ТЕХНОСФЕРА

Лекция 4
Вопросы построения обучающих множеств

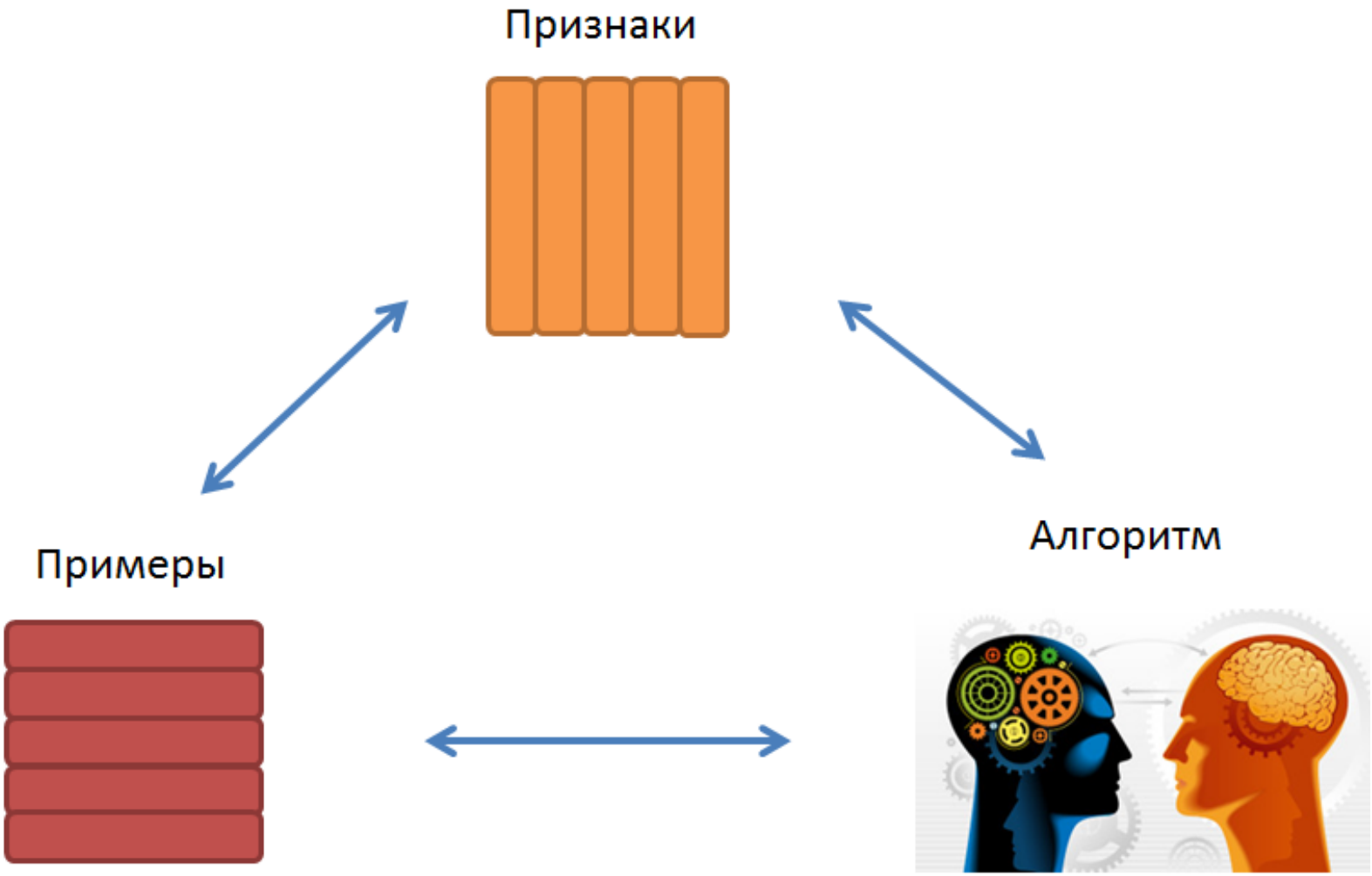
Владимир Гулин

12 марта 2017 г.

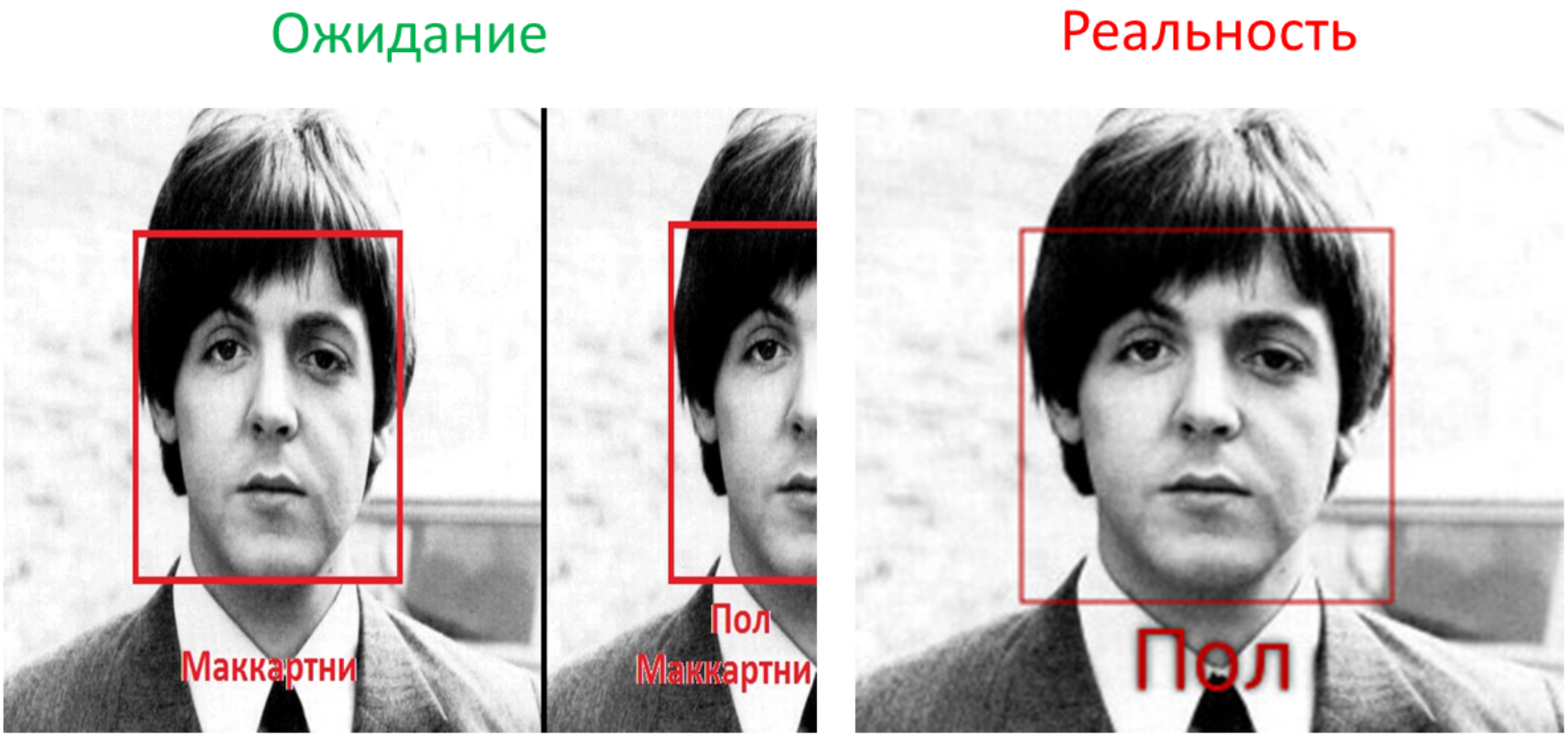
План лекции

Машинное обучение в реальной жизни

Схема компонентов системы машинного обучения

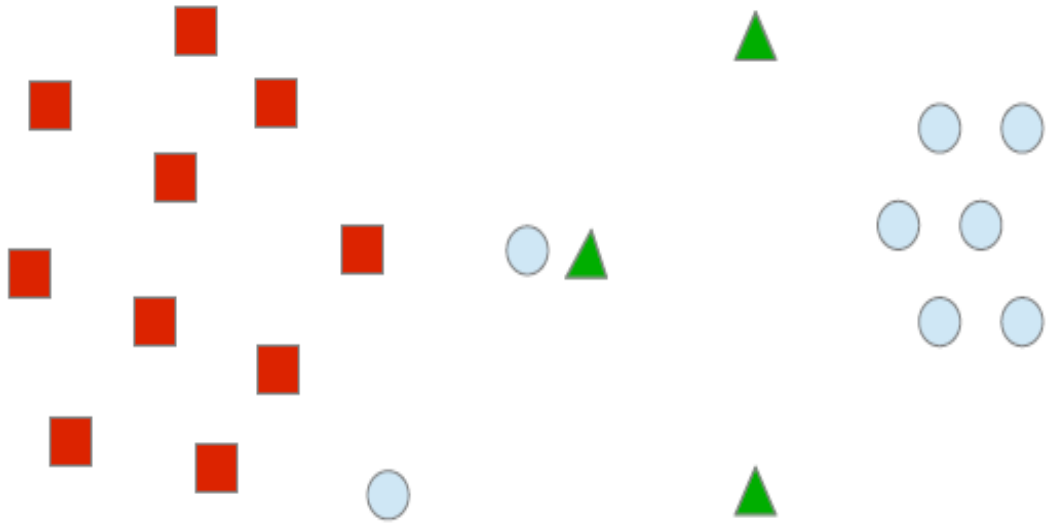


Машинное обучение в реальной жизни

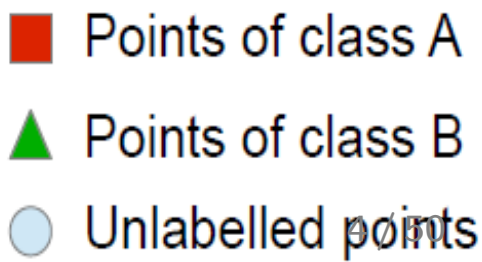


- Работаем не на той же выборке, на которой обучались

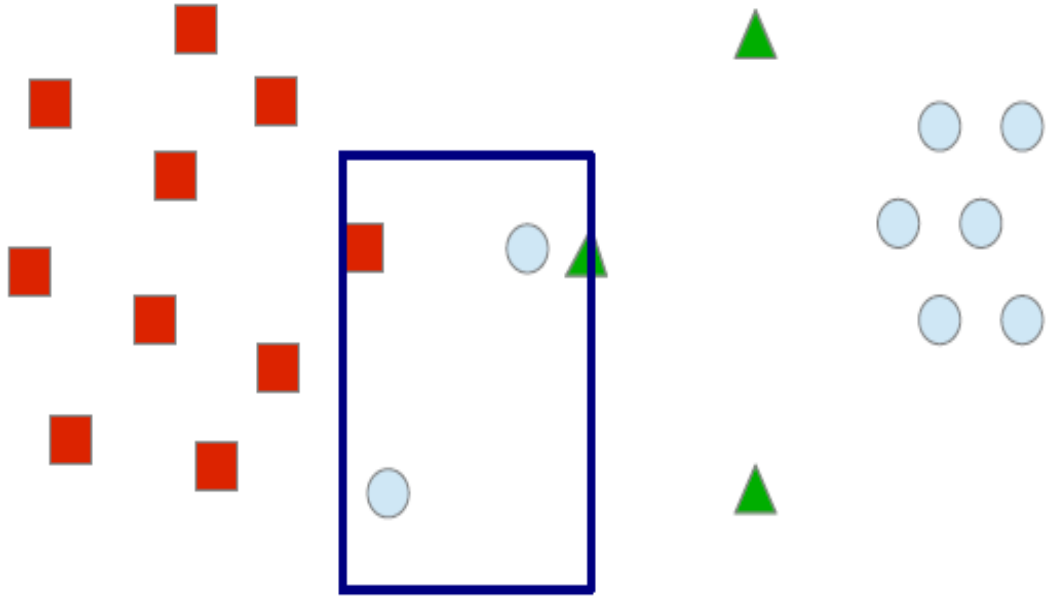
Классические проблемы обучающего множества



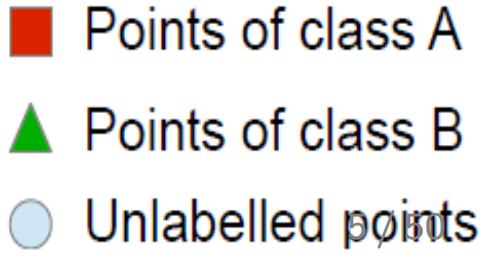
- Какие потенциальные проблемы с данными вы видите на этой картинке?



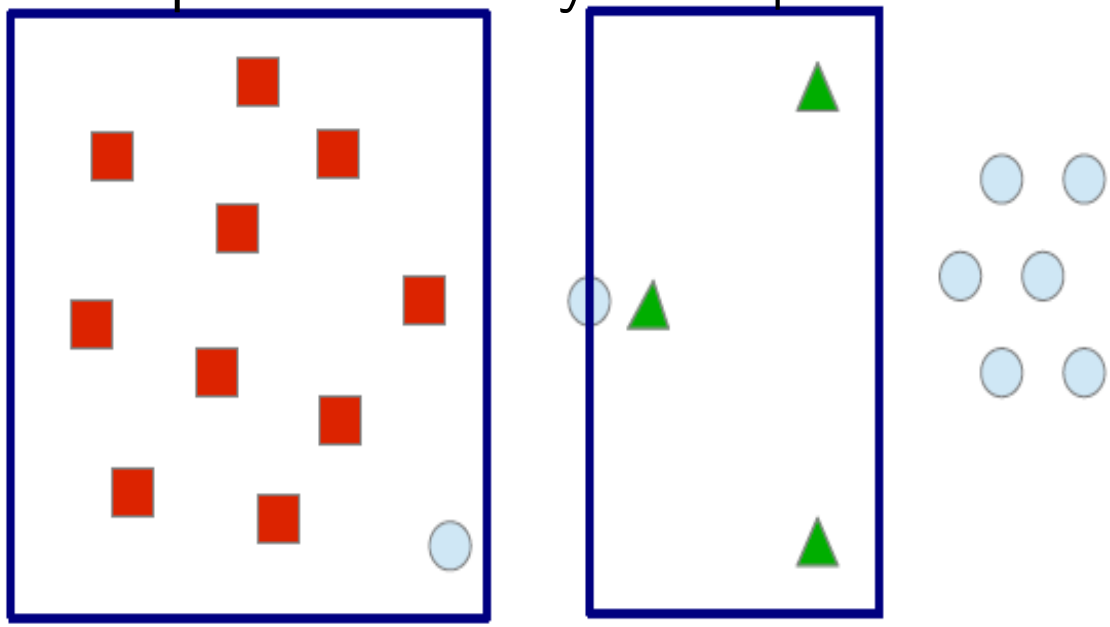
Классические проблемы обучающего множества



- Существуют неразмеченные точки на границе между классами



Классические проблемы обучающего множества



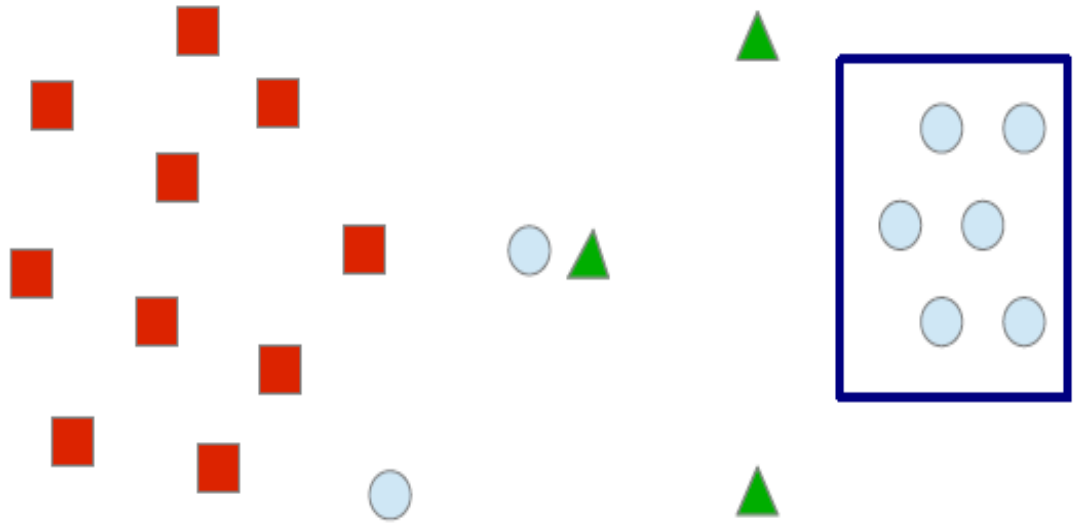
- Существуют неразмеченные точки на границе между классами
- Количество данных в разных классах несбалансировано

Points of class A

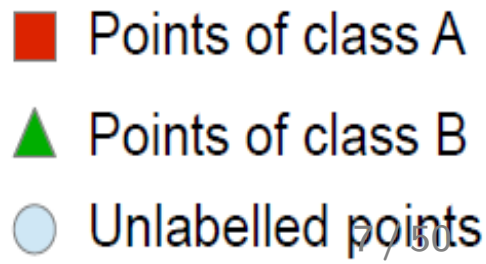
Points of class B

Unlabelled points

Классические проблемы обучающего множества



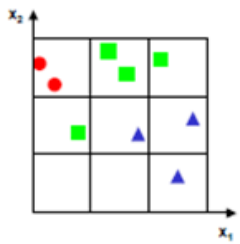
- Существуют неразмеченные точки на границе между классами
- Количество данных в разных классах несбалансировано
- Имеется неразмеченная группа данных

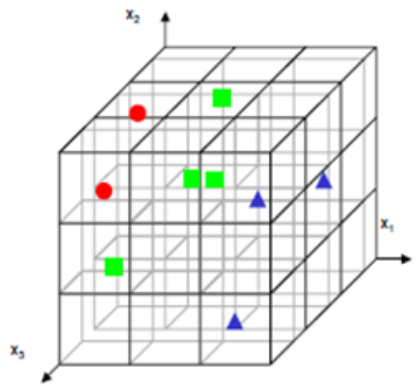


Несмещенная выборка

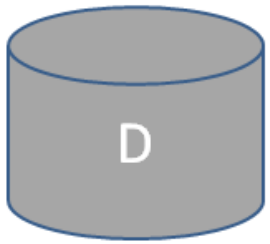
Определение

Несмещенная (репрезентативная) выборка - это такая выборка, в которой все основные признаки генеральной совокупности, из которой извлечена данная выборка, представлены приблизительно в той же пропорции или с той же частотой, с которой данный признак выступает в этой генеральной совокупности.

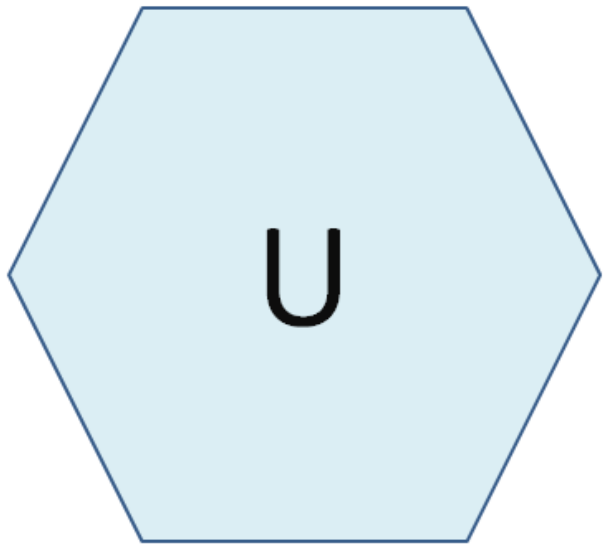




Labeled & Unlabled data



Размеченное множество

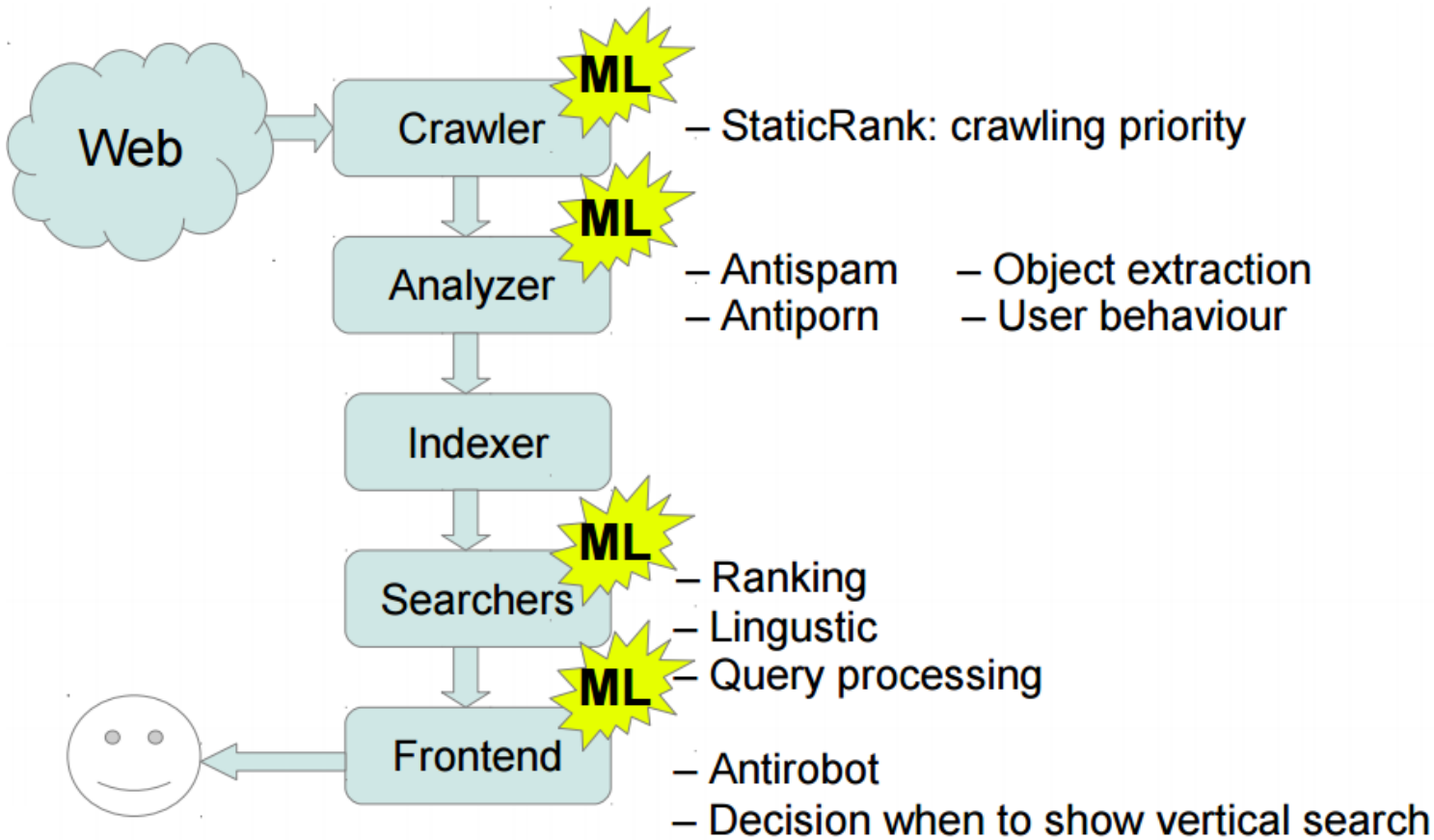


Неразмеченное множество

- Sampling
- Active Learning
- Semi-supervised learning

Мотивация

Упрощенная схема поисковой системы



Мотивация

Проблемы

- Все компоненты используют машинное обучение с учителем
- Асесорские оценки дорогое удовольствие
- Требуются большие обучающие выборки для высокого качества
- Долго обучаться (примеров $10^6 - 10^7$)

Хотим компактные обучающие выборки

- Проще анализировать данные
- Быстрее можно перестраивать модели и проводить эксперименты

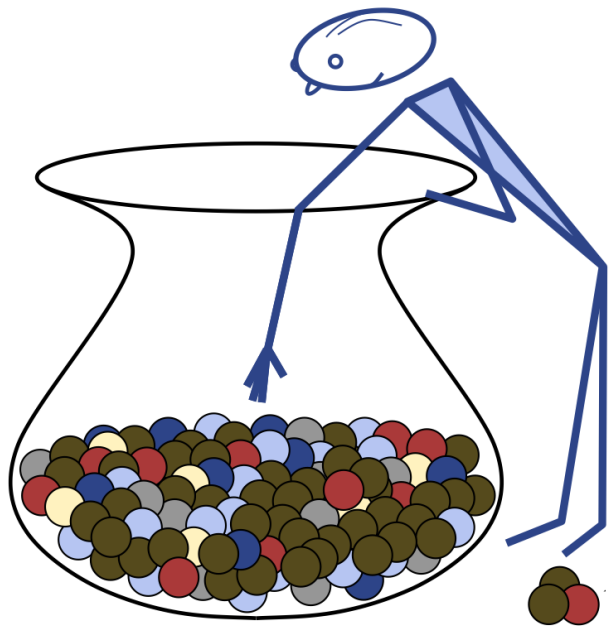
Sampling

Определение

Sampling - метод исследования множества, путем анализа его подмножеств

Применение

- Предварительный анализ данных
- Исходное множество слишком велико



Sampling

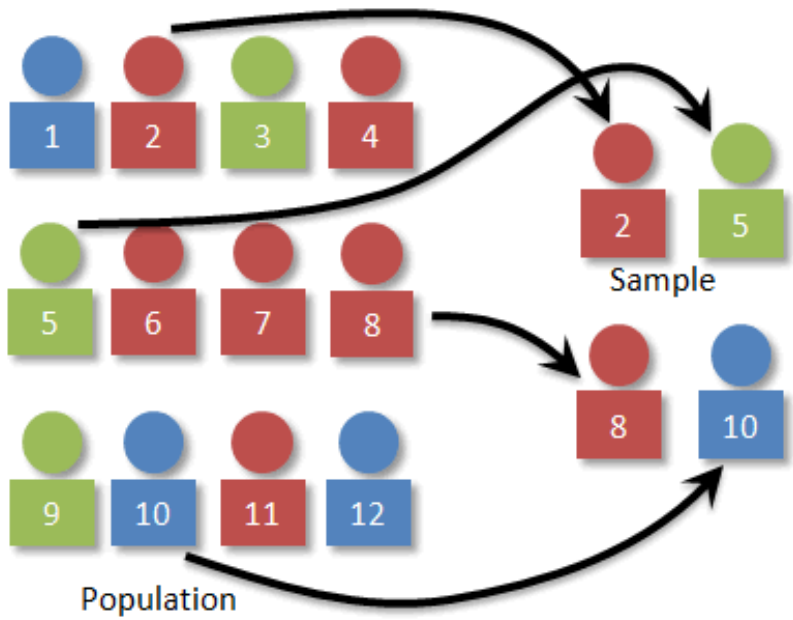
Simple random sampling

Systematic sampling

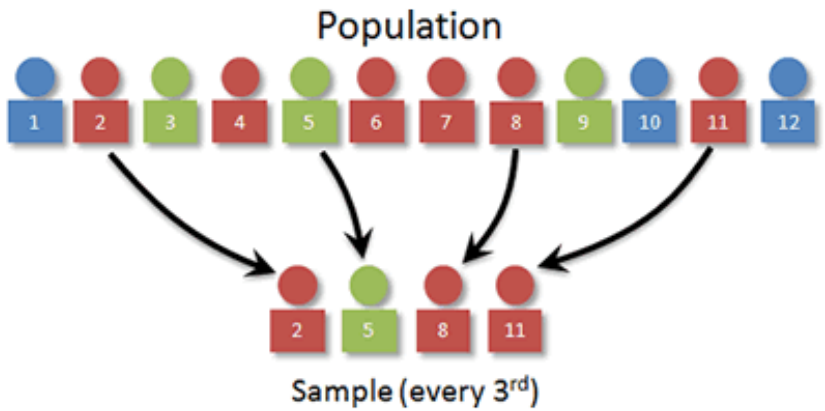
Stratified random sampling

Cluster sampling

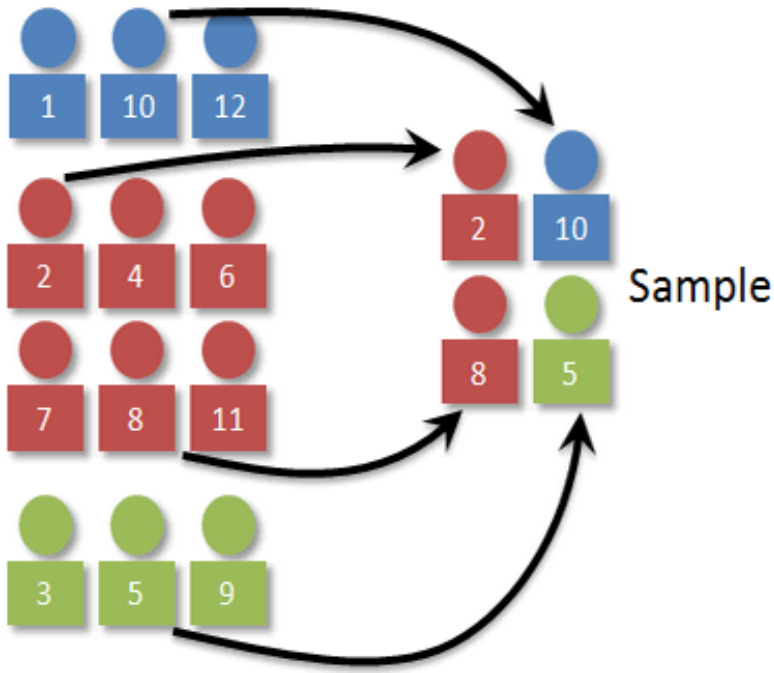
Simple random sampling



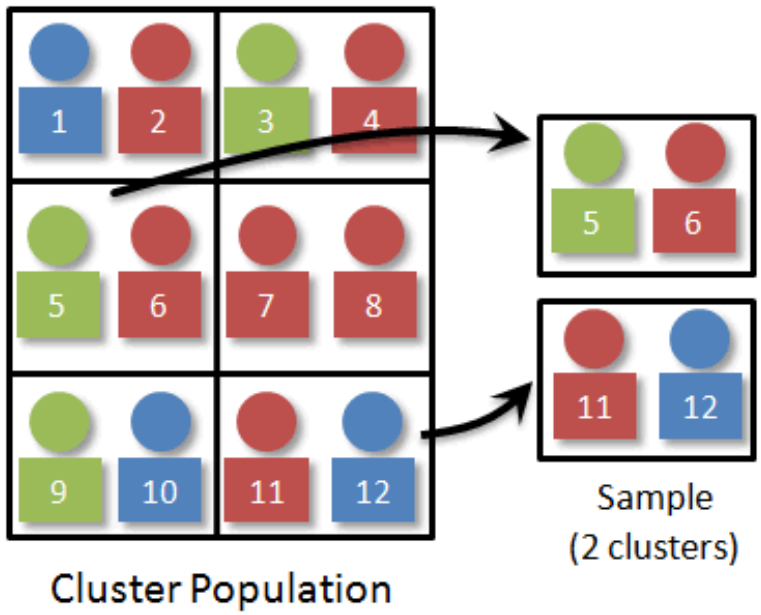
Systematic sampling



Stratified sampling



Cluster sampling

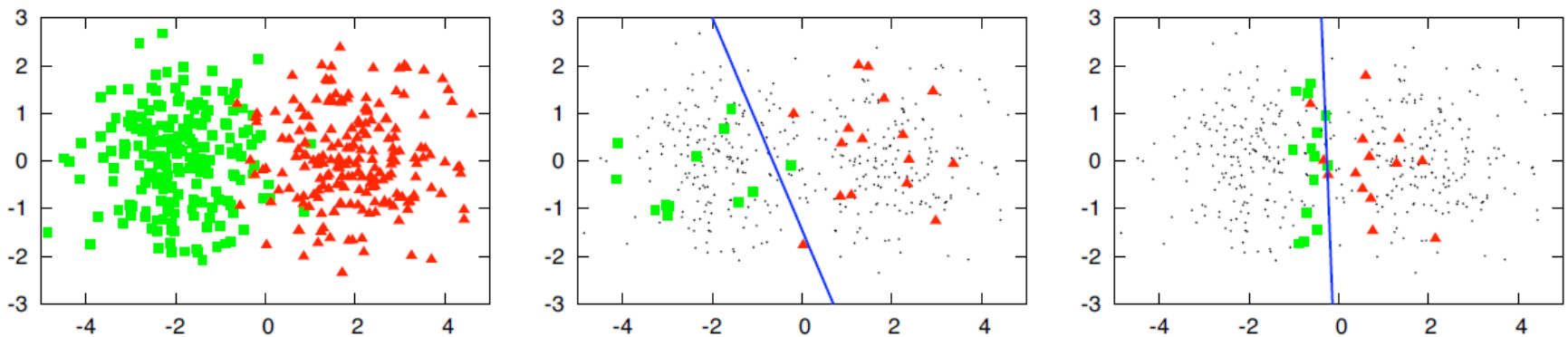


Вопрос:

А какой алгоритм семплирования выбрать?

Active Learning

Интуиция



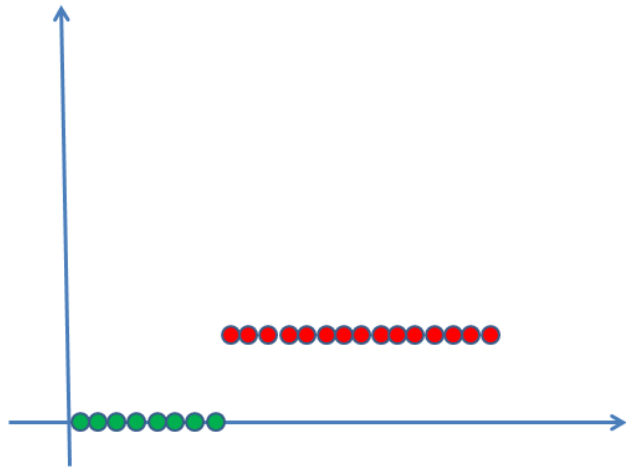
Active Learning

Идея

The key idea behind active learning is that a machine learning algorithm can achieve greater accuracy with fewer training labels if it is allowed to choose that data from which it learns.

- Забиваем на требование несмещенности выборки

Мотивирующий пример



$$g(x,\theta) = \begin{cases} 1 & x > \theta \\ 0 & \textit{otherwise} \end{cases}$$

Вопрос:

Сколько точек необходимо для того, чтобы найти θ с точностью ε

Классическая схема машинного обучения

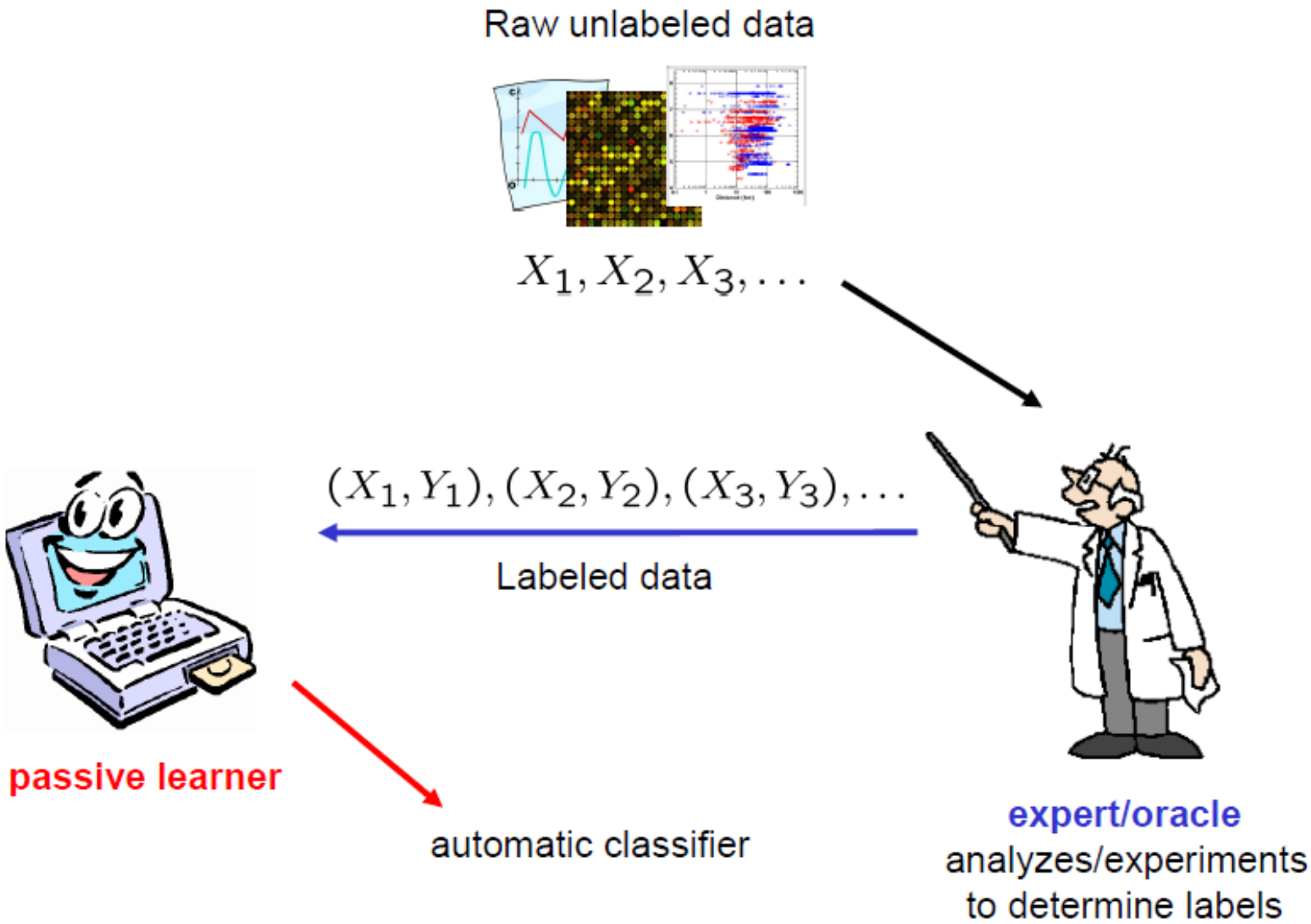
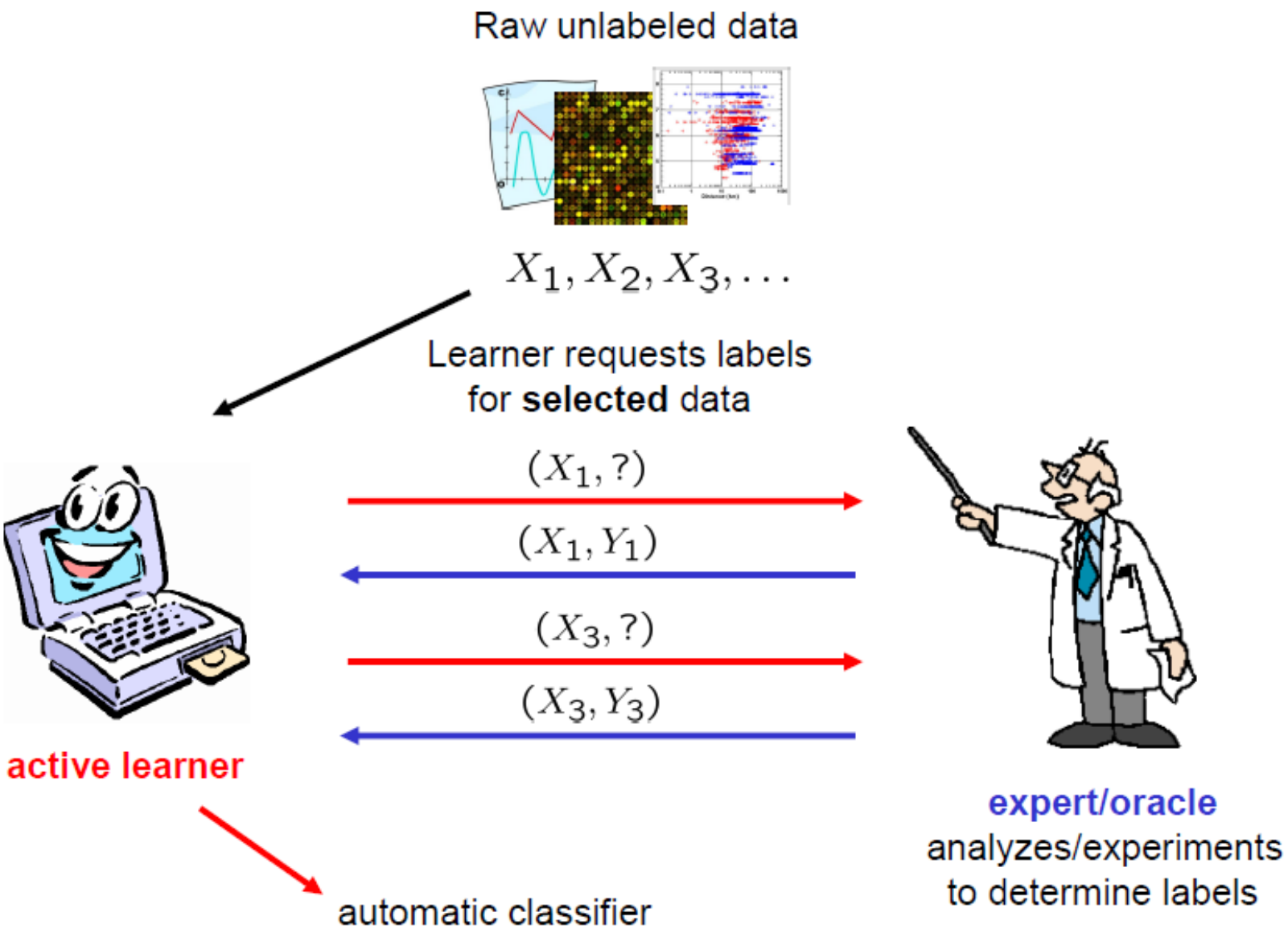


Схема с активным обучением



Типы активного обучения

Pool-based sampling

Stream based selective sampling

Query-synthezis

Active Learning Strategies

- Uncertainty Sampling
- Query-by-Committiee
- Expected Model Change
- Expected Error Reduction
- Variance Reduction
- Density-Weighted Methods

Bonus technique

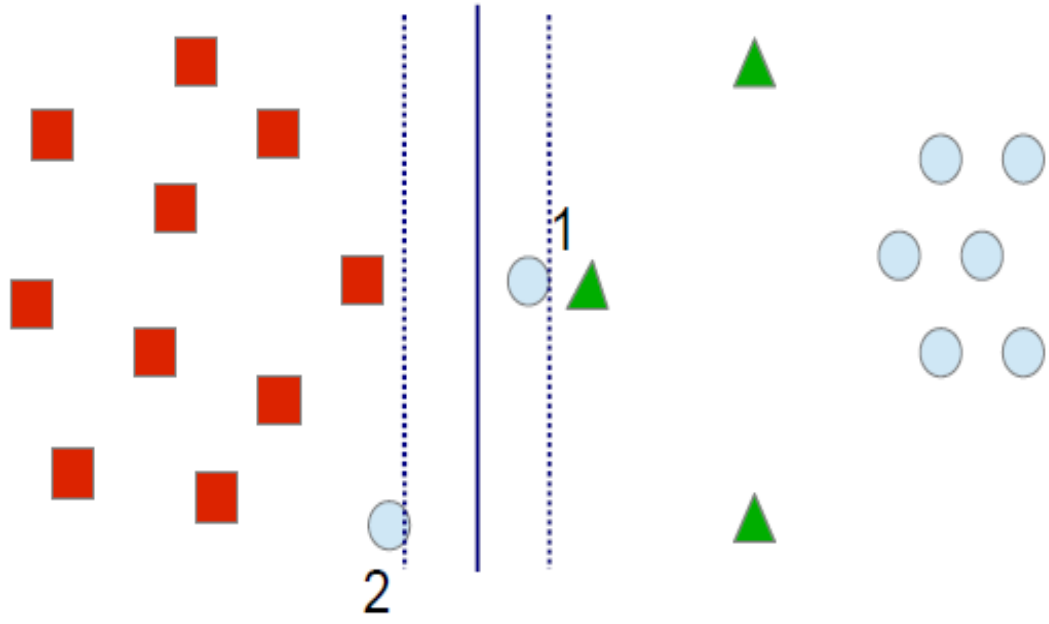
Идея

Построим модель на ошибках предыдущей и будем ей предсказывать точки, которые брать в обучение

$$L(y, h(\mathbf{x})) = \sum_{i=1}^{N} (y_i - h(\mathbf{x}_i))^2$$

$$\widehat{f}(\mathbf{x}_i) = |y_i - h(\mathbf{x}_i)|, \quad i = 1, \ldots, N$$

Uncertainty Sampling



Идея

Выбираем те примеры, в которых модель уверена меньше всего

$$x^* = arg\min_x |P(\widehat{y}|x) - 0.5|$$

Points of class A

Points of class B

Unlabelled points

Uncertainty Sampling

Случай нескольких классов

- Least confident

$$x^*_{LC} = arg\max_x(1 - P_\theta(\widehat{y}|x))$$

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

- Margin sampling

$$x^*_M = arg\min_x P_\theta(\widehat{y}_1|x) - P_\theta(\widehat{y}_2|x)$$

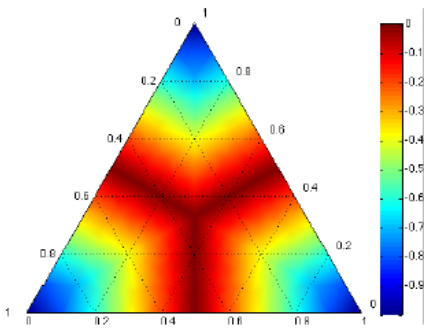
- Entropy (общий случай)

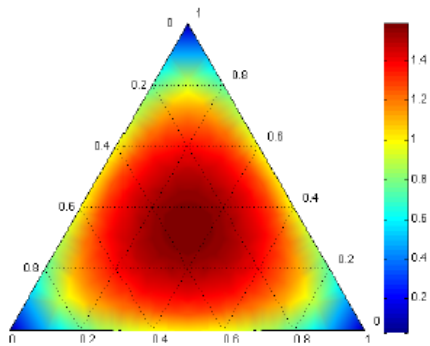
$$x^*_H = arg\max_x -\sum_c P_\theta(\widehat{y}_c|x)\log P_\theta(\widehat{y}_c|x)$$

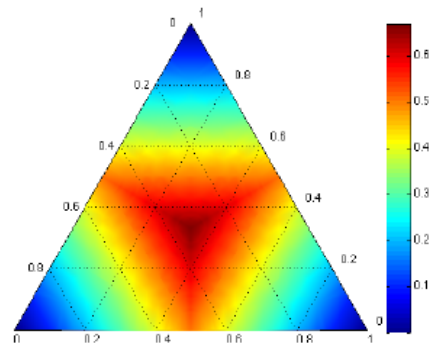
Uncertainty Sampling

Пример: Случай трехклассовой классификации

$$p_1 + p_2 + p_3 = 1$$



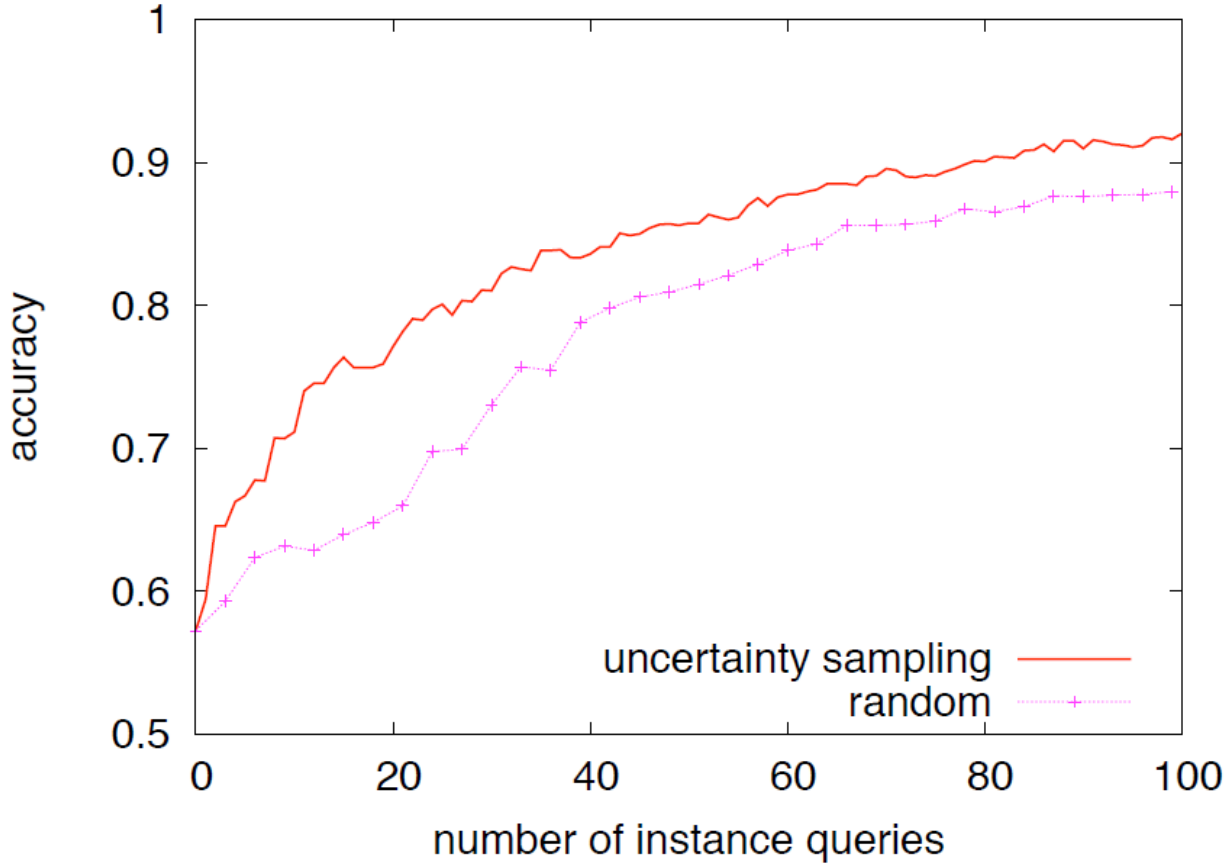




Вопрос:

- Какой мере неопределенности соотвествует каждая из этих картинок?

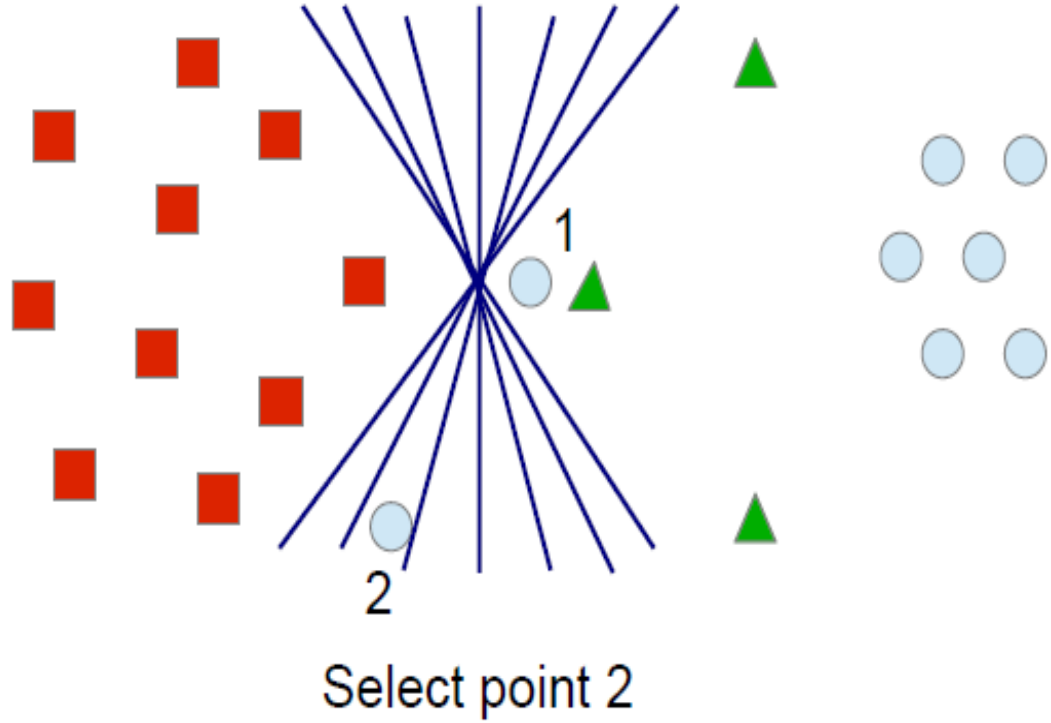
Uncertainty Sampling vs Random Sampling



Вопрос:

- Что делать если у нас нет постреорного распределения $p(y|x)$?

Query-by-Committiee



- Вместо одной модели используем коммитет

Points of class A

Points of class B

Unlabeled points

Query-by-Committiee

Для измерения уровня несогласия между моделями используют:

Vote Entropy

$$x^*_{VE} = arg\max_x -\sum_c \frac{V(y_c)}{T} \log \frac{V(y_c)}{T}$$

Kullback-Leibler Divergence

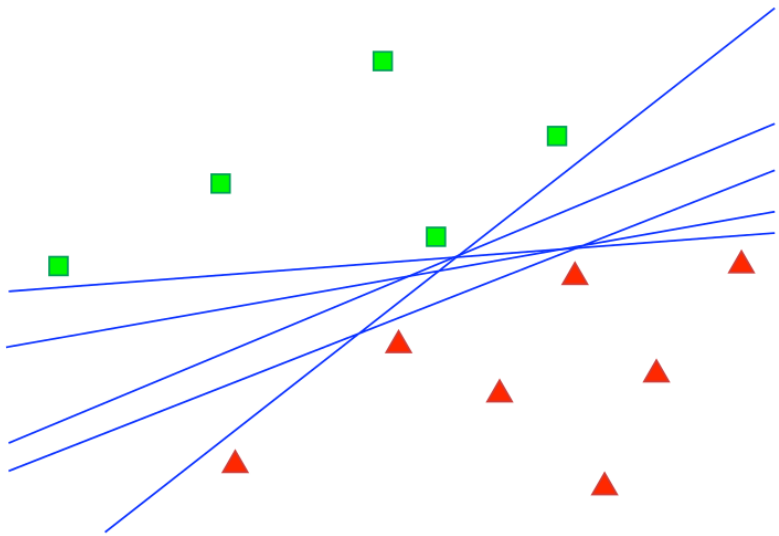
$$x^*_{KL} = arg\max_x \frac{1}{T}\sum_{t=1}^{T} D(P_{\theta^t}||P_T), \quad \text{где}$$

$$D(P_{\theta^t}||P_T) = \sum_c P_{\theta^t}(y_c|x) \log \frac{P_{\theta^t}(y_c|x)}{P_T(y_c|x)}, \quad P_T(y_c|x) = \frac{1}{T}\sum_{t=1}^{T} P_{\theta^t}(y_c|x)$$

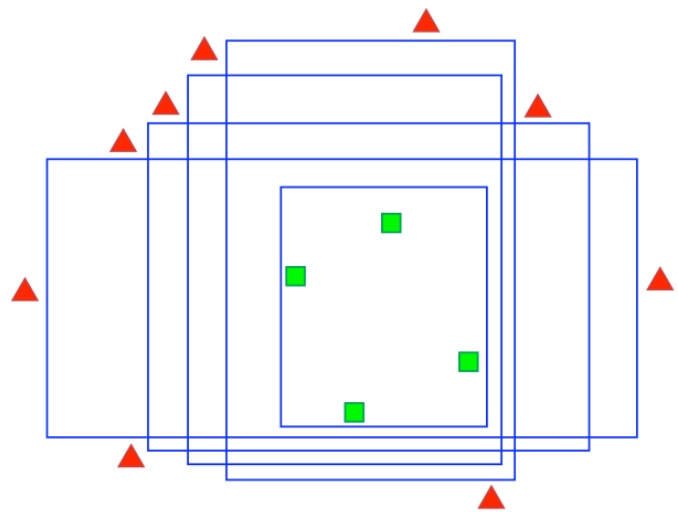
Query-by-Committiee

Идея:

Выбираем очередную точку максимально сокращая пространство решений



(a)



(b)

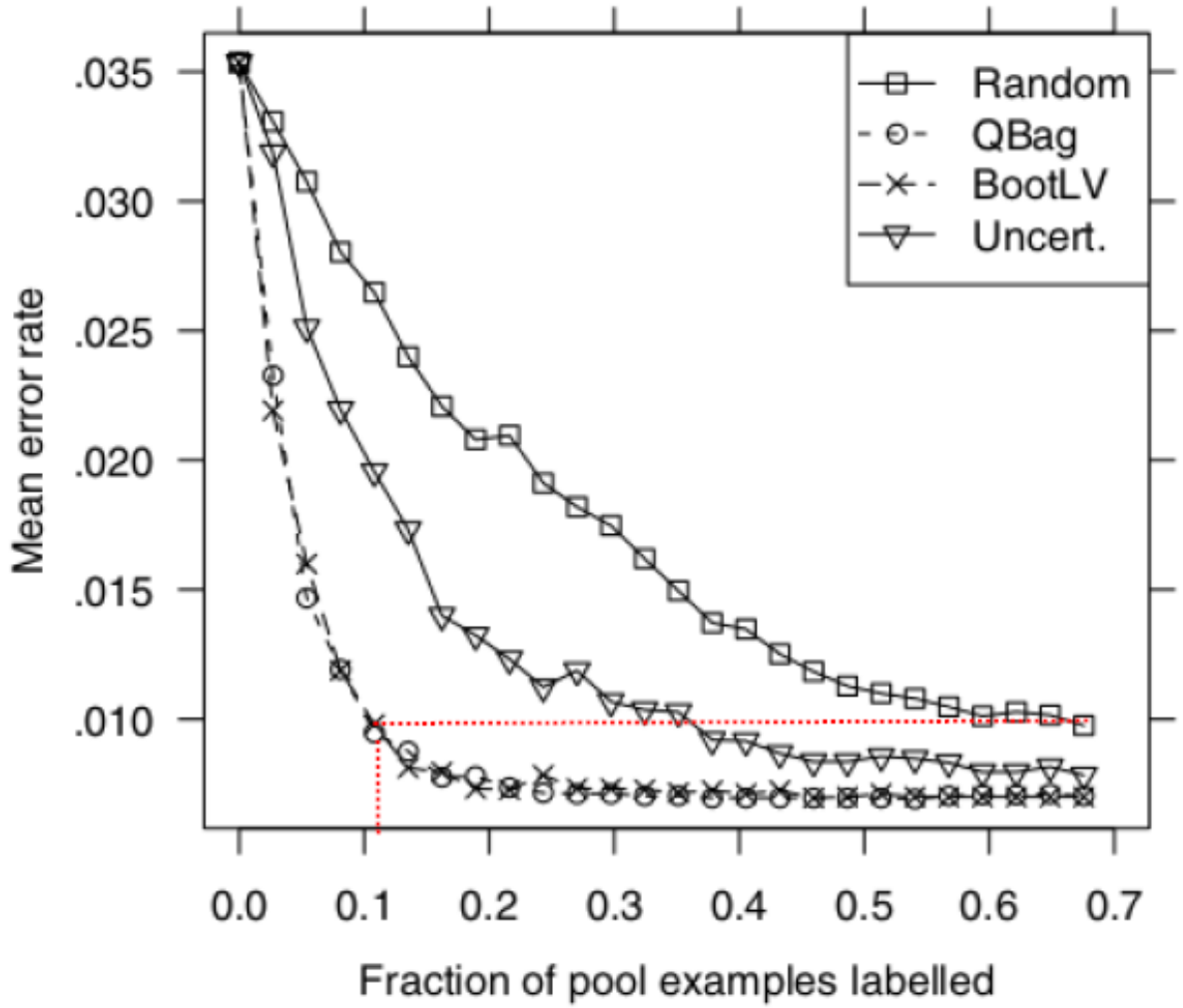
Query-by-Bagging

Qbag

Input: T – initial labelled training set
C – size of the committee
A – learning algorithm
U – set of unlabelled objects
Output: T' – extended training set

1. Uniformly resample T, obtain $T_1 \ldots T_C$, where $|T_i| < |T|$
2. For each T_i build model M_i using A
3. Select $x^* = \min_{x \in U} \left| \sum_{i=1}^{C} I(M_i = 1) - \sum_{i=1}^{C} I(M_i = 0) \right|$
4. Pass x^* to assessor and update T
5. Repeat from 1 until convergence

Query-by-Bagging



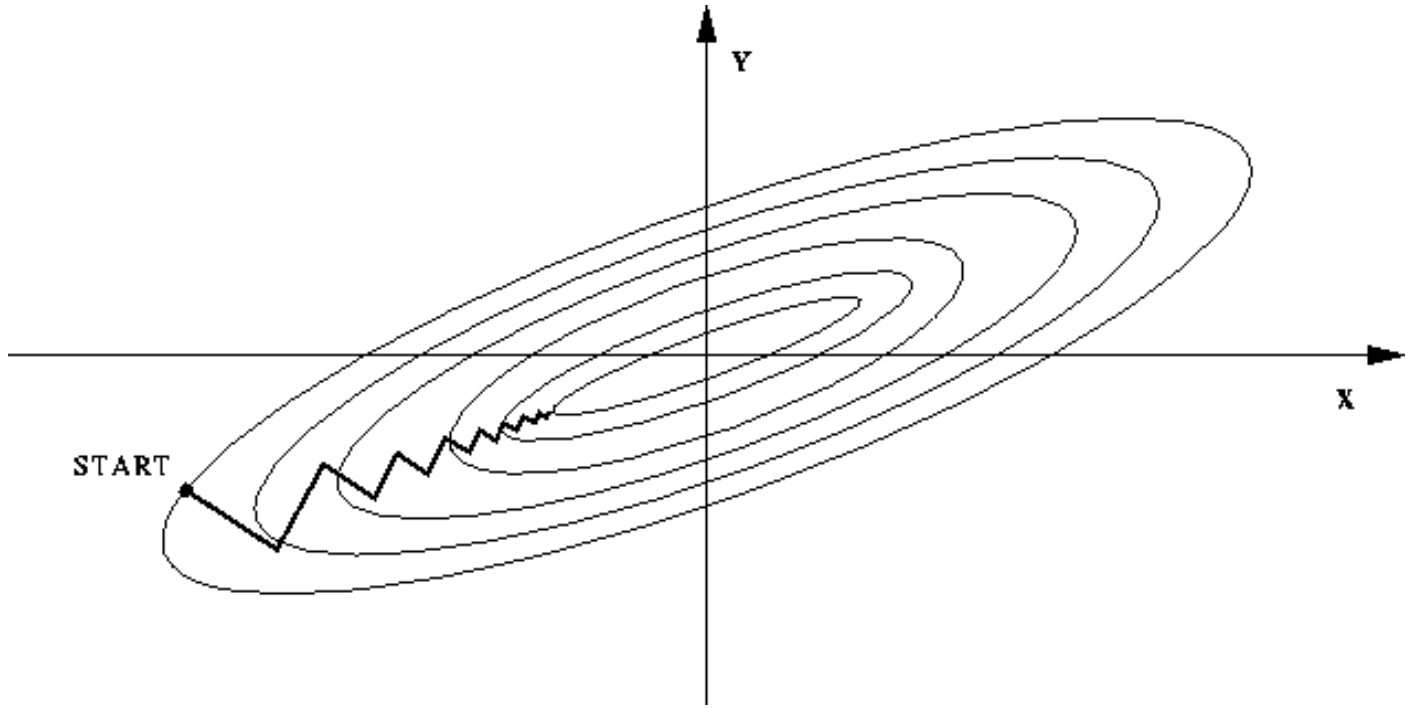
Query-by-Boosting

Вспоминаем AdaBoost

1. Инициализировать веса объектов $w_j = 1/N$, $j = 1, 2, \ldots, N$.
2. Для всех i от 1 до T:
   (a) Построить классификатор $a_i(\mathbf{x})$, используя веса w_j
   (b) Вычислить
   $$err_i = \frac{\sum_{j=1}^{N} w_j I(y_j \neq a_i(\mathbf{x}_j))}{\sum_{j=1}^{N} w_j}$$
   (c) Вычислить
   $$b_i = \log \frac{1 - err_i}{err_i}$$
   (d) Присвоить $w_j \to w_j \cdot exp[b_i \cdot I(y_j \neq a_i(\mathbf{x}_j))]$, $j = 1, \ldots, N$.
   (e) Нормируем веса объектов
   $$w_j \to \frac{w_j}{\sum_{j=1}^{N} w_j}, \; j = 1, \ldots, N.$$
3. $h(\mathbf{x}) = sign\left[\sum_{i=1}^{T} b_i a_i(\mathbf{x})\right]$

- Как использовать алгоритм для активного обучения?

Expected Model Change



Идея

Выбираем примеры, оказывающие наибольшее влияние на модель

$$x^*_{EMC} = arg\max_x \sum_c P_\theta(y_c|x)\|\nabla L_\theta(D \cup (x, y_c))\|$$

При этом надо понимать

$$\|\nabla L_\theta(D \cup (x, y_c))\| \approx \|\nabla L_\theta(x, y_c)\|$$

Expected Error Reduction

Идея

Выбираем примеры, увеличивающие обобщающую способность нашей модели

Замечание

- Необходимо научиться оценивать ошибку обобщения модели на данных $D \cup (x, y)$
- В качестве валидационной выборки будем использовать все оставшееся неразмеченное множество U

$$x^*_{0/1} = arg \min_x \sum_c P_\theta(y_c|x) \left(\sum_{u=1}^{U} 1 - P_{\theta^+(x,y_c)}(\widehat{y}|x^{(u)}) \right)$$

$$x^*_{log} = arg \min_x \sum_c P_\theta(y_c|x) \left(- \sum_{u=1}^{U} \sum_k P_{\theta^+(x,y_c)}(y_k|x^{(u)}) \log P_{\theta^+(x,y_c)}(y_k|x^{(u)}) \right)$$

Variance Reduction

Идея

Можем минимизировать ошибку обобщения неявно, уменьшая variance модели

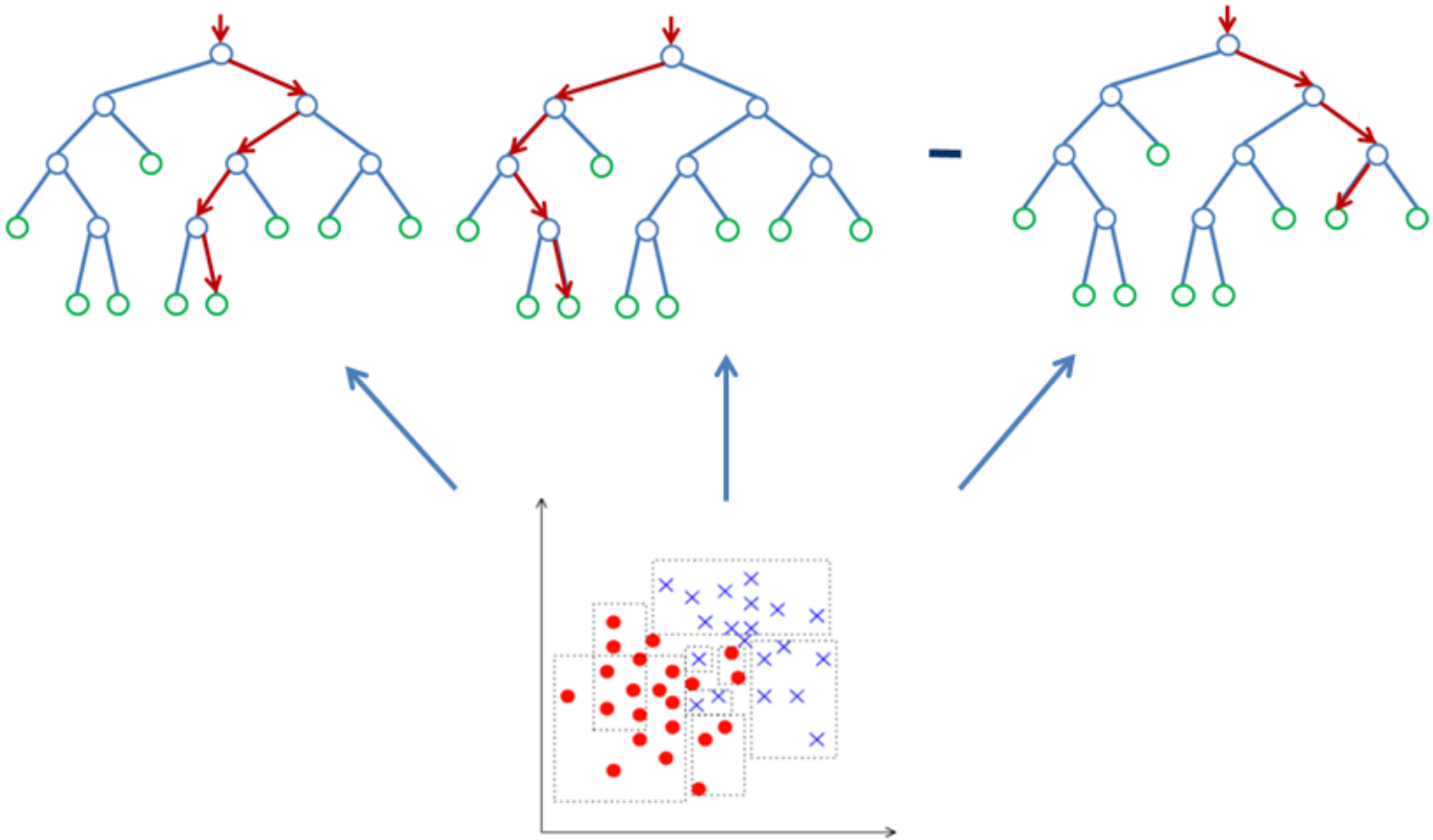
$$E[(\widehat{y} - y)^2|x] = Noise + Bias^2 + Variance$$

- Каким образом уменьшать Variance?

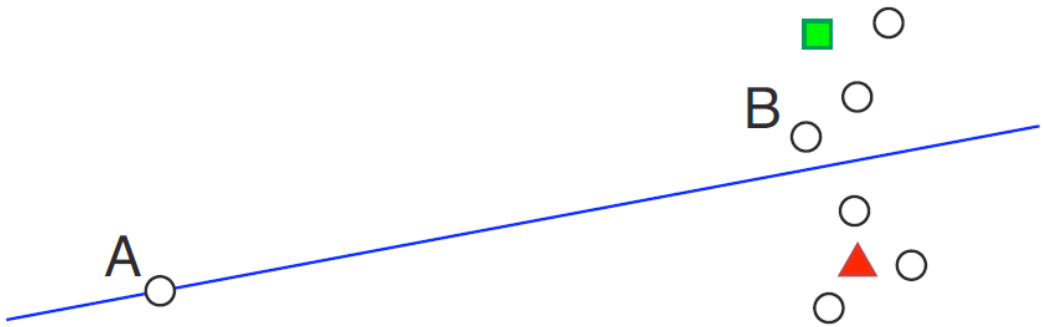
Variance Reduction

Идея

Будем собирать примеры, которые поподают в листы нашей модели, соответсвующие малому числу примеров обучающей выборки



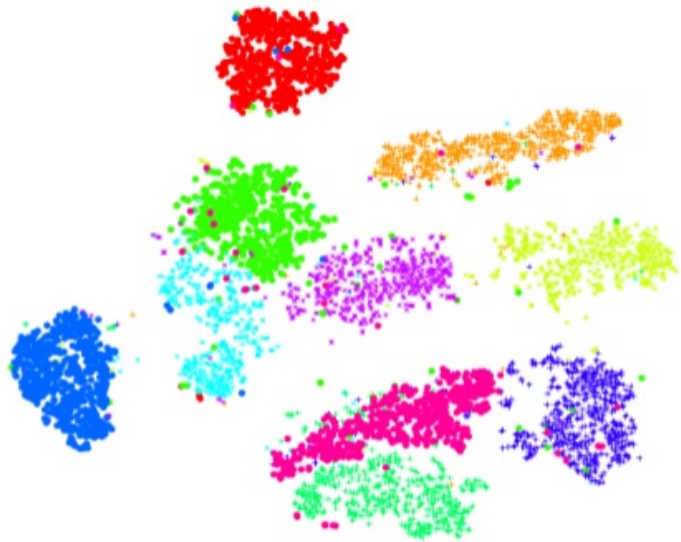
Density-Weighted Methods



Идея

Будем дополнительно использовать информацию о похожести примеров при добавлении новых, чтобы отбираемые примеры были “репрезентативны” относительно данного распределения

Density-Weighted Methods



$$x^* = arg\max_x \phi_A(x) \times \left(\frac{1}{U} \sum_{u=1}^{U} \rho(x, x^u) \right)^{\beta}$$

ϵ-active

Идея

Будем с некоторой вероятностью смотреть и в другие области пространства

Algorithm 1 ϵ-active

1: **Input:** X, ϵ
2: **Output:** x_t, r_t
3: $x_t = \begin{cases} Activelearning(X) & if(q < \epsilon) \\ Random(X) & if(q \geq \epsilon) \end{cases}$
4: **if** x was not queried in the past **then** Query O for label y of x
5: Observe reward r_t

EG-active

Exponentiated gradient active

Будем подбирать вероятность динамически

Algorithm 2 EG-active.

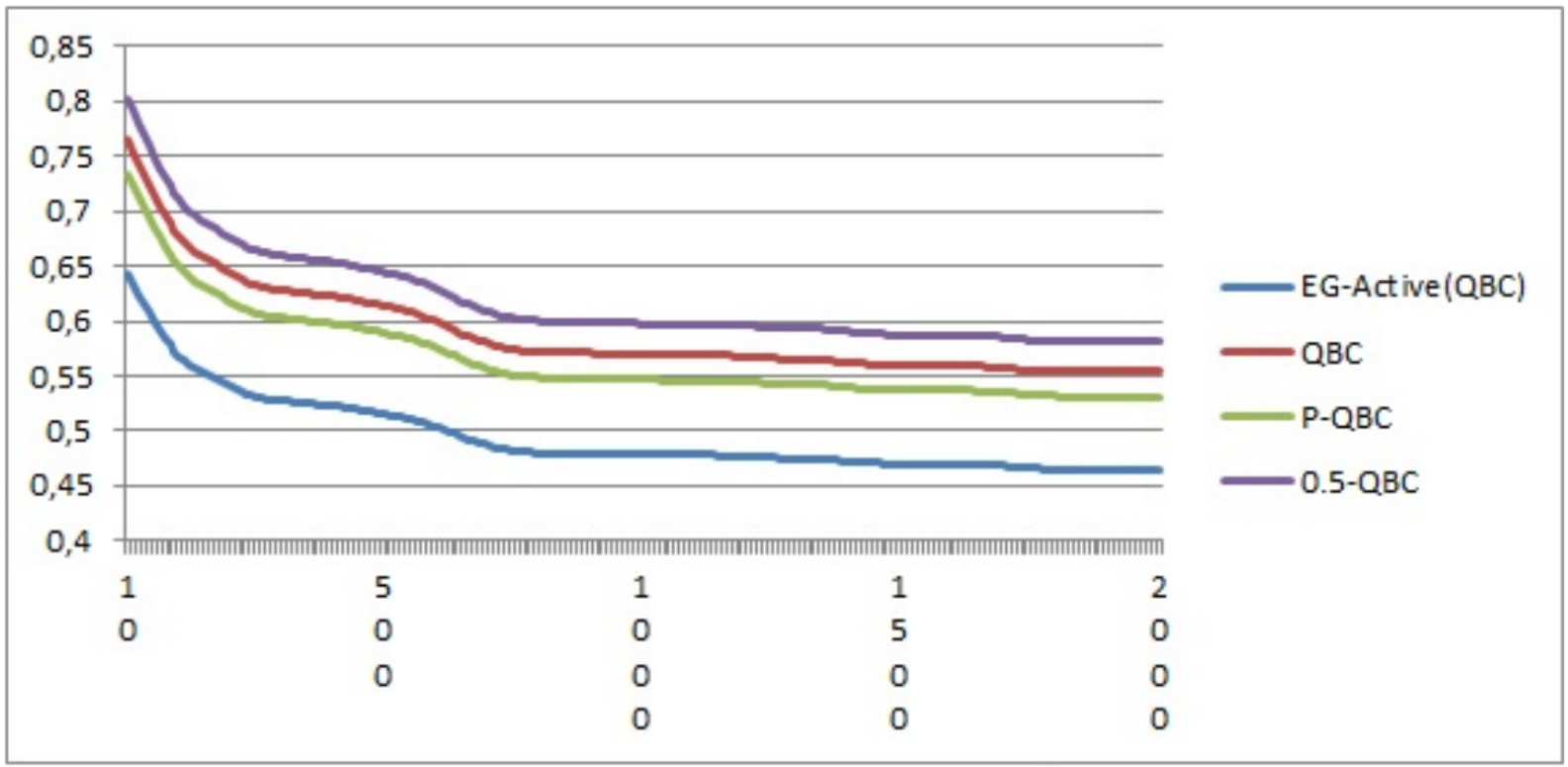
Input: $(\epsilon_1, ..., \epsilon_T)$: candidate values for ϵ
β, τ and k: parameters for EG
N: number of iterations
$p_k \Leftarrow \frac{1}{T}$ and $w_k \Leftarrow 1, k = 1, ..., T$
for i=1 **to** N **do**

Sample d from discrete $(p_1, ..., p_T)$
Run the ϵ-active with ϵ_d
Receive the feedback r_t
$w_k \Leftarrow w_k \exp(\frac{\tau[r_i I(k=d)+\beta]}{p_k}), k = 1, ..., T$
$p_k \Leftarrow (1-k)(\frac{w_k}{\sum_{j=1}^{T} w_j} + \frac{k}{T}), k = 1, ..., T$

end for

EG-active

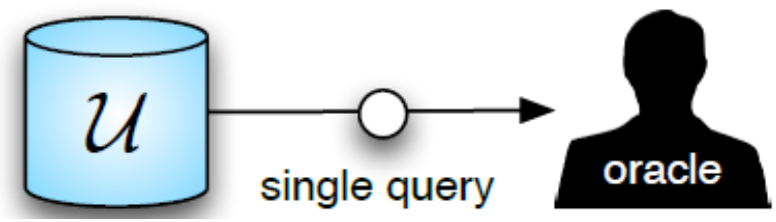
Результаты экспериментов на UCI

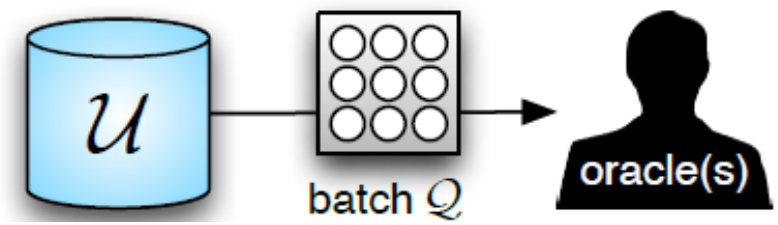


Active Learning in practice

Querying in Batches

Вместо того, чтобы давать экспертам примеры по одному, отдадим сразу пачку





Вопрос:

- Как правильно организовать эту процедуру?

Active Learning in practice

Noisy Oracles

- Эксперты и люди и они совершают ошибки
- Необходимо проверять оценки экспертов другими экспертами
- НЕ каждый эксперт знает правильный ответ при разметке (нужно эксперты в узких областях)
- группа экспертов != миллионы пользователей (смещенные оценки)

Labeling costs

- Экспертам надо платить зарплату
- Много экспертов $\rightarrow$ много денег
- Что лучше? Уточнить оценку для уже известного примера или оценить новый?

Итоги

- Активное обучение простой эфективный метод для набора датасета
- Может быть применено практически для любых методов машинного обучения с учителем
- Требует значительных вычислительных расходов
- Собранный датасет работает только для данных признаков и для данного алгоритма. Если, что-то меняется, то похорошему активно обучаться надо заново
- Тестовый датасет всегда должен быть репрезентативен!!!

Задача

Дано: Имеется набор точек из 10 мерного пространства данных.
Требуется: Требуется реализовать процедуру активного обучения для решения задачи регрессии.

Пошаговая инструкция

1. Скачать данные и запустить шаблон кода на python
   `https://goo.gl/MDZNax`

```
$ python al.py -h
$ python al.py -tr train.txt -te test.txt
```

2. Выбрать алгоритм для решения задачи регресии
3. Выполнить random sampling
4. Разработать процедуру активного обучения
5. Построить графики rmse, в зависимости от числа примеров

Дз по активному обучению:

Задание:

Реализовать один из алгоритмов активного обучения, рассказанных на лекции и применить его в соревновании на Kaggle.

Описание конкурса:

Есть неизвестная 10-мерная функция, значения которой могут быть получены из файла OracleRegression.jar (0.5 rps) (пример использования есть в al.py). Необходимо использовать ее для набора обучающего датасета. В качестве тестовых данных выступает 10^6 точек, сгенеренных заранее. В качестве целевой метрики берется rmse на тесте.

Вопросы