Принципы активного обучения

Иванова Елизавета

0.1 Введение

Большинство задач машинного обучения, которые мы встречаем, относятся к обучению с учителем или без учителя. Рассмотрим задачу обучения с учителем. В ней обучающему алгоритму подаются на вход некоторые *размеченные* тренировочные данные, то есть пары объекты-ответы $\{(x_i, y_i)\}_i \in X \times Y$. Затем по ним обучается *модель* — параметрическое семейство функций $g(x, \theta) : X \times \Theta \to Y$, и под *обучаться* понимается нахождение оптимального θ, аргминимума функции потерь. Такой подход, когда в обучении используются только исходные размеченные данные, относится к *пассивному обучению*.

Активное обучение решает задачи обучения с учителем, используя дополнительно *неразмеченные* данные, то есть объекты, для которых неизвестен ответ (класс, метка, значение целевой функции на этом объекте).

Предположим, что в нашей конкретной задаче обучения с учителем есть некоторая функция, которая сопоставляет ответ любому объекту из неразмеченных данных, но при этом является дорогостоящей процедурой (достаточно дорогой, чтобы не обращаться к ней постоянно). Будем называть ее *оракулом*. Тогда основная идея активного обучения — выбирать объекты среди неразмеченных данных, которые помогут *быстрее обучить модель*, и тем самым минимизировать кол-во вызовов оракула.

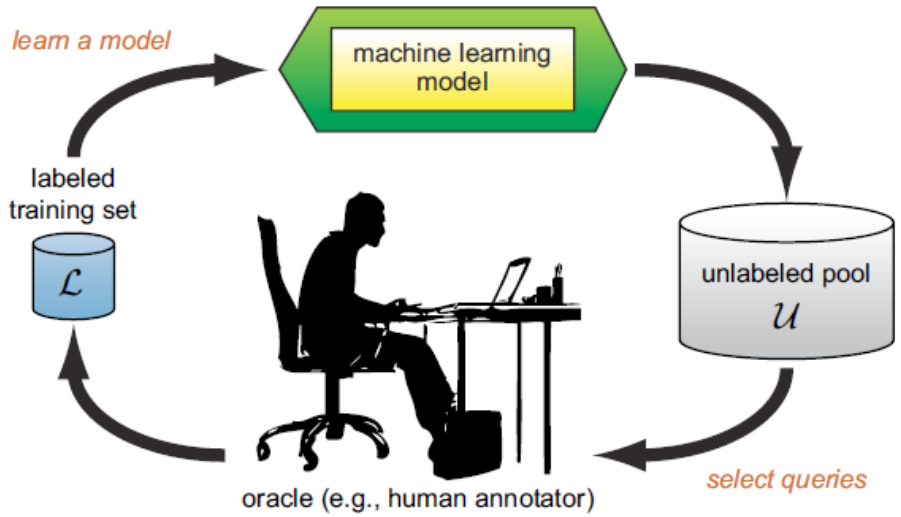


Рис. 1: Схема активного обучения (семплирование из пула)

Активное обучение применяется в любой области, где построение обучающей выборки затратная процедура. Если вы занимаетесь классификацией текстов, изображений и т.п., найти неразмеченные данные не составляет труда. Но готовые размеченные датасетами, которые подходят под вашу задачу, найти сложнее, приходится размечать самому, или просить друзей, или обращаться в специальные сервисы (Яндекс.Толока, Amazon Mechanical Turk). Друзей сильно мучить не хочется, а сервисам нужно платить, поэтому здесь пригодится активное обучение.

Почему это работает? Прежде чем перейти к теоретическим аспектам, давайте рассмотрим два примера, демонстрирующих, почему имеет смысл выбирать объекты для разметки и построения обучающей выборки.

Пример 1. Дана функция $g(x, \theta) = \mathbb{I}_{x>\theta}(x)$, $x \in [0, 1]$, $\theta \in [0, 1]$, и нужно оценить θ, при условии, что мы можем вычислять $g(x, \theta)$ в произвольных точках x, но процедура эта крайне дорогая, и кол-во вызовов хочется сделать как можно меньше.

Наивный подход — взять для разметки равномерную сетку $\{i/n\}$, $i = 1, \ldots, n-1$. Оценка по времени этого решения — $O(n)$ измерений.

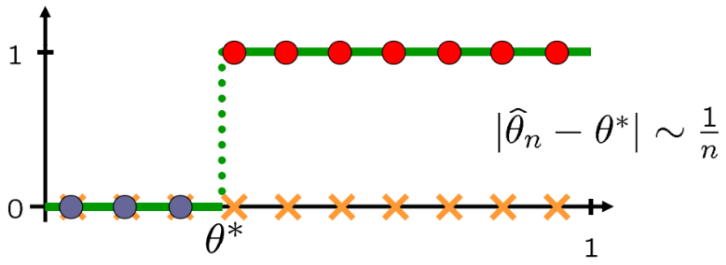


Рис. 2: Задача линейного разделения. Наивный подход

Но быстрее эта задача решается двоичными поиском, временная сложность которого $O(\log n)$.

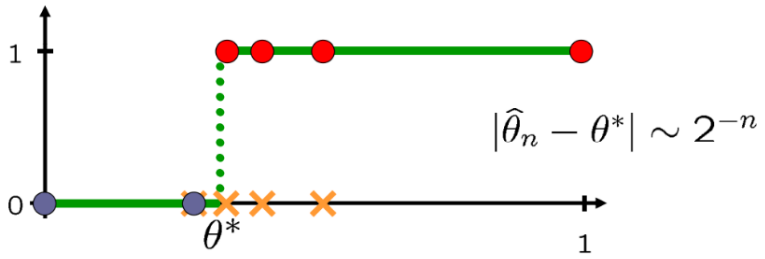


Рис. 3: Задача линейного разделения. Двоичный поиск

Пример 2. Теперь рассмотрим пример, где сравниваются результаты классификации с помощью логистической регрессии и ее комбинации с активным обучением.

На подграфике (a) изображены 400 точек, относящихся к одной из двух меток, сгенерированных из двух различных двумерных гауссовских распределений с одинаковой дисперисией (по 200 из каждого распределения).

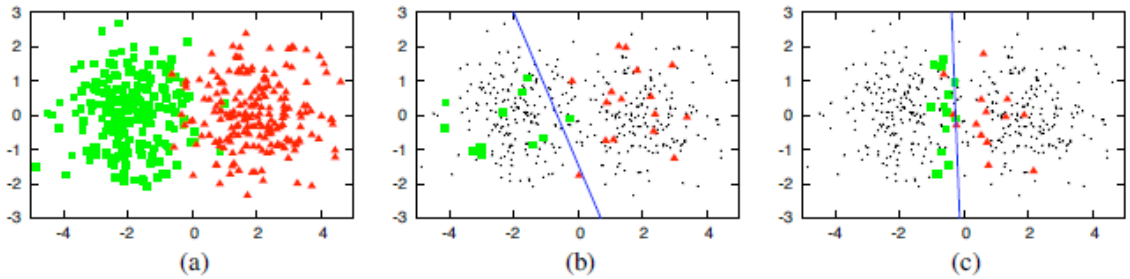


Рис. 4: Пример работы обычной логистической регрессии (b) и логистической регрессии с активным обучением (c)

На подграфике (b) изображена разделящая прямая, построенная логистической регрессией по 30 точкам, выбранных н.о.р. из пула всех данных. Точность классификации 70%. На следующем графике изображена разделящая прямая, построенная логистической регрессией с активным обучением по 30 точкам, выбранных по степени неуверенности. Точность классификации 90%.

Это пример еще раз подтверждает, что для активного обучения нужно меньшее кол-во точек, чтобы обучится до приемлемой точности.

0.2 Постановка задачи активного обучения

Обозначения:

- x_i — объекты, y_i — ответы (метки);
- $U = \{x_i\}_i$ (от *unlabeled*) — неразмеченные данные;
- $L = \{(x_i, y_i)\}_i$ (от *labeled*) — размеченные тренировочные данные.

Задача: обучить модель по размеченным данным L_0, имея возможность обращаться к оракулу, чтобы получать метки для неразмеченных данных U_0.

Вход: размеченные данные L_0, максимальное число вызовов оракула K, неразмеченные данные U_0.

Алгоритм: Обучить модель на L_0. Для $k = 0, 1, \ldots, K-1$: 1. выбрать $x_{k+1} \in U_k$; 2. узнать для него y_{k+1}; 3. получить оптимальное θ_k на тренировочных данных $L_{k+1} := L_k \cup \{(x_{k+1}, y_{k+1})\}$.

Таким образом, активное обучение — это итерационный алгоритм, на каждой итерации которого к текущим тренировочным данным L_k добавляется объект x_j с меткой y_j, вычисленной с помощью оракула.

Замечание 1: Конечно, на каждой итерации можно (даже нужно, потому что обучение модели может быть недешевой операцией) запрашивать метки не для одного объекта x_{k+1}, а для нескольких $\{x_{k+1}^{(i)}\}_{i=1}^m$ и дообучать модель на $L_k \cup \{(x_{k+1}^{(i)}, y_{k+1}^{(i)})\}_{i=1}^m$.

Замечание 2: Как выбирать начальное множество L_0? Наивный способ — равномерно из неразмеченных данных, а можно использовать специфику решаемой задачи. Например, для задач классификации предварительно сделать кластеризацию и взять центры кластеров.

0.3 Стратегии выбора объектов для разметки

В активном обучении выделяют три типа источников неразмеченных данных:

- Семплирование из пула (pool-based sampling) — есть некоторая коллекция неразмеченных данных, и из нее достаются объекты для запроса метки у оракула;
- Семплирование из потока (stream-based selective sampling) — есть поток данных, в каждый момент времени доступен один объект, принимается решение, отобрать этот объект для разметки или нет;
- Генерация запросов (query sampling) — обучающий алгоритм сам строит объекты для разметки.

Семплирование из коллекции наиболее встречающееся, и все перечисленные стратегии относятся к этому типу семплирования.

Замечание 3: Как упоминалось выше, основная идея активного обучения — выбирать *наиболее информативные* (с учетом модели) объекты для разметки, чтобы кол-во вызовов оракула было минимально. Все ниже перечисленные стратегии являются эвристиками, потому что понятие *"наиболее информативные"* нельзя полностью формализовать, результаты об оптимальности конкретной стратегии можно получить разве что в каком-то отдельном частном случае.

Далее будем считать, что мы находимся в условиях задачи классификации, но подобные варианты стратегий можно сформулировать и для задач регрессии.

Введем обозначение $\varphi_\theta(x)$ для функционала-эвристики, оценивающего прирост качества модели при добавлении x к тренировочным данным, так что $x^* = \arg\max_{x \in U} \varphi_\theta(x)$ — следующая точка для разметки;

Стратегия 1: выбор по степени неуверенности (uncertainty sampling). Идея: давайте добавлять к тренировочным данным те объекты, в которых модель больше всего неуверена.

Пусть $P_\theta(y|x)$ — апостериорная вероятность того, что x относится к классу y. В случае бинарной классификации с $y = 0, 1$ функционал-эвристику можно выбрать так $\varphi_\theta(x) = -|P_\theta(y = 0|x) - 0.5|$. Другими словами, берем те x, которые модель θ относит к классу 0 с вероятностью, наиболее близкой к 0.5 (то есть вероятность, что x в классе 1 тоже близка к 0.5).

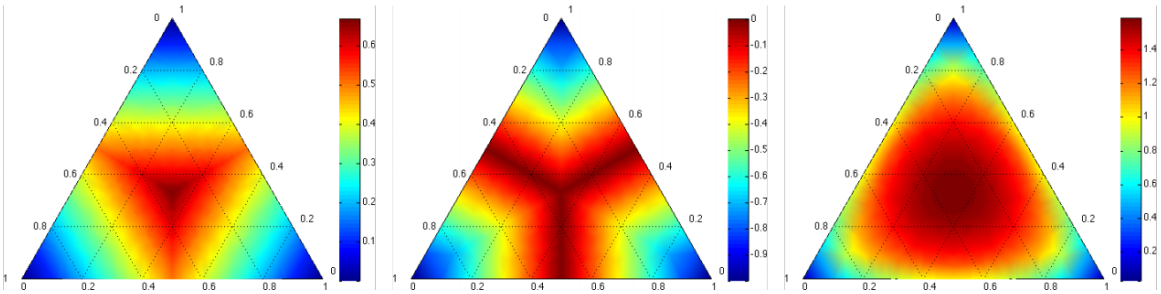
В случае, когда классов больше, чем два:

a) $\varphi_\theta(x) = 1 - P_\theta(y^*|x)$, где $y^* = y^*(x)$ — наиболее вероятный класс для x. Максимизация этой величины по x эквивалента $\min_x \max_{y \in Y} P_\theta(y|x)$. Только здесь не учитываются вероятности $P_\theta(y|x)$ на других метках, поэтому был предложен следующий подход.

b) $\varphi_\theta(x) = P_\theta(y_2^*|x) - P_\theta(y_1^*|x)$, где $y_i^* = y_i^*(x)$ — i-й вероятный класс для x. Здесь *минимизируется* зазор между двумя лучшими предсказаниями y_1 и y_2. Но если меток очень много, лучше использовать следующий функционал:

c) $\varphi_\theta(x) = -\sum_{y \in Y} P_\theta(y|x) \log P_\theta(y|x)$ — не что иное, как энтропия. Вспомните, что ее максимум достигается на равномерном распределении.

Ниже на тепловых картах сравниваются значения функционалов-эвристик a)-c) (обратите внимание, что тепловые шкалы на трех графиках разные). Объекты, относительно которых модель больше всего неуверена, находятся в центре, так как для них все апостериорные вероятности $P_\theta(y_i|x)$ примерно равны. Объекты, находящиеся ближе к углам, считаются менее информативными, так как модель больше всего уверена в предсказанным для них меткам.



(a) least confident (b) margin (c) entropy

Рис. 5: Тепловые карты различных $\varphi_k(x)$ в случае трех классов. Синяя область — наименее информативные объекты, красная область — наиболее информативные объекты согласно данной стратегии

Форму области красного цвета на каждом графике легко объяснить — для a) она имеет форму треугольника, так как значение функционала определяется вероятностью $P_\theta(y^*|x)$, для b) область сосредоточена вдоль перпендикуляров от центра треугольника, так как она соответствует равенству $P_\theta(y_1^*|x)$ и $P_\theta(y_2^*|x)$. Что касается c), то в этом функционале учитываются все априорные вероятности, и если для точки x вероятность $P_\theta(y|x)$ мала для некоторого y (такие x располагаются вдоль сторон), то эта точка не включатся в число информативных по стратегии c) (так как модель считает, что этот объект не относится к тому классу).

Стратегия 2: отбор комитетом (query by committee). *Комитетом моделей* будем называть набор моделей, обученных на одном и том же множестве L. Обозначение —

$C_L = \{\theta_1, \ldots, \theta_m\}$. Идея стратегии: выбирать объекты с наибольшей *несогласованностью* комитетов моделей.

Пусть $V(y, x) = |\theta \in C_L : y_\theta(x) = y|$ — количество моделей из комитета C_L, выбравших y, $\hat{P}(y|x) = V(y, x)/|C_L|$ — соответственно доля моделей, выбравших y.

Тогда несогласованность можно определить через $\varphi_\theta(x) = -\sum_{y \in Y} \hat{P}(y|x) \log \hat{P}(y|x)$ — энтропию голосующей вероятности.

Как уже говорилось, максимум энтропии достигается на равномерном распределении, значит, максимизация этого функционала соответсвует выбору объекта, для которого $V(y, x)$ примерно равны для каждого y.

Стратегия 3: Сокращение пространства решений (version space reduction). Идея этого подхода заключается в уменьшении пространствами решений (version space). Под пространством решений в общем случае понимают множество гипотез, которые согласуются с текущими тренировочными данными. Понятие получается довольно размытое, но в задаче классификации гипотезы *связаны* с всевозможными разделяющими гиперплоскостями и т.п.

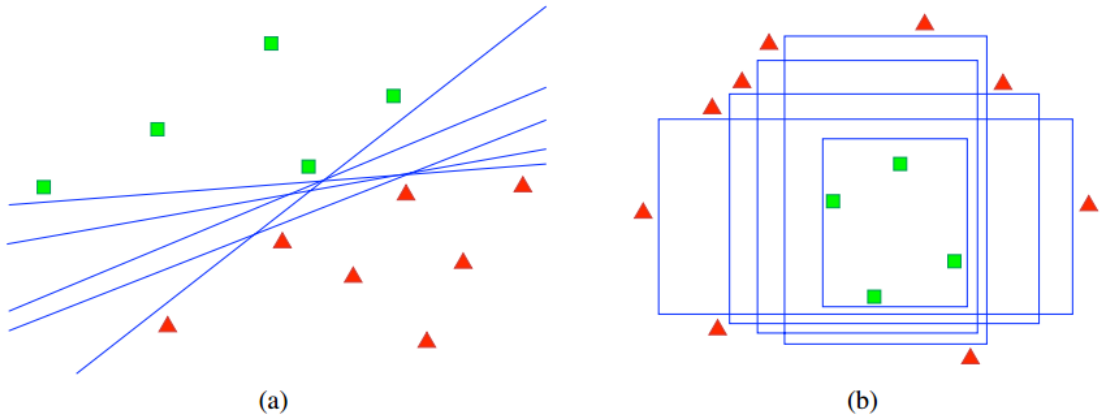


Рис. 6: Примеры пространств решений

Поскольку пространство решений это очень широкое понятие, то стратегии его уменьшения можно описать только на примере конкретной задачи. Ниже приведен пример, как комбинируется SVM и активное обучение, и уменьшение пространства решений его ключевая идея.

Стоит отметить, что отбор комитетом на самом деле тоже уменьшает пространство решений.

Стратегия 4: ожидаемое влияние на модель (expected model change). Идея: будем искать такой объект, добавление которого в обучающее множество приведет к наибольшему *изменению* параметра модели θ. Само изменение будем мерять с помощью нормы градиента функционала обучения $\ell_\theta(L)$, где L — обучающее множество.

Нам нужно посчитать влияние на модель, но мы не знаем метку на x из неразмеченного множества U. Однако у нас есть апостриорное распределение $P_\theta(y|x)$, поэтому будем считать взвешенную сумму $\varphi_\theta(x) = \sum_{y\in Y} P_\theta(y|x) \cdot \|\nabla \ell_\theta(L \cup \{(x,y)\})\|$, другими словами, мат. ожидание нормы градиента.

Вспомните, что $\nabla \ell_\theta(L) = 0$ (θ оптимум на обучающем множестве L), поэтому можно воспользоваться следующим приближением $\nabla \ell_\theta(L \cup \{(x,y)\}) \approx \nabla \ell_\theta(\{(x,y)\})$ для оптимизации вычислений.

Стратегия 5: ожидаемое уменьшение ошибки (expected error reduction). Идея: максимизация уверенности на остальных объектах в неразмеченном множестве.

Пусть $\theta_+(x,y)$ — оптимальный вектор параметров после дообучения модели на $L \cup \{(x,y)\}$, а $y^* = y^*(z)$ — наиболее вероятный класс для z в модели, обученной на L.

Рассмотрим функционал $\varphi_\theta(x) = -\sum_{y\in Y} P_\theta(y|x) \sum_{z\in U}(1 - P_{\theta_+(x,y)}(y^*|z))$, его максимизация соответствует минимизации $\sum_{y\in Y} P_\theta(y|x) \sum_{z\in U}(1 - P_{\theta_+(x,y)}(y^*|z))$. То есть находим x, добавление которого увеличивает $P_{\theta_+(x,y)}(y^*|z))$ (делает как можно ближе к 1) для всех неразмеченных z. Так как метку для x мы не знаем, то делаем усреднение по всем y.

Замечание: В стратегиях выбор по степени неуверенности, отбор комитетом, ожидаемое влияние на модель к числу информативных объектов могут попасть аутлаеры. Поэтому их нужно исключить заранее, или рассмотривать не $\max_{x\in U} \varphi_\theta(x)$, а $\max_{x\in U} \varphi_\theta(x) \cdot \left(\frac{1}{|U|}\sum_{z\in U} \rho(x,z)\right)^\beta$, где ρ — это некоторая мера близости объектов, β — нормировочный коэффициент, чтобы контролировать величину весов. Последняя стратегия устойчива к выбросам.

0.4 Активное обучение в SVM

Посмотрим, как активное обучение комбинируется с классическими методами классификации, таким как SVM. Описанный ниже метод относится к статье Tong and Koller (2001), краткий обзор других статей на эту тему можно найти в Settles (2010).

Будем предполать, что:

- данные линейно разделимы (но подход можно адаптировать под допущение ограниченного кол-ва ошибок, применять kernel trick, как это сделано в SVM);
- класса два, их метки 1 и -1.

Напоминание. В обычном SVM ищется классификатор вида $f(x) = \text{sign}(\langle x, w\rangle - w_0)$ и решается оптимизационная задача $\|w\|^2/2 \to \min_{w,w_0}$ при условиях $y_i(\langle x_i, w\rangle - w_0) \geq 1$, где w, w_0 — параметры алгоритма.

Величина $|\langle x_i, w\rangle - w_0|/\|w\|$ — это расстояние от точки x_i до разделяющей гиперплоскости $\langle x, w\rangle - w_0 = 0$, поэтому когда минимизируется $\|w\|$, максимизируется зазор между

опорными гиперплоскостями, которые проходят через ближайшие к разделяющей гиперплоскости x_i. Можно считать, что $\|w\| = 1$, тогда оптимизационную задачу можно переписать как $\min_i y_i(\langle x_i, w\rangle - w_0) \to \max_{w,w_0}$ при условиях $\|w\| = 1$ и $y_i(\langle x_i, w\rangle - w_0) \geq 1$.

О пространстве решений. По определению пространством решений будет являться $\mathcal{V} = \{f \,|\, y_i f(x_i) > 0,\ i = 1 \dots n\}$. Поскольку между f и w существует биекция, то можно считать, что $\mathcal{V} = \{w \,|\, \|w\| = 1,\ y_i(\langle x_i, w\rangle - w_0) > 0,\ i = 1 \dots n\}$.

Обозначим за $Area(\mathcal{V})$ площадь пространства решений.

Теоретическое отступление, результат которого используется дальше. Если предположить, что $\|x_i\| = 1$, то $\min_i y_i(\langle x_i, w\rangle - w_0) = \min_i |\langle w, y_i x_i\rangle - y_i w_0| = \min_i |\langle w, y_i x_i\rangle - y_i w_0| / \|y_i x_i\|$, а значит зазор между гиперплоскостями также равен минимальному расстоянию от w до гиперплоскости $\langle v, y_i x_i\rangle - y_i w_0 = 0$ относительно v.

Отсюда следует, что оптимальный параметр w — это центр гиперсферы наибольшего радиуса в $\mathcal{V}$, которая бы не пересекалась ни с одной из гиперплоскостей полном пространстве.

Об активном обучении. Пусть также $\mathcal{V}_k^- = \mathcal{V}_k \cap \{w \,|\, \langle w, x\rangle < 0\}$ и $\mathcal{V}_k^+ = \mathcal{V}_k \cap \{w \,|\, \langle w, x\rangle > 0\}$, где $\mathcal{V}_k$ — это пространство решений после k итераций активного обучения. Другими словами, $\mathcal{V}_k^-$ и $\mathcal{V}_k^+$ — это пространства решений, если метка для x оказалась -1 и 1 соответсвенно. Также за $\mathcal{V}_k(\ell)$ обозначим пространство решений после k итераций активного обучения, который использует стратегию ℓ.

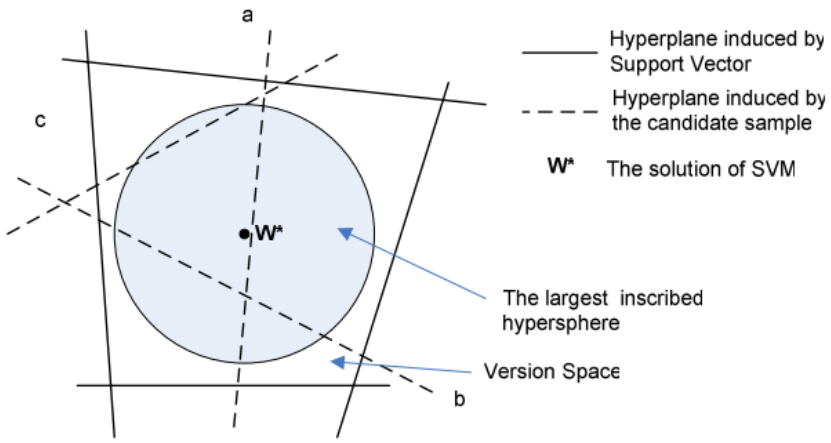
В Tong and Koller (2001) приводится лемма, говорящая о том, что оптимальной стратегий будет деление $Area(\mathcal{V})$ примерно пополам. Точнее, если выбрать такую стратегию в активном обучении, которую условно обозначим за ℓ^*, то для любой другой стратегии ℓ выполняется неравенство:

$$\sup_{P \in \mathcal{P}} \mathrm{E}_P[Area(\mathcal{V}_i(\ell^*))] \leq \sup_{P \in \mathcal{P}} \mathrm{E}_P[Area(\mathcal{V}_i(\ell^*))]$$

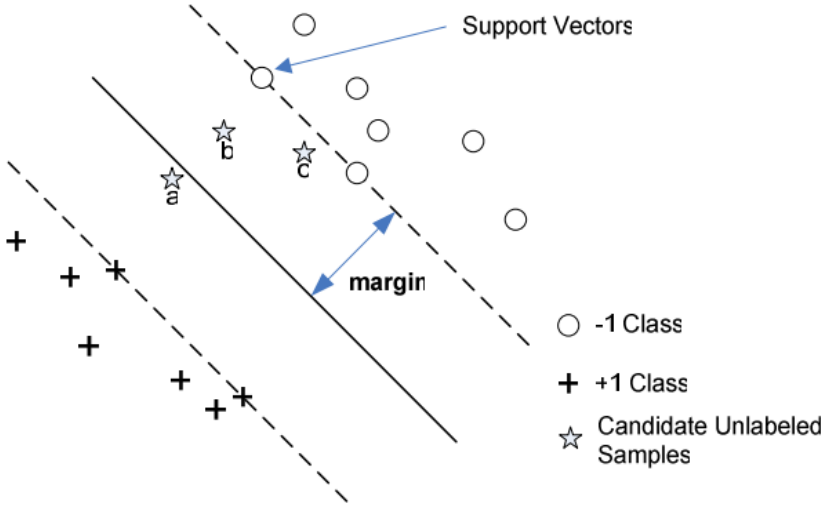
для любого $i \geq 1$, где $\mathcal{P}$ — множество всех условных распределений $P(y|x)$. При этом строгое неравенство достигается, если существует итерация $j \in 1, \dots, i$, такая, что ℓ не делит пространство решений $\mathcal{V}_{j-1}$ пополам.

Пусть w_k — центр гиперсферы наибольшего радиуса, которая вписана в пространство решений $\mathcal{V}_k$. Предлагается три способа делить пространство решений так, чтобы площади полученных областей были примерно равны:

- *Simple Margin.* Теперь перебирая все неразмеченные объекты x, выберем тот, для которого соответсвующая гиперплоскость ближе всего к центру w_k. По отступлению выше такой x_k находится ближе всего к разделяющей гиперплоскости в пространстве объектов.



(a) Version Space Representation of SVM



(b) Feature space Representation of SVM

Рис. 7: Активное обучение в SVM

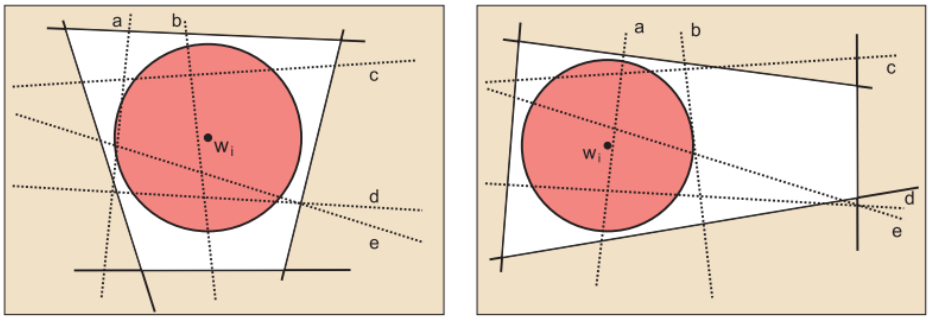


Рис. 8: Simple Margin. (a) выбирается ближайшая гиперплоскость b. (b) выбирается ближайшая гиперплоскость a

Обозначим за m_k радиус гиперсферы. Рассмотрим неразмеченный объект x, $\mathcal{V}_k^-$, $\mathcal{V}_k^+$ — подпространства в пространсве решений, соответствующие отрицательной и положительной метке x. Теперь обозначим за m_k^- и m_k^+ радиусы вписанных в $\mathcal{V}_k^-$ и $\mathcal{V}_k^+$ сфер.

- *MaxMin Margin.* Эта стратегия предлагает искать $\arg\max_x \min\{m_k^+, m_k^-\}$. Так как m_k связан с $Area(\mathcal{V}_k)$, то на самом деле максимизируется $\min\{Area(\mathcal{V}_k^+), Area(\mathcal{V}_k^-)\}$, тогда $Area(\mathcal{V}_k^+)$ и $Area(\mathcal{V}_k^-)$ будут максимально близки.
- *Ratio Margin.* В этой стратегии ищется $\arg\max_x \min\{m^+/m^-, m^-/m^+\}$, она объясняется так же, как и стратегия MaxMin Margin.

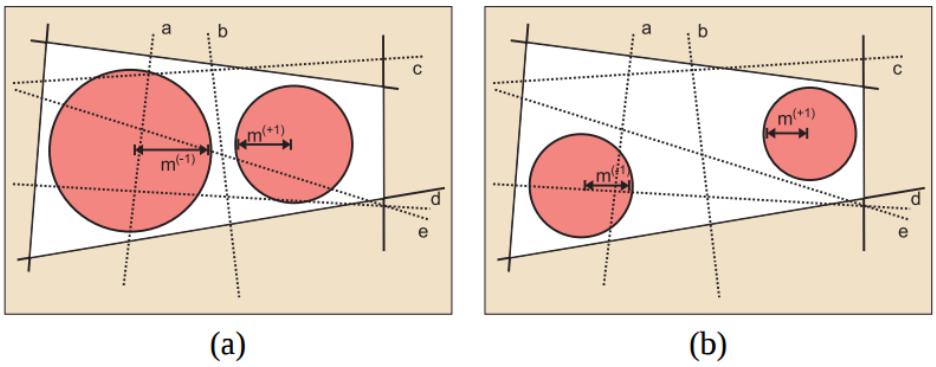


Рис. 9: (a) MaxMin Margin — выбирается гиперплоскость b. (b) Ratio Margin — выбирается гиперплоскость e

0.5 Недостатки активного обучения

Стратегии активного обучения устроены так, что они рекомендуют точки, лежащие, например, вблизи разделяющей гиперплоскости в текущей модели. Это хорошо работает, если нет крупных областей, где модель бы ошибалась. Таким образом, у алгоритма среди данных есть необследованные участки, что повышается ошибку на тестовых данных.

Возникает так называемая exploration-exploitation dilemma, но есть приемы, связанные с применением контекстных бандитов (см. Bouneffouf and others 2014) и случайным изучением всего неразмеченного множества (см. Bouneffouf 2015), которые не увеличивают время обучения так, что сама идея активного обучения теряет смысл.

Литература

Bouneffouf, Djallel. 2015. “Exponentiated Gradient Exploration for Active Learning.”

Bouneffouf, Djallel, and others. 2014. “Contextual Bandit for Active Learning: Active Thompson Sampling.”

Jiang, Jun, and Horace Ip. 2007. “Dynamic Distance-Based Active Learning with SVM.” *Machine Learning and Data Mining in Pattern Recognition. Lecture Notes in Artificial Intelligence*.

Springer-Verlag Berlin Heidelberg.

Settles, Burr. 2010. "Active Learning Literature Survey." Computer Sciences Technical Report 1648. University of Wisconsin–Madison.

Tong, Simon, and Daphne Koller. 2001. "Support Vector Machine Active Learning with Applications to Text Classification." *Journal of Machine Learning Research*, 45–66.