

信頼区間上限の不確実性サンプリングへの応用

Application of Upper Confidence Bound to Uncertainty Sampling

齋藤 淳哉[†]
Junya Saito篠原 歩[†]
Ayumi Shinohara

1 序論

分類器の学習には一般に大量の訓練データが必要である。訓練データとは特徴ベクトルとラベルの組である。特徴ベクトルだけは簡単に得られるが、そのラベルを得るのは困難な場合がある。

例えば、メールがスパムかそうでないかを判別する分類器の学習について考えてみる。まず、大量のメールを収集し、それぞれメールを処理して、特徴ベクトルに変換する。またメールがスパムかそうでないかを判断して、ラベルを決定する。大量のメールを収集し、処理して、特徴ベクトルに変換することは計算機に任せることができる。しかし、そのメールがスパムかそうでないかの判断は専門家(人間)が行わなければならない。人間の判断は時間的、経済的にコストが大きい。分類器を学習させるためのコストを小さくするためには専門家にラベルを質問する回数を減らす必要がある。質問する回数を減らすためには計算機によって質問を厳選することが重要である。

プールベース能動学習はこのような問題を解決しようと研究されている[6]。プールベース能動学習では、分類器の学習とラベルを質問する特徴ベクトルの選択を並行して行う。すなわち、ステップ n において、大量の特徴ベクトルから、質問方針に従って、特徴ベクトルをひとつ選び、専門家にラベルを質問する。これを訓練データとし、ステップ $n-1$ までに得られた訓練データ集合に追加する。この訓練データ集合を用いて分類器を学習させる。これを分類器の精度が目標値に達するまで繰り返す。

ここで、 X を特徴ベクトル集合、 $P_n(C_+|\mathbf{x}_i)$ と $P_n(C_-|\mathbf{x}_i)$ を、それぞれ、ステップ n 終了時点での特徴ベクトル \mathbf{x}_i が C_+ と C_- である確率の推定値とする。

能動学習で一般的な質問方針は、ステップ n において、ステップ $n-1$ 終了時点での訓練データ集合で学習させた分類器がラベルの最も判断のつきにくい特徴ベクトルを選ぶ、という不確実性サンプリングである[3]。

ラベルが C_+ と C_- の2種類の場合、ステップ n において、特徴ベクトル \mathbf{x}_i のラベルの判断のつきにくさは、エントロピー関数を用いて、式(1)のように定義される。

$$-P_{n-1}(C_+|\mathbf{x}_i)\log(P_{n-1}(C_+|\mathbf{x}_i)) - P_{n-1}(C_-|\mathbf{x}_i)\log(P_{n-1}(C_-|\mathbf{x}_i)) \quad (1)$$

ただし、学習初期はランダムに質問する。

多くの場合、不確実性サンプリングはランダムサンプリングより効率的に学習が可能である。しかし、不確実性サンプリングには問題もある。不確実性サンプリングは、どれだけ質問を繰り返しても、 \mathbf{x}_i が C_+ である確率の推定値 $P_n(C_+|\mathbf{x}_i)$ が、真の確率 $P_*(C_+|\mathbf{x}_i)$ に収束することは保証されない。さらに、式(1)の意図は $P_*(C_+|\mathbf{x}_i)$ が 0.5 に近い特徴ベクトルを多く質問することであるが、実際は、それすら保証されていない。

本稿では、不確実性サンプリングに、Auerら[1]によって提案された、多腕バンディット問題[5]を解く簡潔なアルゴリズム UCB1 を組み合わせた UCB1 サンプリングを提案する。そして、ある条件の下で、UCB1 サンプリングを使えば、質問回数の増加に伴って、任意の特徴ベクトル \mathbf{x}_i の $P_*(C_+|\mathbf{x}_i)$ と $P_n(C_+|\mathbf{x}_i)$ の誤差は十分小さくなり、さらにラベルが C_+ である確率が 0.5 から遠い特徴ベクトル \mathbf{x}_i の質問回数の期待値が $O(\log n)$ で抑えられることを示す。また、計算機実験で、不確実性サンプリングを使用して分類器を効率的に学習させることができるモデルでは、UCB1 サンプリングを使用しても分類器を効率的に学習させることができ、不確実サンプリングを使用すると分類器を効率的に学習させることができないモデルでも、UCB1 サンプリングを使用すれば分類器を効率的に学習させることができることを示す。

2 準備

本稿で扱うプールベース能動学習のモデルを定義する。特徴ベクトルのラベルを C_+ と C_- の2種類とし、それぞれを 1 と 0 に対応させる。有限だが、非常に大きい特徴ベクトル集合を \mathcal{X} とする。特徴ベクトル集合 \mathcal{X} 上の特徴ベクトル \mathbf{x}_i の生起確率を $\Pr_D(\mathbf{x}_i)$ とする。特徴ベクトル \mathbf{x}_i のラベルが C_+ である真の確率を $P_*(C_+|\mathbf{x}_i)$ とする。特徴ベクトル \mathbf{x}_i を質問すると、専門家 EX によりラベルが判定される。このときのラベルを $\text{EX}(\mathbf{x}_i)$ と表す。同じ特徴ベクトルのラベルを何度も質問することが可能で、その度にラベルは $P_*(C_+|\mathbf{x}_i)$ に従って確率的に判定される。つまり、 $P_*(C_+|\mathbf{x}_i) = \mathbb{E}[\text{EX}(\mathbf{x}_i)]$ を満たす。

プールベース能動学習は次のように進行する。初期状態として、ステップ $n=1$ 、初期訓練データ集合 $L_0 = \phi$ とする。ステップ n において、まず、特徴ベクトル集合 \mathcal{X} から \Pr_D に基づいて、大きさ N の特徴ベクトル集合 $X \subseteq \mathcal{X}$ を生成する。特徴ベクトル集合 X から質問方針にしたがって、特徴ベクトルを1つ選択する。次にこの特徴ベクトル \mathbf{x}_n のラベルを専門家 EX に質問する。このとき判定されたラベルを $t_n = \text{EX}(\mathbf{x}_n)$ とする。特徴ベクトル \mathbf{x}_n とラベル t_n を組にして訓練データ (\mathbf{x}_n, t_n) とし、訓練データ集合 L_n を $L_n = L_{n-1} \cup \{(\mathbf{x}_n, t_n)\}$ とする。訓練データ集合 L_n を用いて分類器を学習させる。

[†] 東北大学 大学院情報科学研究科, Graduate School of Information Sciences, Tohoku University

これを繰り返す。分類器は、訓練データ集合 L_n を用いて、特徴ベクトル \mathbf{x}_i が C_+ である真の確率 $P_*(C_+|\mathbf{x}_i)$ の推定値 $P_n(C_+|\mathbf{x}_i)$ を計算する。なお、能動学習時に使用する分類器と評価時に使用する分類器は同一である必要はないので、後述する実験では異なる分類器を使用している。

本稿では分類器に、RBF ネットワークのひとつの **Nadaraya-Watson モデル** [4, 7] を採用する。 $P_n(C_+|\mathbf{x}_i)$ を式 (2) で定義する。

$$P_n(C_+|\mathbf{x}_i) \equiv \frac{\sum_{(\mathbf{x}_j, t_j) \in L_n} v(\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\|) t_j}{\sum_{(\mathbf{x}_j, t_j) \in L_n} v(\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\|)} \quad (2)$$

ここに $v(r)$ は動径基底関数である。Nadaraya-Watson モデルの動径基底関数 $v(r)$ は一般的に、式 (3) で定義するガウス関数 $v_{\text{GAUSS}}(r)$ とすることが多い。

$$v_{\text{GAUSS}}(r) \equiv \exp\left(-\frac{r^2}{2\sigma^2}\right) \quad (3)$$

3 UCB1 サンプルング

3.1 定義

不確実性サンプルングに、多腕バンディット問題を簡潔に解くアルゴリズム UCB1 を応用した **UCB1 サンプルング** を提案する。不確実性サンプルングは式 (1) で定義されるように C_+ である確率が最も 0.5 に近い特徴ベクトルを貪欲に質問するアルゴリズムである。これに対し、UCB1 サンプルングでは次式で定義する **UCB 値** が最大の特徴ベクトルを質問するアルゴリズムである。ステップ n での特徴ベクトル \mathbf{x}_i の UCB 値は

$$\text{Util}(P_{n-1}(C_+|\mathbf{x}_i)) + \alpha \sqrt{\frac{2 \ln \sum_{\mathbf{x}_k \in X} \sum_{(\mathbf{x}_j, t_j) \in L_{n-1}} v(\|\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_k\|)}{\sum_{(\mathbf{x}_j, t_j) \in L_{n-1}} v(\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\|)}} \quad (4)$$

である。ここに

$$\text{Util}(x) \equiv x(1-x)$$

で、 α は探索 (第2項) と搾取 (第1項) のバランスを決める定数である。 $\ln x$ は $\log_e x$ を表し、以降でもこれを使う。学習初期に UCB 値が無限大に発散する特徴ベクトルがいくつか存在するときは、その特徴ベクトルの中からランダムに質問する。 $\alpha = 0$ のとき、UCB1 サンプルングは不確実性サンプルングに一致する。

以降では、この UCB1 サンプルングのもつ性質について述べていく。

3.2 性質

次に示す条件の下での UCB1 サンプルングの性質について述べる。まず、各ステップで特徴ベクトル集合 \mathcal{X} から Pr_D に基づいて生成される特徴ベクトル集合 $X \subseteq \mathcal{X}$ が学習中に変わらないとする。 $\alpha = 1$ とする。 $P_*(C_+|\mathbf{x}_i)$ は特徴ベクトル

$\mathbf{x}_i \in X$ に対し、リプシッツ連続とする。すなわち、任意の $\mathbf{a}, \mathbf{b} \in X$ について

$$|\text{Pr}_*(C_+|\mathbf{a}) - \text{Pr}_*(C_+|\mathbf{b})| \leq K \|\mathbf{a} - \mathbf{b}\| \quad (5)$$

が成り立つとする。ここに K はリプシッツ定数である。また、式 (2) で定義した分類器の動径基底関数 $v(r)$ を式 (6) で定義する $v_{\text{RECT}}(r)$ とする。

$$v_{\text{RECT}}(r) \equiv \begin{cases} 1 & \text{if } r \leq R \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases} \quad (6)$$

ここに R はラベルの有効範囲を決めるパラメータで、 $0 < R \ll 1/K$ とする。

また、ステップ n 終了時点での特徴ベクトル \mathbf{x}_i の半径 R 以内の質問回数を $T_{R, \mathbf{x}_i}(n)$ とする。すなわち

$$T_{R, \mathbf{x}_i}(n) = |\{\mathbf{x}_j \in L_n : \|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\| \leq R\}|$$

とする。

補題 1. UCB1 サンプルングを使用して質問をするとき、ステップ $n \rightarrow \infty$ において、任意の特徴ベクトル $\mathbf{x}_i \in X$ の半径 R 以内の質問回数 $T_{R, \mathbf{x}_i}(n) \rightarrow \infty$ となる。

証明. 背理法で示す。特徴ベクトル集合 X を、半径 R 以内の質問回数がある回数を超えない特徴ベクトル集合 X_{ns} と、それ以外 X_{ps} に分割でき、それぞれが空でないと仮定する。ステップが1つ進むごとに特徴ベクトルのラベルを1つ質問するので、明らかに X_{ps} は空でない。 $T_{R, \mathbf{x}_i}(n)$ が定数 m で抑えられる特徴ベクトルを $\mathbf{x}_{\text{ns}} \in X_{\text{ns}}$ とする。この特徴ベクトル \mathbf{x}_{ns} の UCB 値は少なくとも

$$c_1 + \sqrt{\frac{2 \ln c_2 n}{m}}$$

である。ここに c_1 と $c_2 > 0$ は定数である。また、 X_{ps} に含まれる特徴ベクトルの UCB 値は高々

$$c_3 + \sqrt{\frac{2 \ln c_4 n}{\text{inc}(n)}}$$

である。ここに c_3 と $c_4 > 0$ は定数である。 inc は単調増加関数で $n \rightarrow \infty$ のとき、 $\text{inc}(n) \rightarrow \infty$ となる関数である。 n が十分大きいとき

$$c_1 + \sqrt{\frac{2 \ln c_2 n}{m}} > c_3 + \sqrt{\frac{2 \ln c_4 n}{\text{inc}(n)}}$$

は、任意の m について成り立つ。上式が成り立つとき、 \mathbf{x}_{ns} は、UCB 値が特徴ベクトル集合 X の中で最大となるので、ラベルを質問する。これは仮定に矛盾する。したがって、補題は成り立つ。 \square

補題 2 (Hoeffding の不等式 [2]). $[0, 1]$ の範囲の値をとる、独立な確率変数 X_1, \dots, X_n の平均を $\mu_n = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n X_i$ とし、平均の期待値を $\mu_* = \text{E}[\mu_n]$ とすると、任意の $\epsilon > 0$ に対して次式が成り立つ。

$$\text{Pr}(|\mu_n - \mu_*| \geq \epsilon) \leq 2e^{-2\epsilon^2 n}$$

補題 3. X_1, \dots, X_n を $[0, 1]$ の範囲の値をとる独立な確率変数とする。ただし、それぞれ、平均の期待値が高々 $\gamma \geq 0$ だけ異なる分布から発生したものとする。 X_1, \dots, X_n の平均を $\mu_n = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n X_i$ とし、 X_1, \dots, X_n を発生させたどれかの分布の平均の期待値を μ_* とすると、任意の $\epsilon > \gamma$ に対して次式が成り立つ。

$$\Pr(|\mu_n - \mu_*| \geq \epsilon) \leq 2e^{-2(\epsilon-\gamma)^2 n} \quad (7)$$

証明. $E[\mu_n] = \mu_* + p$ とする。 p は、 μ_* の選択に関する確率変数。 Hoeffding の不等式を使うことで次のように求められる。

$$\begin{aligned} \Pr(|\mu_n - \mu_*| \geq \epsilon) &= \Pr(\mu_n - \mu_* \geq \epsilon) + \Pr(\mu_n - \mu_* \leq -\epsilon) \\ &\leq \Pr(\mu_n - \mu_* \geq \epsilon + p - \max|p|) \\ &\quad + \Pr(\mu_n - \mu_* \leq -\epsilon + p + \max|p|) \\ &\leq \Pr(\mu_n - (\mu_* + p) \geq \epsilon - \max|p|) \\ &\quad + \Pr(\mu_n - (\mu_* + p) \leq -\epsilon + \max|p|) \\ &= \Pr(|\mu_n - (\mu_* + p)| \geq \epsilon - \max|p|) \\ &\leq \Pr(|\mu_n - (\mu_* + p)| \geq \epsilon - \gamma) \\ &= \Pr(|\mu_n - E[\mu_n]| \geq \epsilon - \gamma) \\ &\leq 2e^{-2(\epsilon-\gamma)^2 n} \end{aligned}$$

□

定理 1. UCB1 サンプリングを使用して質問をするとき、誤差を高々 KR 許して、任意の特徴ベクトル $\mathbf{x}_i \in X$ の $P_n(C_+|\mathbf{x}_i)$ は $P_*(C_+|\mathbf{x}_i)$ に確率収束する。

証明. 補題 3 より、任意の特徴ベクトル $\mathbf{x}_i \in X$ と任意の $\epsilon > KR$ について

$$\Pr(|P_*(C_+|\mathbf{x}_i) - P_n(C_+|\mathbf{x}_i)| \geq \epsilon) \leq 2e^{-2(\epsilon-KR)^2 T_{R,\mathbf{x}_i}(n)}$$

が成り立つ。補題 1 より $n \rightarrow \infty$ のとき、 $T_{R,\mathbf{x}_i}(n) \rightarrow \infty$ となるので

$$\begin{aligned} \lim_{n \rightarrow \infty} \Pr(|P_*(C_+|\mathbf{x}_i) - P_n(C_+|\mathbf{x}_i)| \geq \epsilon) \\ \leq \lim_{n \rightarrow \infty} 2e^{-2(\epsilon-KR)^2 T_{R,\mathbf{x}_i}(n)} = 0 \end{aligned}$$

□

なお、一般的に不確実性サンプリングは、定理 1 が成り立たない。

次に UCB1 サンプリングの期待値に関する振る舞いについて解析する。特徴ベクトル \mathbf{x}_i の半径 R 以内の特徴ベクトル集合を $\psi_R(\mathbf{x}_i)$ とする。すなわち

$$\psi_R(\mathbf{x}_i) \equiv \{\mathbf{x}_j \in X : \|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\| \leq R\}$$

とする。 $t = T_{R,\mathbf{x}_i}(n)$ に対して、

$$\mu_{R,t}(\mathbf{x}_i) \equiv P_n(C_+|\mathbf{x}_i)$$

とする。また、

$$\begin{aligned} \mu_*(\mathbf{x}_i) &\equiv P_*(C_+|\mathbf{x}_i) \\ U_t(\mathbf{x}_i) &\equiv \text{Util}(\mu_{R,t}(\mathbf{x}_i)) \\ U_*(\mathbf{x}_i) &\equiv \text{Util}(\mu_*(\mathbf{x}_i)) \\ \mathcal{T}_R(t) &\equiv \sum_{\mathbf{x}_j \in X} T_{R,\mathbf{x}_j}(t) \\ c(t, s) &\equiv \sqrt{(2 \ln t)/s} \end{aligned}$$

とする。このように定義すると式 (4) で表す UCB 値は

$$U_{T_{R,\mathbf{x}_i}(n-1)}(\mathbf{x}_i) + c(T_{R,\mathbf{x}_i}(n-1), T_{R,\mathbf{x}_i}(n-1))$$

と書ける。また、命題 P に対して

$$\langle P \rangle \equiv \begin{cases} 1 & \text{if } P \text{ が真} \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases}$$

とする。

$$U_*(\mathbf{x}^*) = \max_{\mathbf{x}_i \in X} U_*(\mathbf{x}_i)$$

が成り立つ特徴ベクトルを \mathbf{x}^* とする。

補題 4. UCB1 サンプリングを使用して質問をするとき、任意の自然数 $n \geq 1$ と $l \geq 1$ に対して次式が成り立つ。

$$\begin{aligned} T_{R/2,\mathbf{x}_i}(n) \\ \leq l + \sum_{t=1}^{\infty} \sum_{s=1}^t \sum_{s_j=l}^t \sum_{\mathbf{x}_j \in \psi_{R/2}(\mathbf{x}_i)} \left\langle \begin{array}{l} U_s(\mathbf{x}^*) + c(\mathcal{T}_R(t), s) \\ \leq U_{s_j}(\mathbf{x}_j) + c(\mathcal{T}_R(t), s_j) \end{array} \right\rangle \end{aligned}$$

証明. ステップ t で質問した特徴ベクトルを χ_t とする。任意の特徴ベクトル $\mathbf{x}_i \in X$ の半径 R 以内の質問回数が 1 以上になるまでにかかるステップを κ とする。また

$$W_{\mathbf{x}_i}(t) \equiv \min_{\mathbf{x}_j \in \psi_{R/2}(\mathbf{x}_i)} T_{R,\mathbf{x}_j}(t)$$

とする。このとき、 $T_{R/2,\mathbf{x}_i}(n)$ の上界が次のように求められる。

$$\begin{aligned} T_{R/2,\mathbf{x}_i}(n) &= \sum_{t=1}^n \langle \chi_t \in \psi_{R/2}(\mathbf{x}_i) \rangle \\ &= \sum_{t=1}^n \langle \chi_t \in \psi_{R/2}(\mathbf{x}_i), W_{\mathbf{x}_i}(t-1) < l \rangle \\ &\quad + \sum_{t=1}^n \langle \chi_t \in \psi_{R/2}(\mathbf{x}_i), W_{\mathbf{x}_i}(t-1) \geq l \rangle \\ &= \sum_{t=1}^n \langle \chi_t \in \psi_{R/2}(\mathbf{x}_i), W_{\mathbf{x}_i}(t-1) < l \rangle \\ &\quad + \sum_{t=1}^{\kappa} \langle \chi_t \in \psi_{R/2}(\mathbf{x}_i), W_{\mathbf{x}_i}(t-1) \geq l \rangle \\ &\quad + \sum_{t=\kappa+1}^n \langle \chi_t \in \psi_{R/2}(\mathbf{x}_i), W_{\mathbf{x}_i}(t-1) \geq l \rangle \\ &= \sum_{t=1}^n \langle \chi_t \in \psi_{R/2}(\mathbf{x}_i), W_{\mathbf{x}_i}(t-1) < l \rangle \\ &\quad + \sum_{t=\kappa+1}^n \langle \chi_t \in \psi_{R/2}(\mathbf{x}_i), W_{\mathbf{x}_i}(t-1) \geq l \rangle \quad (8) \\ &\leq l + \sum_{t=1}^{\infty} \sum_{s=1}^{t-1} \sum_{s_j=l}^{t-1} \sum_{\mathbf{x}_j \in \psi_{R/2}(\mathbf{x}_i)} \left\langle \begin{array}{l} U_s(\mathbf{x}^*) + c(\mathcal{T}_R(t), s) \\ \leq U_{s_j}(\mathbf{x}_j) + c(\mathcal{T}_R(t), s_j) \end{array} \right\rangle \quad (9) \end{aligned}$$

ここで等式 (8) は、次に示す

$$\sum_{t=1}^{\kappa} \langle \chi_t \in \psi_{R/2}(\mathbf{x}_i), W_{\mathbf{x}_i}(t-1) \geq l \rangle = 0 \quad (10)$$

より導かれる。 $W_{\mathbf{x}_i}(t-1) \geq l$ が成り立つとき、 $l \geq 1$ より任意の $\mathbf{x}_j \in \psi_{R/2}(\mathbf{x}_i)$ は $T_{R,\mathbf{x}_j}(t-1) \geq 1$ を満たす。ま

た, $\chi_t \in \psi_{R/2}(\mathbf{x}_i)$ が成り立つとき, ステップ t が κ 以下であるときの UCB1 サンプルングの振る舞いの定義から, χ_t は $T_{R, \chi_t}(t-1) = 0$ を満たす. よって, $1 \leq t \leq \kappa$ のとき, $W_{\mathbf{x}_i}(t-1) \geq l$ と $\chi_t \in \psi_{R/2}(\mathbf{x}_i)$ が同時に成り立つことはないので式 (10) が成り立つ.

一方, 不等式 (9) は, 以下に示す

$$\begin{aligned} & \sum_{t=1}^n \langle \chi_t \in \psi_{R/2}(\mathbf{x}_i), W_{\mathbf{x}_i}(t-1) < l \rangle \leq l \quad (11) \\ & \sum_{t=\kappa+1}^n \langle \chi_t \in \psi_{R/2}(\mathbf{x}_i), W_{\mathbf{x}_i}(t-1) \geq l \rangle \\ & \leq \sum_{t=1}^{\infty} \sum_{s=1}^{t-1} \sum_{s_j=l}^{t-1} \sum_{\mathbf{x}_j \in \psi_{R/2}(\mathbf{x}_i)} \left\langle \begin{array}{l} U_s(\mathbf{x}^*) + c(\mathcal{T}_R(t), s) \\ \leq U_{s_j}(\mathbf{x}_j) + c(\mathcal{T}_R(t), s_j) \end{array} \right\rangle \quad (12) \end{aligned}$$

より導かれる.

まず, 不等式 (11) を示す. ステップ t において, $\chi_t \in \psi_{R/2}(\mathbf{x}_i)$ が成り立つとき, $W_{\mathbf{x}_i}(t) = W_{\mathbf{x}_i}(t-1) + 1$ となる. よって, $1 \leq t \leq n$ において, $\chi_t \in \psi_{R/2}(\mathbf{x}_i)$ かつ $W_{\mathbf{x}_i}(t-1) < l$ は高々 l 回しか成り立たない.

次に, 不等式 (12) を示す. 式変形を簡略化するため,

$$u(a, b, \mathbf{x}_i) \equiv U_a(\mathbf{x}_i) + c(b, a)$$

と表す. $W_{\mathbf{x}_i}(t-1) \geq l$ のとき, 任意の $\mathbf{x}_j \in \psi_{R/2}(\mathbf{x}_i)$ について, $l \leq T_{R, \mathbf{x}_j}(t-1) \leq t-1$ が成り立つことなどから, 次のように求められる.

$$\begin{aligned} & \sum_{t=\kappa+1}^n \langle \chi_t \in \psi_{R/2}(\mathbf{x}_i), W_{\mathbf{x}_i}(t-1) \geq l \rangle \\ & \leq \sum_{t=\kappa+1}^n \left\langle \begin{array}{l} u(T_{R, \mathbf{x}^*}(t-1), \mathcal{T}_R(t-1), \mathbf{x}^*) \\ \leq \max_{\mathbf{x}_j \in \psi_{R/2}(\mathbf{x}_i)} u(T_{R, \mathbf{x}_j}(t-1), \mathcal{T}_R(t-1), \mathbf{x}_j), \\ W_{\mathbf{x}_i}(t-1) \geq l \end{array} \right\rangle \\ & \leq \sum_{t=\kappa+1}^n \left\langle \begin{array}{l} \min_{1 \leq s \leq t-1} u(s, \mathcal{T}_R(t-1), \mathbf{x}^*) \\ \leq \max_{l \leq s_j \leq t-1} \left(\max_{\mathbf{x}_j \in \psi_{R/2}(\mathbf{x}_i)} u(s_j, \mathcal{T}_R(t-1), \mathbf{x}_j) \right) \end{array} \right\rangle \\ & \leq \sum_{t=1}^{\infty} \sum_{s=1}^t \sum_{s_j=l}^t \sum_{\mathbf{x}_j \in \psi_{R/2}(\mathbf{x}_i)} \left\langle \begin{array}{l} u(s, \mathcal{T}_R(t), \mathbf{x}^*) \\ \leq u(s_j, \mathcal{T}_R(t), \mathbf{x}_j) \end{array} \right\rangle \\ & = \sum_{t=1}^{\infty} \sum_{s=1}^t \sum_{s_j=l}^t \sum_{\mathbf{x}_j \in \psi_{R/2}(\mathbf{x}_i)} \left\langle \begin{array}{l} U_s(\mathbf{x}^*) + c(\mathcal{T}_R(t), s) \\ \leq U_{s_j}(\mathbf{x}_j) + c(\mathcal{T}_R(t), s_j) \end{array} \right\rangle \quad \square \end{aligned}$$

補題 5. UCB1 サンプルングを使用して質問をするとき, 任意の自然数 $s \geq 1$ と $t \geq 1$ に対して次式が成り立つ.

$$\Pr \left(U_s(\mathbf{x}^*) \leq U_*(\mathbf{x}^*) - (c(\mathcal{T}_R(t), s) + \frac{3}{2}KR) \right) \leq 2\mathcal{T}_R(t)^{-4}$$

証明. Util 関数が任意の $0 \leq a \leq 1$ と $0 \leq b \leq 1$ に対して

$$|\text{Util}(a) - \text{Util}(b)| \leq |a - b| \quad (13)$$

を満たすリプシッツ連続な関数であることと補題 3 を用いて次

のように求められる.

$$\begin{aligned} & \Pr \left(U_s(\mathbf{x}^*) \leq U_*(\mathbf{x}^*) - \left(c(\mathcal{T}_R(t), s) + \frac{3}{2}KR \right) \right) \\ & \leq \Pr \left(|U_s(\mathbf{x}^*) - U_*(\mathbf{x}^*)| \geq c(\mathcal{T}_R(t), s) + \frac{3}{2}KR \right) \\ & \leq \Pr (|U_s(\mathbf{x}^*) - U_*(\mathbf{x}^*)| \geq c(\mathcal{T}_R(t), s) + KR) \\ & \leq \Pr (|\mu_{R, s}(\mathbf{x}^*) - \mu_*(\mathbf{x}^*)| \geq c(\mathcal{T}_R(t), s) + KR) \\ & \leq 2e^{-2s((c(\mathcal{T}_R(t), s) + KR) - KR)^2} \\ & = 2\mathcal{T}_R(t)^{-4} \quad \square \end{aligned}$$

補題 6. UCB1 サンプルングを使用して質問をするとき, 任意の自然数 $s_j \geq 1$ と $t \geq 1$, 距離が $R/2$ 以下の任意の特徴ベクトル $\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j \in X$ に対して次式が成り立つ.

$$\Pr \left(U_{s_j}(\mathbf{x}_j) \geq U_*(\mathbf{x}_i) + c(\mathcal{T}_R(t), s_j) + \frac{3}{2}KR \right) \leq 2\mathcal{T}_R(t)^{-4}$$

証明. 補題 6 の証明と同様にして次のように求められる.

$$\begin{aligned} & \Pr \left(U_{s_j}(\mathbf{x}_j) \geq U_*(\mathbf{x}_i) + c(\mathcal{T}_R(t), s_j) + \frac{3}{2}KR \right) \\ & \leq \Pr \left(|U_{s_j}(\mathbf{x}_j) - U_*(\mathbf{x}_i)| \geq c(\mathcal{T}_R(t), s_j) + \frac{3}{2}KR \right) \\ & \leq \Pr \left(|\mu_{R, s_j}(\mathbf{x}_j) - \mu_*(\mathbf{x}_i)| \geq c(\mathcal{T}_R(t), s_j) + \frac{3}{2}KR \right) \\ & \leq 2e^{-2s_j((c(\mathcal{T}_R(t), s_j) + \frac{3}{2}KR) - \frac{3}{2}KR)^2} \\ & = 2\mathcal{T}_R(t)^{-4} \quad \square \end{aligned}$$

補題 7. UCB1 サンプルングを使用して質問をするとき

$$\text{Util}(P_*(C_+|\mathbf{x}_i)) < \max_{\mathbf{x}_j \in X} \text{Util}(P_*(C_+|\mathbf{x}_j)) - 3KR$$

を満たす任意の特徴ベクトル $\mathbf{x}_i \in X$, 任意の自然数 $n \geq 1$ と $1 \leq t \leq n$ と

$$s_j \geq \left\lceil \frac{8 \ln \mathcal{T}_R(n)}{(U_*(\mathbf{x}^*) - U_*(\mathbf{x}_i) - 3KR)^2} \right\rceil$$

に対して次式が成り立つ.

$$U_*(\mathbf{x}^*) \geq U_*(\mathbf{x}_i) + 2(c(\mathcal{T}_R(t), s_j) + \frac{3}{2}KR)$$

証明. 次のように求められる.

$$\begin{aligned} & U_*(\mathbf{x}^*) - U_*(\mathbf{x}_i) - 2 \left(c(\mathcal{T}_R(t), s_j) + \frac{3}{2}KR \right) \\ & = U_*(\mathbf{x}^*) - U_*(\mathbf{x}_i) - 2 \left(\sqrt{2 \ln \mathcal{T}_R(t)/s_j} + \frac{3}{2}KR \right) \\ & \geq U_*(\mathbf{x}^*) - U_*(\mathbf{x}_i) \\ & \quad - 2 \left(\sqrt{\frac{2 \ln \mathcal{T}_R(n)}{\left(\frac{8 \ln \mathcal{T}_R(n)}{(U_*(\mathbf{x}^*) - U_*(\mathbf{x}_i) - 3KR)^2} \right)}} + \frac{3}{2}KR \right) \\ & = 0 \quad \square \end{aligned}$$

定理 2. UCB1 サンプリングを使用して質問をするとき

$$\text{Util}(P_*(C_+|\mathbf{x}_i)) < \max_{\mathbf{x}_i \in X} \text{Util}(P_*(C_+|\mathbf{x}_i)) - 3KR$$

を満たす特徴ベクトル \mathbf{x}_i の、半径 $R/2$ 以内の質問回数の期待値 $E[G_{\mathbf{x}_i}(n)]$ の上界は $O(\log n)$ である。

証明. Auer ら [1] による, UCB1 で多腕バンディット問題を解くときの損失の期待値の上界が $O(\log n)$ であることの証明を応用してこの定理を証明する。

補題 4 より, 任意のステップ $n \geq 1$, 任意の自然数 $l \geq 1$ について

$$T_{R/2, \mathbf{x}_i}(n) \leq l + \sum_{t=1}^{\infty} \sum_{s=1}^t \sum_{s_j=l}^t \sum_{\mathbf{x}_j \in \psi_{R/2}(\mathbf{x}_i)} \left\langle \begin{array}{l} U_s(\mathbf{x}^*) + c(\tau_R(t), s) \\ \leq U_{s_j}(\mathbf{x}_j) + c(\tau_R(t), s_j) \end{array} \right\rangle$$

が成り立つ。ここで

$$U_s(\mathbf{x}^*) + c(\tau_R(t), s) \leq U_{s_j}(\mathbf{x}_j) + c(\tau_R(t), s_j)$$

が成り立つとき, 式 (14)(15)(16) のうち少なくともひとつが成り立つ。

$$U_s(\mathbf{x}^*) \leq U_*(\mathbf{x}^*) - (c(\tau_R(t), s) + \frac{3}{2}KR) \quad (14)$$

$$U_{s_j}(\mathbf{x}_j) \geq U_*(\mathbf{x}_i) + c(\tau_R(t), s_j) + \frac{3}{2}KR \quad (15)$$

$$U_*(\mathbf{x}^*) < U_*(\mathbf{x}_i) + 2(c(\tau_R(t), s_j) + \frac{3}{2}KR) \quad (16)$$

補題 5 より式 (14) の成り立つ確率の上界は $2\mathcal{T}_R(t)^{-4}$ 。

補題 6 より式 (15) の成り立つ確率の上界は $2\mathcal{T}_R(t)^{-4}$ 。

補題 7 より式 (16) は

$$l = \left\lceil \frac{8 \ln \mathcal{T}_R(n)}{(U_*(\mathbf{x}^*) - U_*(\mathbf{x}_i) - 3KR)^2} \right\rceil$$

のとき成り立たない。

また, $\mathcal{T}_R(t)$ について, 特徴ベクトルを中心とした, 半径 R 以内の特徴ベクトルの個数の最大を τ_{\max} , 最小を τ_{\min} とすると

$$\tau_{\min} t \leq \mathcal{T}_R(t) \leq \tau_{\max} t.$$

以上をまとめると, 次のように $T_{R/2, \mathbf{x}_i}(n)$ の期待値の上界を求められる。

$$\begin{aligned} E[T_{R/2, \mathbf{x}_i}(n)] &\leq \left\lceil \frac{8 \ln \mathcal{T}_R(n)}{(U_*(\mathbf{x}^*) - U_*(\mathbf{x}_i) - 3KR)^2} \right\rceil \\ &+ \sum_{t=1}^{\infty} \sum_{s=1}^t \sum_{s_j=1}^t \sum_{\mathbf{x}_j \in \psi_{R/2}(\mathbf{x}_i)} \left(\begin{array}{l} \Pr(U_s(\mathbf{x}^*) \leq U_*(\mathbf{x}^*) - (c(\tau_R(t), s) + \frac{3}{2}KR)) \\ + \Pr(U_{s_j}(\mathbf{x}_j) \geq U_*(\mathbf{x}_i) + c(\tau_R(t), s_j) + \frac{3}{2}KR) \end{array} \right) \\ &\leq \left\lceil \frac{8 \ln(\tau_{\max} n)}{(U_*(\mathbf{x}^*) - U_*(\mathbf{x}_i) - 3KR)^2} \right\rceil \\ &+ \sum_{t=1}^{\infty} \sum_{s=1}^t \sum_{s_j=1}^t \tau_{\max} \{4(\tau_{\min} t)^{-4}\} \\ &\leq \frac{8 \ln(\tau_{\max} n)}{(U_*(\mathbf{x}^*) - U_*(\mathbf{x}_i) - 3KR)^2} + 1 + \frac{2\pi^2 \tau_{\max}}{3\tau_{\min}^4} \\ &\leq O(\log n) \end{aligned}$$

□

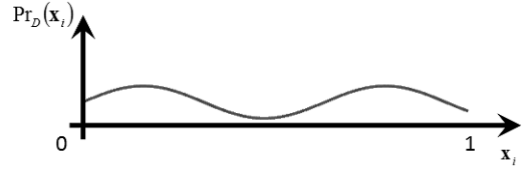


図2 $\text{Pr}_D(\mathbf{x}_i)$

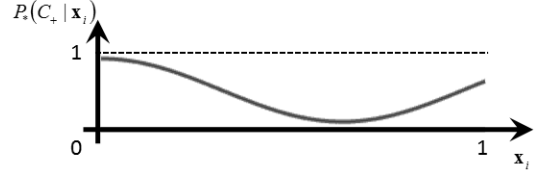


図3 単純なモデル

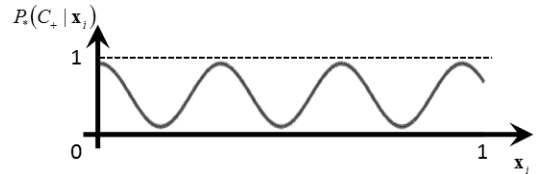


図4 複雑なモデル

定理 2 の証明の最後に現れる

$$\begin{aligned} E[T_{R/2, \mathbf{x}_i}(n)] &\leq \frac{8 \ln(\tau_{\max} n)}{(U_*(\mathbf{x}^*) - U_*(\mathbf{x}_i) - 3KR)^2} + 1 + \frac{2\pi^2 \tau_{\max}}{3\tau_{\min}^4} \end{aligned}$$

より, 特徴ベクトル $\mathbf{x}_i \in X$ が十分に存在して, τ_{\max} と τ_{\min} の差が十分小さいなら, 一度もラベルを質問していない特徴ベクトルがあっても, $P_*(C_+|\mathbf{x}_i)$ が 0.5 に近い特徴ベクトルを重点的に質問できることが保証される。

4 実験

特徴ベクトルの次元数を 1 とし, $\text{Pr}_D(\mathbf{x}_i)$ と $P_*(C_+|\mathbf{x}_i)$ に三角関数を用いて, 質問方策と, 質問回数と $P_n(C_+|\mathbf{x}_i)$ の誤差の推移の関係を求める実験を行った。実験した質問方策は, ランダムサンプリング, 不確実性サンプリング, UCB1 サンプリングである。不確実性サンプリングは, 質問回数が 10 以下のとき, ランダムに特徴ベクトルを質問し, それ以降は式 (1) で表される特徴ベクトルを貪欲に質問するとした。特徴ベクトルを $[0, 1]$ 上に等間隔に 1000 個並べたものを特徴ベクトル集合 \mathcal{X} とした。 $\text{Pr}_D(\mathbf{x}_i)$ は図 2 に表す関数を使用し, $P_*(C_+|\mathbf{x}_i)$ は, 図 3, 4 に表す, 単純なモデルと複雑なモデルを使用した。各ステップで特徴ベクトル集合 \mathcal{X} から Pr_D に基づいて選ぶ特徴ベクトル X の大きさ N を 100 とした。能動学習時に使用した分類器は式 (2) で表される。式中の $v(r)$ について, 式 (6) で表される $v_{\text{RECT}}(r)$ と式 (3) で表される $v_{\text{GAUSS}}(r)$ の場合を実験した。また, $v(r) = v_{\text{RECT}}(r)$ のときは, $\alpha = 1$, $v(r) = v_{\text{GAUSS}}(r)$ のときは, $\alpha = 0.1, 1$ について実験した。 $v_{\text{RECT}}(r)$ のパラメータ R は 0.08 とし, $v_{\text{GAUSS}}(r)$ のパラメータ σ は 0.04 とした。 $P_n(C_+|\mathbf{x}_i)$ の誤差を次式で定義する。

$$\sum_{\mathbf{x}_i \in \mathcal{X}} \text{Pr}_D(\mathbf{x}_i) \text{EXOR}(P_*(C_+|\mathbf{x}_i) > 0.5, P_n(C_+|\mathbf{x}_i) > 0.5)$$

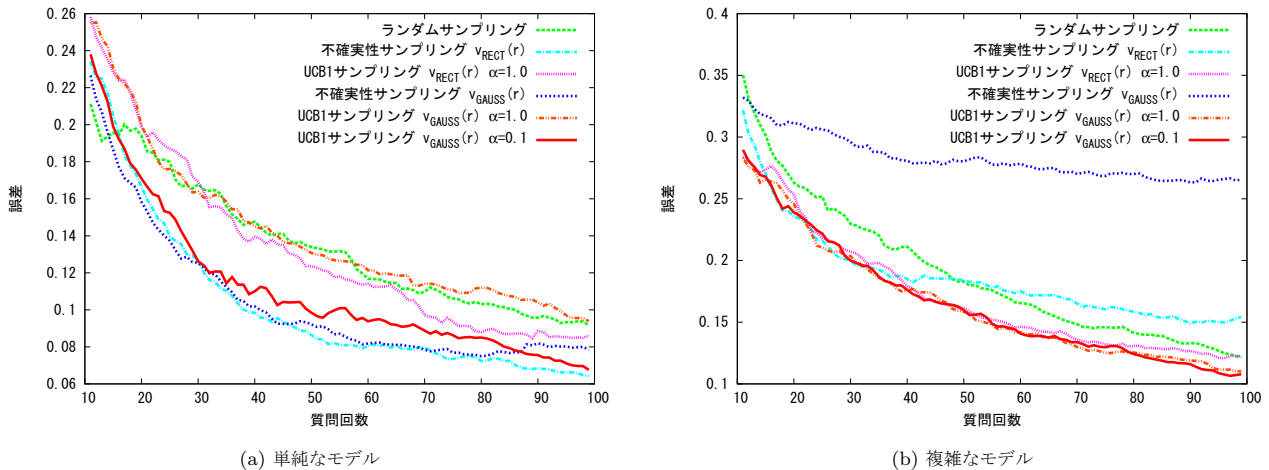


図1 質問回数と誤差の関係

ここに, EXOR は

$$\text{EXOR}(A, B) \equiv \begin{cases} 1 & \text{if } A \neq B \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases}$$

である. 誤差の評価時に使用した分類器は式(2)で表され, 式中の $v(r)$ は式(3)で表される $v_{\text{GAUSS}}(r)$ とした. 100回繰り返し試してその平均を求めた.

実験の結果得られた, 質問回数と $P_n(C_+|\mathbf{x}_i)$ の誤差の関係を図1(a), 1(b)に示した. 少ない質問回数で, 誤差が小さいとき, 優れた質問方策であると言える. 単純なモデルでは, 不確実性サンプリングが最も優れていた. UCB1 サンプリングは $\alpha = 1$ のとき, ランダムサンプリングと同等の性能に留まっていた. $\alpha = 1$ は実際上, 慎重すぎる. $\alpha = 0.1$ としたとき不確実性サンプリングと同等の性能を示した. また, 複雑なモデルのとき, UCB1 サンプリングが最も優れていた. 不確実性サンプリングは質問回数を増やしても, 誤差があまり減少しない傾向があった. 単純なモデル, 複雑なモデル双方で, $\alpha = 0.1$ の UCB1 サンプリングが優れた性能を示した.

5 まとめと今後の課題

本稿では, UCB1 サンプリングを提案した. そして, ある条件の下, UCB1 サンプリングを続ければ, 特徴ベクトル \mathbf{x}_i が C_+ である真の確率 $P_*(C_+|\mathbf{x}_i)$ とその推定値 $P_n(C_+|\mathbf{x}_i)$ の誤差は十分小さくなり, $P_*(C_+|\mathbf{x}_i)$ が 0.5 から遠い特徴ベクトルの質問回数の期待値の上界は $O(\log n)$ となることを示した. 計算機実験では, 不確実性サンプリングで分類器を効率的に学習できるモデルでは, 証明で使用した条件は厳しすぎるという知見を得て, 条件を緩めることで, 優れた性能を達成することができた. また, 不確実性サンプリングが苦手とするモデルでも, UCB1 サンプリングは, 効率的に分類器を学習させることができることが確認された.

また, 本稿では $\text{Util}(\mathbf{x}_i) \equiv x(1-x)$ と定義したが, 定理1と定理2は, 式(13)を満たす任意の関数について成り立つ. ただしこの場合は $\text{Util}(P_*(C_+|\mathbf{x}_i))$ が大きい特徴ベクトル \mathbf{x}_i を多く質問することになる. $P_*(C_+|\mathbf{x}_i)$ が 0.5 に近い特徴ベクトル \mathbf{x}_i を多く質問することが, 常に効率的な分類器の学習につながることは単純に言えないので, 本稿で定義した Util 関数に

外についても UCB1 サンプリングの振る舞いを検証することを他の今後の課題とする.

参考文献

- [1] P. Auer, N. Cesa-Bianchi, and P. Fischer. Finite-time analysis of the multiarmed bandit problem. *Machine learning*, 47(2):235–256, 2002.
- [2] W. Hoeffding. Probability inequalities for sums of bounded random variables. *Journal of the American Statistical Association*, 58(301):13–30, 1963.
- [3] D. D. Lewis and W. A. Gale. A sequential algorithm for training text classifiers. In *Proceedings of the 17th annual international ACM SIGIR conference on Research and development in information retrieval*, pp. 3–12, 1994.
- [4] E. A. Nadaraya. On estimating regression. *Theory of Probability and its Applications*, 9(1):141–142, 1964.
- [5] H. Robbins. Some aspects of the sequential design of experiments. *Bulletin of the American Mathematical Society*, 58(5):527–535, 1952.
- [6] B. Settles. Active learning literature survey. Computer Sciences Technical Report 1648, University of Wisconsin–Madison, 2009.
- [7] G. S. Watson. Smooth regression analysis. *Sankhy: The Indian Journal of Statistics, Series A*, 26(4):359–372, 1964.