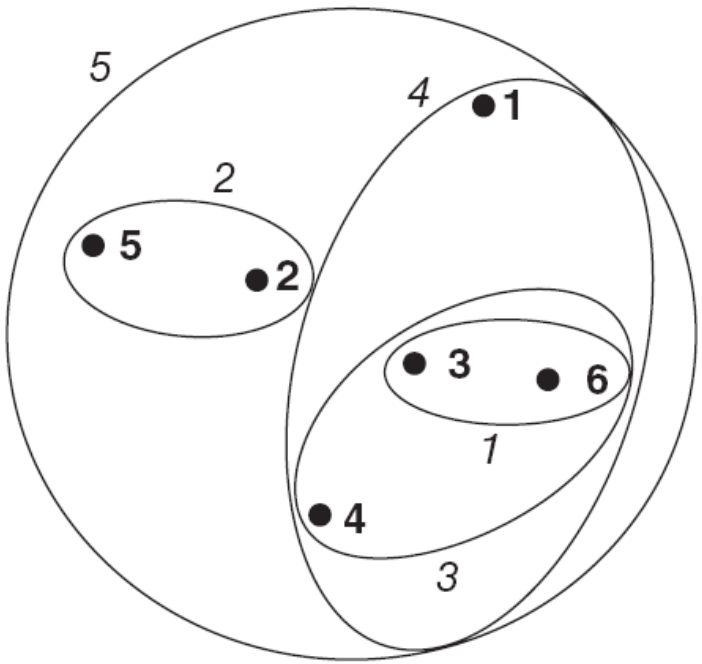
Дендрограмма



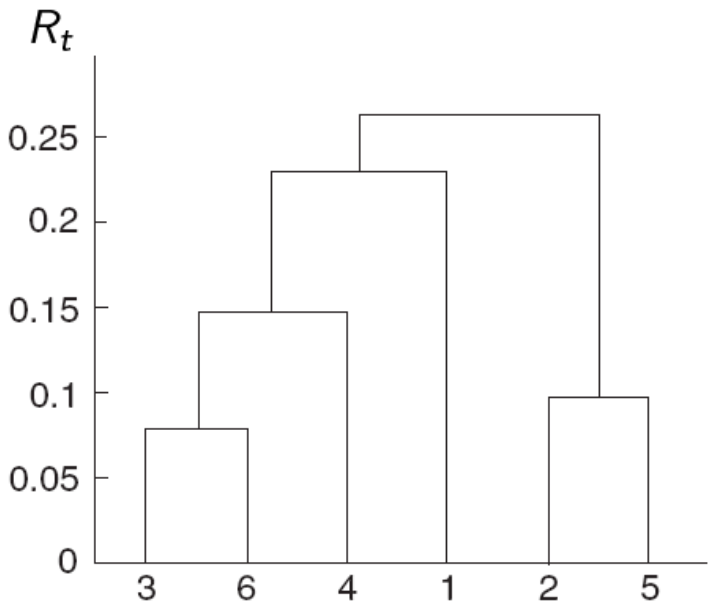
Визуализация кластерной структуры

5. Расстояние Уорда:

Диаграмма вложения

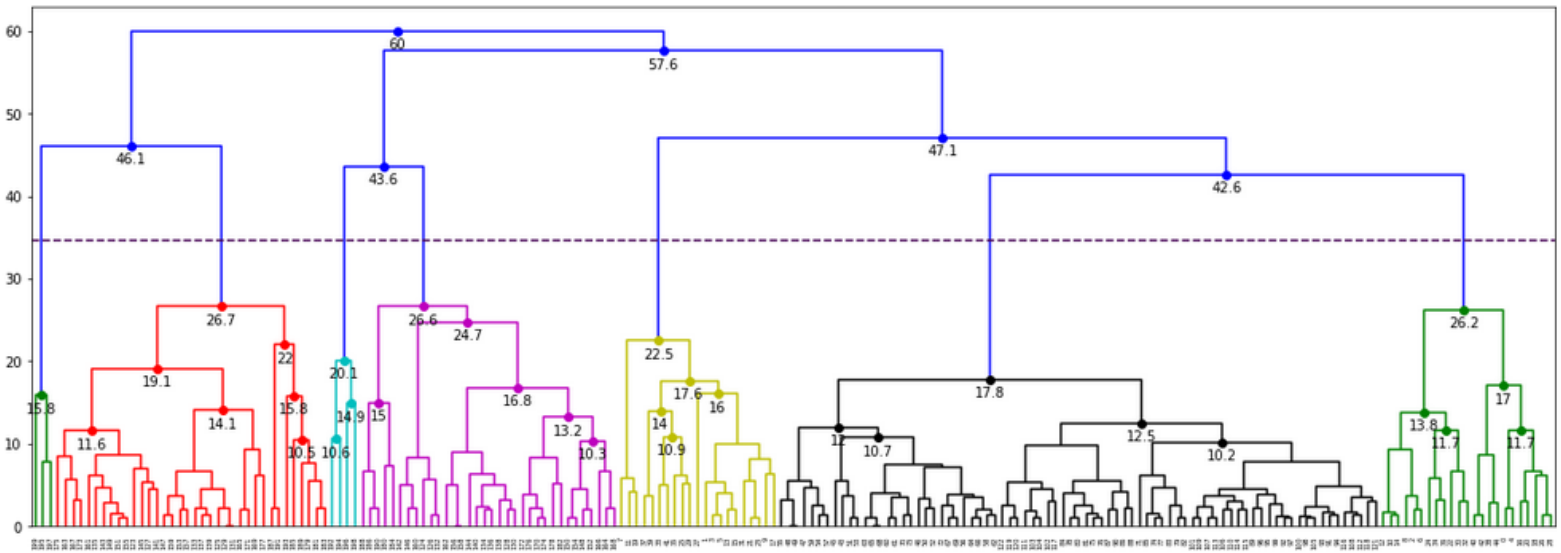


Дендрограмма



Дендрограмма — визуализация иерархической кластеризации

- Кластеры группируются вдоль горизонтальной оси
- По вертикальной оси откладываются расстояния R_t
- Расстояния возрастают, линии нигде не пересекаются
- Верхние уровни различимы лучше, чем нижние
- Уровень отсечения определяет число кластеров



Основные свойства иерархической кластеризации

- *Монотонность*: дендрограмма не имеет самопересечений, при каждом слиянии расстояние между объединяемыми кластерами только увеличивается: $R_2 \leqslant R_3 \leqslant \ldots \leqslant R_\ell$.
- *Сжимающее расстояние*: $R_t \leqslant \rho(\mu_U, \mu_V), \ \forall t$.
- *Растягивающее расстояние*: $R_t \geqslant \rho(\mu_U, \mu_V), \ \forall t$

Теорема (Миллиган, 1979)

Кластеризация монотонна, если выполняются условия

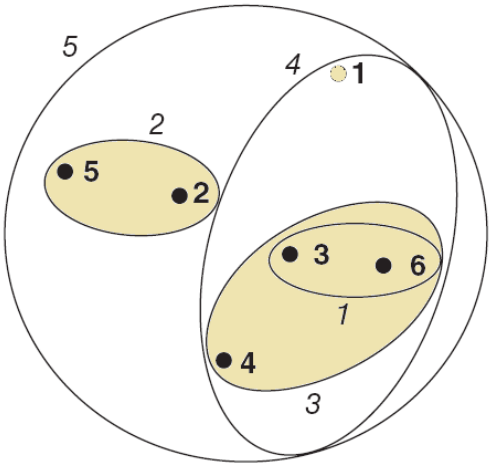
$$\alpha_U \geqslant 0, \ \ \alpha_V \geqslant 0, \ \ \alpha_U + \alpha_V + \beta \geqslant 1, \ \ \min\{\alpha_U, \alpha_V\} + \gamma \geqslant 0.$$

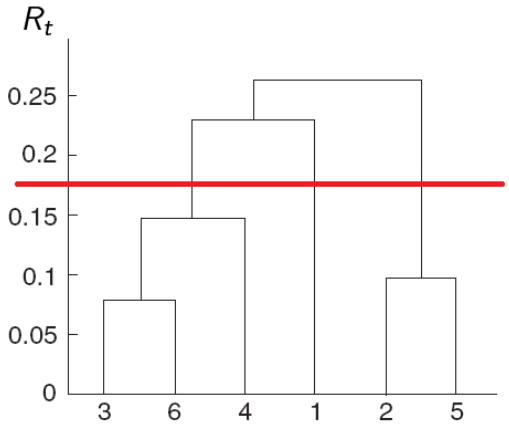
$R^{\text{ч}}$ не монотонно; $R^{\text{б}}$, $R^{\text{д}}$, $R^{\text{г}}$, $R^{\text{у}}$ — монотонны.

$R^{\text{б}}$ — сжимающее; $R^{\text{д}}$, $R^{\text{у}}$ — растягивающие;

Рекомендации и выводы

- рекомендуется пользоваться расстоянием Уорда $R^{\text{у}}$;
- обычно строят несколько вариантов и выбирают лучший визуально по дендрограмме;
- определение числа кластеров — по максимуму $|R_{t+1} - R_t|$, тогда результирующее множество кластеров $:= C_t$.





Метод частичного обучения self-training (1965-1970)

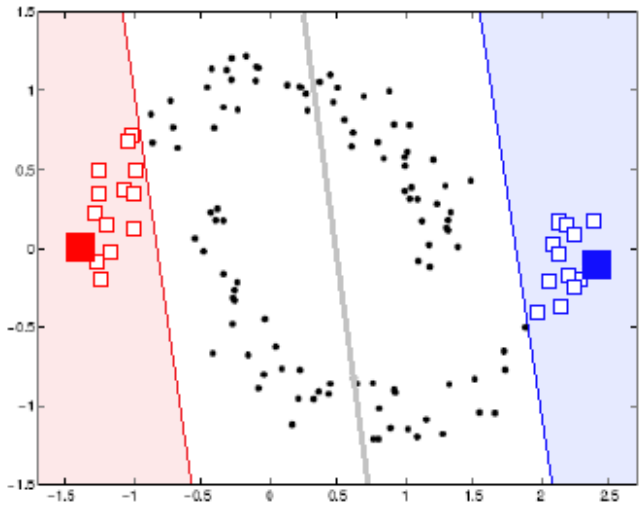
Пусть $\mu\colon X^k \to a$ — метод обучения классификации;
классификаторы имеют вид $a(x) = \arg\max\limits_{y \in Y} \Gamma_y(x)$;

Псевдоотступ — степень уверенности классификации $a_i = a(x_i)$:

$$M_i(a) = \Gamma_{a_i}(x_i) - \max_{y \in Y \setminus a_i} \Gamma_y(x_i).$$

Алгоритм self-training — обёртка (wrapper) над методом μ:

$Z := X^k$;
пока $|Z| < \ell$
  $a := \mu(Z)$;
  $\Delta := \{x_i \in U \setminus Z \mid M_i(a) \geqslant M_0\}$;
  $a_i := a(x_i)$ для всех $x_i \in \Delta$;
  $Z := Z \cup \Delta$;



M_0 можно определять, например, из условия $|\Delta| = 0.05\,|U|$

Метод частичного обучения co-training (Blum, Mitchell, 1998)

Пусть $\mu_1 \colon X^k \to a_1$, $\mu_2 \colon X^k \to a_2$ — два существенно различных метода обучения, использующих
— либо разные наборы признаков;
— либо разные парадигмы обучения (inductive bias);
— либо разные источники данных $X_1^{k_1}$, $X_2^{k_2}$.

$Z_1 := X_1^{k_1}$; $Z_2 := X_2^{k_2}$;
пока $|Z_1 \cup Z_2| < \ell$
$a_1 := \mu_1(Z_1)$; $\Delta_1 := \left\{x_i \in U \backslash Z_1 \backslash Z_2 \;\middle|\; M_i(a_1) \geqslant M_{01}\right\}$;
$a_i := a_1(x_i)$ для всех $x_i \in \Delta_1$;
$Z_2 := Z_2 \cup \Delta_1$;
$a_2 := \mu_2(Z_2)$; $\Delta_2 := \left\{x_i \in U \backslash Z_1 \backslash Z_2 \;\middle|\; M_i(a_2) \geqslant M_{02}\right\}$;
$a_i := a_2(x_i)$ для всех $x_i \in \Delta_2$;
$Z_1 := Z_1 \cup \Delta_2$;

Метод частичного обучения co-learning (deSa, 1993)

Пусть $\mu_t \colon X^k \to a_t$ — разные методы обучения, $t = 1, \ldots, T$.

Алгоритм co-learning — это self-training для композиции — простого голосования базовых алгоритмов $a_1, \ldots, a_T$:

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

тогда $M_i(a)$ — степень уверенности классификации $a(x_i)$.

$Z := X^k$;
пока $|Z| < \ell$
  $a := \mu(Z)$;
  $\Delta := \big\{x_i \in U \backslash Z \;\big|\; M_i(a) \geqslant M_0\big\}$;
  $a_i := a(x_i)$ для всех $x_i \in \Delta$;
  $Z := Z \cup \Delta$;

Общий оптимизационный подход к задачам SSL

Дано:

$X^k = \{x_1, \ldots, x_k\}$ — размеченные объекты (labeled data);
$\{y_1, \ldots, y_k\}$

$U = \{x_{k+1}, \ldots, x_\ell\}$ — неразмеченные объекты (unlabeled data).

Найти: модель классификации $a(x, w)$

Критерий одновременной классификации и кластеризации:

$$\underbrace{\sum_{i=1}^{k} \mathscr{L}(a(x_i, w), y_i)}_{\text{классификация}} + \lambda \underbrace{\sum_{i=1}^{\ell} \mathscr{L}_U(a(x_i, w))}_{\text{кластеризация}} \to \min_w$$

где $\mathscr{L}(a, y)$ — функция потерь классификации,
$\mathscr{L}_U(a)$ — функция потерь для неразмеченных данных

Напоминание: SVM для двухклассовой классификации

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

$$a(x) = \text{sign}\big(\langle w, x\rangle - w_0\big), \quad w, x \in \mathbb{R}^n,\ w_0 \in \mathbb{R}.$$

Отступ объекта x_i:

$$M_i(w, w_0) = \big(\langle w, x_i\rangle - w_0\big) y_i.$$

Задача обучения весов w, w_0 по размеченной выборке:

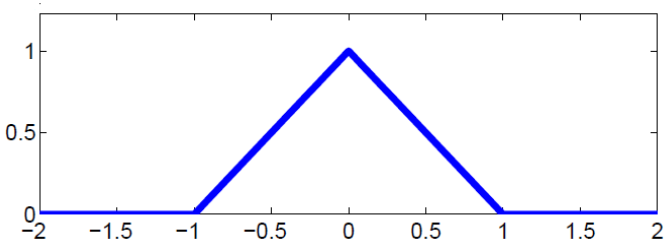
$$Q(w, w_0) = \sum_{i=1}^{k} \big(1 - M_i(w, w_0)\big)_+ + \frac{1}{2C}\|w\|^2 \ \to \ \min_{w, w_0}.$$

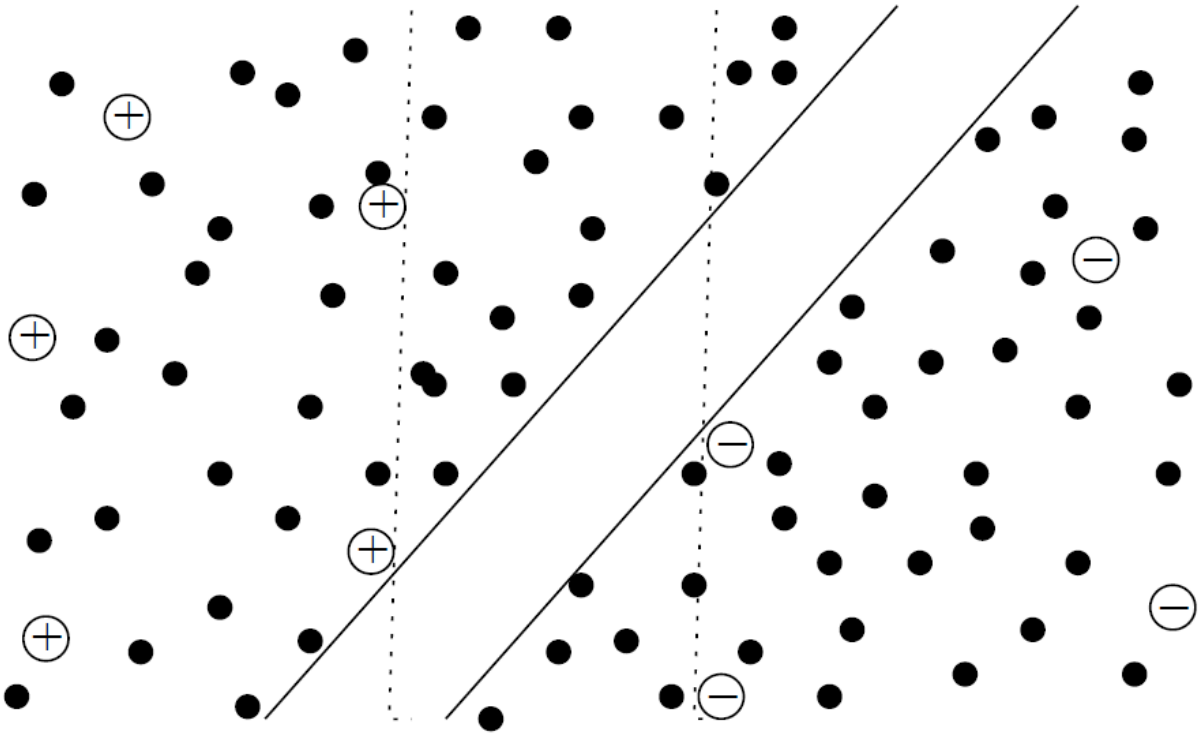
Функция $\mathscr{L}(M) = (1 - M)_+$ штрафует за уменьшение отступа.

Идея!
Функция $\mathscr{L}(M) = \big(1 - |M|\big)_+$ штрафует за попадание объекта внутрь разделяющей полосы.

Функция потерь для трансдуктивного SVM

Функция потерь $\mathscr{L}(M) = (1 - |M|)_+$ штрафует за попадание объекта внутрь разделяющей полосы.





Метод частичного обучения Transductive SVM

Обучение весов w, w_0 по частично размеченной выборке:

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

$$+ \gamma \sum_{i=k+1}^{\ell} \big(1 - |M_i(w, w_0)|\big)_+ \;\to\; \min_{w, w_0}.$$

Достоинства и недостатки TSVM:

- ⊕ как и в обычном SVM, можно использовать ядра;
- ⊕ имеются эффективные реализации для больших данных;
- ⊖ задача невыпуклая, методы оптимизации сложнее;
- ⊖ решение неустойчиво, если нет области разреженности;
- ⊖ требуется настройка двух параметров C, γ;

Sindhwani, Keerthi. Large scale semisupervised linear SVMs. SIGIR 2006.

Напоминание: многоклассовая логистическая регрессия

Линейный классификатор по конечному множеству классов $|Y|$:

$$a(x) = \arg\max_{y \in Y} \langle w_y, x \rangle, \quad x, w_y \in \mathbb{R}^n.$$

Вероятность того, что объект x_i относится к классу y:

$$P(y|x_i, w) = \frac{\exp\langle w_y, x_i \rangle}{\sum_{c \in Y} \exp\langle w_c, x_i \rangle}.$$

Задача максимизации регуляризованного правдоподобия:

$$Q(w) = \sum_{i=1}^{k} \log P(y_i|x_i, w) - \frac{1}{2C} \sum_{y \in Y} \|w_y\|^2 \to \max_w,$$

Оптимизация $Q(w)$ — методом стохастического градиента, по $n|Y|$-мерному вектору параметров $w = (w_y : y \in Y)$.

Согласование модели на размеченных и неразмеченных данных

Теперь учтём неразмеченные данные $U = \{x_{k+1}, \ldots, x_\ell\}$.
Пусть $b_j(x)$ — бинарные признаки, $j = 1, \ldots, m$.

Оценим вероятности $\mathrm{P}(y|b_j(x) = 1)$ двумя способами:

1) эмпирическая оценка по размеченным данным X^k:

$$\hat{p}_j(y) = \frac{\sum_{i=1}^{k} b_j(x_i)[y_i = y]}{\sum_{i=1}^{k} b_j(x_i)};$$

2) оценка по неразмеченным данным U и вероятностной модели:

$$p_j(y|w) = \frac{\sum_{i=k+1}^{\ell} b_j(x_i) P(y|x_i, w)}{\sum_{i=k+1}^{\ell} b_j(x_i)}.$$

Максимизируем правдоподобие вероятностной модели $p_j(y|w)$, приближающей эмпирическое распределение $\hat{p}_j(y)$.

Построение регуляризатора (XR, eXpectation Regularization)

Логарифм правдоподобия модели классов по j-му признаку:

$$L_j(w) = \sum_{y \in Y} \hat{p}_j(y) \log p_j(y|w) \;\to\; \max_w .$$

Регуляризация критерия $Q(w)$ суммой log-правдоподобий $L_j(w)$ с коэффициентом регуляризации γ:

$$Q(w) + \gamma \sum_{j=1}^{m} L_j(w) = \sum_{i=1}^{k} \log P(y_i|x_i, w) - \frac{1}{2C} \sum_{y \in Y} \|w_y\|^2 +$$

$$+ \gamma \sum_{j=1}^{m} \sum_{y \in Y} \hat{p}_j(y) \log \left(\sum_{i=k+1}^{\ell} b_j(x_i) P(y|x_i, w) \right) \;\to\; \max_w .$$

Mann, McCallum. Simple, robust, scalable semi-supervised learning via expectation regularization. ICML 2007.

Особенности метода XR (eXpectation Regularization)

1. XR — это SSL, но это вообще не кластеризация!
2. Оптимизация методом стохастического градиента.
3. Возможные варианты задания переменных b_j:
   - $b_j(x) \equiv 1$, тогда $\mathrm{P}(y|b_j(x)=1)$ — априорная вероятность класса y (label regularization)
     — подходит для задач с несбалансированными классами;
   - $b_j(x) = \left[\text{термин } j \text{ содержится в тексте } x\right]$
     — подходит для задач классификации текстов.
4. метод слабо чувствителен к выбору C и γ,
5. устойчив к погрешностям оценивания $\hat{p}_j(y)$,
6. не требует большого числа размеченных объектов k,
7. хорошо подходит для категоризации текстов.

Mann, McCallum. Simple, robust, scalable semi-supervised learning via expectation regularization. ICML 2007.

Резюме в конце лекции

- Кластеризация — это обучение без учителя, некорректно поставленная задача, существует много оптимизационных и эвристических алгоритмов кластеризации
- DBSCAN — популярный быстрый алгоритм кластеризации
- Задача SSL занимает промежуточное положение между классификацией и кластеризацией, но не сводится к ним.
- Методы кластеризации легко адаптируются к SSL путём введения ограничений (constrained clustering).
- Адаптация методов классификации реализуется сложнее, но приводит к более эффективным методам.
- Регуляризация объединяет критерии на размеченных и неразмеченных данных в одну задачу оптимизации.