

Ein holistischer, entscheidungstheoretischer Ansatz für Pool-basiertes Aktives Lernen¹

Daniel Kottke²

Abstract: Effizientes Labeling von Daten ist ein wichtiges Forschungsthema im maschinellen Lernen, da Klassifikatoren eine repräsentative Menge von gelabelten Daten benötigen um eine hohe Qualität zu erreichen. Während ungelabelte Daten leicht gesammelt werden können, ist das Labeln mühsam, zeitaufwendig oder teuer. Im sogenannten Aktiven Lernen werden Methoden entwickelt um den Aufwand des Annotationsprozesses auf ein Minimum zu reduzieren, indem nur der Teil an Daten ausgewählt wird, der den Lernfortschritt des Klassifikators vorantreibt. Diese Dissertation [Ko21a] stellt Probabilistisches Aktives Lernen vor, einen holistischen, entscheidungstheoretischen Ansatz für Pool-basiertes Lernen, das die Optimierung für jedes Gütemaß und jeden Klassifikator ermöglicht. Die ganzheitliche mathematische Beschreibung ermöglicht es, theoretische Vergleiche zu existierenden Verfahren herzustellen. Die vorgestellte Methode wird auf 22 Datensätzen für sechs verschiedene Gütemaße, sowie mehreren Klassifikatoren und die Batch-Auswahl evaluiert.

1 Einführung

Jüngste Fortschritte beim maschinellen Lernen zeigen, dass Computer in der Lage sind, komplexe Probleme zu lösen, manchmal sogar besser als Menschen. Zum Beispiel rekonstruieren Deep-Learning-Algorithmen die jeweilige Umgebung so, dass ein Auto selbstständig fahren kann [Ha20]. Auch können Methoden des maschinellen Lernens Ärzten dabei helfen, Krebs in medizinischen Bildern zu erkennen [BBS19].

Diese Methoden „erlernen“ ihre Modelle aus Beispielen. In dieser Arbeit konzentrieren wir uns auf Klassifizierungsprobleme, d. h. ein Klassifikator zielt darauf ab, Abhängigkeiten zwischen Instanzen (z. B. Bilder, numerische Merkmale von Objekten, Texte) und Klassen (z. B. gutartig vs. bösartig) zu finden. Mathematisch ausgedrückt ist ein Klassifikator $f: \mathbb{R}^D \rightarrow \mathcal{Y}$ eine Funktion, die eine Instanz, die durch ihren Merkmalsvektor $x \in \mathbb{R}^D$ dargestellt wird, einer Klasse $y \in \mathcal{Y} = \{1, \dots, C\}$ zuordnet, wobei D die Anzahl der Merkmale ist. Um einen guten Klassifikator zu finden, benötigen wir Trainingsdaten, die aus einer Menge von Instanz-Label-Paaren (x, y) mit $x \in \mathbb{R}^D$, $y \in \mathcal{Y}$ bestehen. Während Instanzen oft kostengünstig zur Verfügung stehen, müssen die zugehörigen Labels aufwändig beschafft werden. Zum Beispiel müssen medizinische Bilder von Fachleuten annotiert werden, die ein hohes Gehalt beziehen. Um Kosten zu sparen (z. B. Gehalt, Rechenaufwand, Gebühren oder Zeit für die Durchführung eines Experiments), zielt der Forschungsbereich des aktiven Lernens darauf ab, die Anzahl der notwendigen Labels zu reduzieren, indem nur diejenigen beschafft werden, die den Klassifikator verbessern.

¹ Englischer Titel der Dissertation: „A Holistic, Decision-Theoretic Framework for Pool-Based Active Learning“

² Intelligente Eingebettete Systeme, Universität Kassel, daniel.kottke@uni-kassel.de

Da effizientes Labeling zu einer zentralen Herausforderung in vielen Anwendungen geworden ist, hat sich das Gebiet des aktiven Lernens von theoretisch motivierten Konzepten hin zu mehr informationstheoretischen Ansätzen und Heuristiken entwickelt. Folglich ist das Problem oft durch den Anwendungsbereich und nicht durch eine mathematische Optimierungsfunktion gegeben. Daher funktionieren die vorgestellten Strategien in ihrem sehr eingeschränkten Kontext, aber es ist oft schwierig, diese Erkenntnisse zu nutzen, um zu erklären, wie das aktive Lernproblem gut gelöst werden kann. Oft ist es sogar unmöglich, einen experimentellen Vergleich durchzuführen, weil die getroffenen Annahmen zu einschränkend sind.

In der Dissertation werden zwei Szenarien des aktiven Lernens unterschieden:

1. Man arbeitet an der Entwicklung autonom fahrender Autos und möchte Menschen während der Fahrt aus Kamerabildern erkennen (*induktiv*).
2. Nachdem eine Naturkatastrophe einige Gebäude zerstört hat, sucht man nach Überlebenden. Daher wird anhand von Satellitenbildern klassifiziert, ob es Regionen mit eingestürzten Gebäuden gibt (*transduktiv*).

Im ersten Beispiel benötigen wir einen Klassifikator, der in der Lage ist, Menschen zu erkennen, auch wenn das Auto in Situationen unterwegs ist, in denen es bisher noch keine Daten gesammelt hat. In diesem induktiven Szenario sind die exakten Daten während der Entwicklung des Klassifikators nicht bekannt. Das zweite Beispiel beschreibt ein transduktives Szenario: Es müssen alle Bilder korrekt klassifiziert werden, da jedes Bild zerstörte Gebäude mit verletzten Personen enthalten könnte, die möglicherweise Hilfe benötigen. Obwohl wir in diesem Szenario alle Bilder im Voraus kennen, dauert das manuelle Labeln der Bilder zu lange, da Zeit ein kritischer Faktor ist. Daher müssen wir einen Klassifikator trainieren, der speziell auf die Daten zugeschnitten ist. Im Idealfall können alle „einfachen“ Fälle automatisch vom Klassifikator gelabelt werden und der Mensch kann sich auf die schwierigen Fälle konzentrieren. Auf diese Weise erhalten wir eine gute Erkennungsqualität bei geringerem Zeitaufwand, was die Rettungsaktion beschleunigt. In dieser Arbeit werden beide Szenarien behandelt und Lösungen vorgestellt.

Die zentrale Forschungsfrage der Arbeit lautet folgendermaßen: **Wie kann man einen ganzheitlichen, entscheidungstheoretischen Ansatz für aktives Lernen definieren, der eine Optimierung für jedes Gütemaß und jeden Klassifikator sowohl für induktives als auch transduktives aktives Lernen ermöglicht?**

Diese Frage wird mit einem neuen Ansatz angegangen, der als *Probabilistic Active Learning* bezeichnet wird. Zunächst werden alle möglichen Ergebnisse für jeden Kandidaten (oder jede Kandidatenmenge) simuliert und diese neuen Mengen zusammen mit den gelabelten Daten verwendet, um die erwarteten Klassenwahrscheinlichkeiten für jede beliebige Instanz mithilfe eines Bayes'schen Schätzers zu ermitteln. Ausgehend von den Vorhersagen eines Klassifikators für eine beliebige (ungelabelte) Evaluationsmenge können wir die Güte für jedes Gütemaß anhand dieser erwarteten Klassenwahrscheinlichkeiten schätzen. Anschließend wird der probabilistische Nutzen als Güteunterschied zwischen dem alten Klassifikator und dem zusätzlich auf die neuen simulierten Daten angepassten Klassifikator berechnet. Der probabilistische Nutzen dient als Wert für den Nutzen der

Auswahlstrategie. Schließlich werden die Kandidaten mit dem maximalen Nutzen für die Label-Akquisition ausgewählt.

Folgende Beiträge leitet die Dissertation [Ko21a]:

- Es wird ein ganzheitlicher, entscheidungstheoretischer Ansatz für pool-basiertes aktives Lernen vorgeschlagen, der die Auswahl für beliebige Klassifikatoren und Gütemaße sowohl im transduktiven als auch induktiven aktiven Lernszenario optimieren kann.
- Die Definition einer optimalen Selektionsstrategie, die die wahren (normalerweise unbekannt) Labels als Basisstrategie verwendet, wird in den vorliegenden Experimenten als überlegen nachgewiesen.
- Es wird gezeigt, dass das vorgeschlagene holistische Modell mehrere bestehende Strategien integriert, wenn bestimmte Annahmen hinzugefügt werden. In den Experimenten zeigt sich, dass diese zusätzlichen Annahmen die Güte der holistischen Strategie beeinträchtigen.
- Es wird eine Bewertungsmethode für transduktives aktives Lernen eingeführt, die den Kompromiss zwischen Annotations- und Fehlklassifizierungskosten visualisiert.
- Die Überlegenheit dieses Ansatzes wird für verschiedene Klassifikatoren und Gütemaße für induktives und transduktives aktives Lernen demonstriert und Experimente im Batch-basierten Szenario gezeigt.

Diese Zusammenfassung ist in drei Teile gegliedert. Zuerst wird die grundlegende Idee des Probabilistischen Aktiven Lernens präsentiert und Bezüge zur Dissertation hergestellt. Danach werden auszugsweise zentrale Ergebnisse präsentiert und diskutiert und abschließend wird ein Ausblick auf zukünftige Arbeiten gegeben.

2 Probabilistisches Aktives Lernen

Die Kernidee des Probabilistischen Aktiven Lernens besteht darin, den Güteunterschied zwischen zwei Klassifikatoren abzuschätzen: dem aktuellen Klassifikator $f^{\mathcal{L}}$, der auf die aktuell gelabelte Menge \mathcal{L} trainiert wird, und einem Klassifikator $f^{\mathcal{L}^+}$, der auf einer oder mehreren zusätzlich gelabelten Instanzen angepasst wird. Vereinfachend wird in diesem Abschnitt eine konstante Batch-Größe von $b \in \mathbb{N}$ angenommen. Bezeichnen wir mit $\mathcal{L}^+ = \mathcal{L} \cup (\tilde{\mathbf{X}} \otimes \tilde{\mathbf{y}})$ die *neue* gelabelte Menge mit $\tilde{\mathbf{X}} = \langle \tilde{\mathbf{x}}_1, \dots, \tilde{\mathbf{x}}_b \rangle \in \mathcal{U}^b$ eine geordnete (Multi-)Menge von b nicht gelabelten Instanzen aus dem Kandidatenpool \mathcal{U} und arbiträr zugewiesenen Labels $\tilde{\mathbf{y}} = \langle \tilde{y}_1, \dots, \tilde{y}_b \rangle \in \mathcal{Y}^b$, die unbekannt sind, bis sie akquiriert wurden. Wir betrachten beide Mengen als geordnet, weil die erste Instanz zum ersten Label gehört, usw. Der \otimes -Operator bildet paarweise Tupel aus zwei gleich großen geordneten Mengen:

$$\tilde{\mathbf{X}} \otimes \tilde{\mathbf{y}} := \langle (\tilde{\mathbf{x}}_1, \tilde{y}_1), \dots, (\tilde{\mathbf{x}}_b, \tilde{y}_b) \rangle \quad (1)$$

mit $\tilde{\mathbf{X}} = \langle \tilde{\mathbf{x}}_1, \dots, \tilde{\mathbf{x}}_b \rangle$ und $\tilde{\mathbf{y}} = \langle \tilde{y}_1, \dots, \tilde{y}_b \rangle$.

Um die Güte eines Klassifikators f zu schätzen, führen wir die empirische Güte $\text{perf}_{\mathcal{E},p}(f)$ ein, die auf einer ungelabelten Evaluationsmenge \mathcal{E} ermittelt wurde. Hierbei ist p eine

Abkürzung für die wahre, unbekannte Klassenzugehörigkeitswahrscheinlichkeit $p(y|x)$. Der Güteunterschied Δperf ist folgendermaßen definiert:

$$\Delta\text{perf}_{\mathcal{E},p}(f^{\mathcal{L}^+}, f^{\mathcal{L}}) = \text{perf}_{\mathcal{E},p}(f^{\mathcal{L}^+}) - \text{perf}_{\mathcal{E},p}(f^{\mathcal{L}}). \quad (2)$$

Bislang ist noch unklar, wie die Labels $\tilde{\mathbf{y}}$ ausgewählt werden, die zur Bildung von \mathcal{L}^+ bei der Bestimmung des Güteunterschieds erforderlich sind: Für jeden Kandidaten $\tilde{\mathbf{x}} \in \tilde{\mathbf{X}}$ können wir eines der Labels $\tilde{y} \in \mathcal{Y}$ erhalten, wenn wir das Orakel fragen. Es gibt also $|\mathcal{Y}|^b = C^b$ verschiedene Ergebnisse für die gesamte Menge $\tilde{\mathbf{X}}$. Für ein gegebenes $\tilde{\mathbf{X}}$ tritt jedes dieser Labeling-Möglichkeiten $\tilde{\mathbf{y}} = \langle \tilde{y}_1, \dots, \tilde{y}_b \rangle \in \mathcal{Y}^b$ mit einer bestimmten Wahrscheinlichkeit auf. Um diese Wahrscheinlichkeit zu bestimmen, verwenden wir idealerweise die Verteilung $p(\tilde{y}_i|\tilde{\mathbf{x}}_i)$, die die Grundwahrheit beschreibt. Da die Grundwahrheit unbekannt ist, müssen wir sie anhand der gelabelten Menge \mathcal{L} schätzen. Wir bezeichnen diese Schätzung mit $p^{\mathcal{L}}(\tilde{y}_i|\tilde{\mathbf{x}}_i) \approx p(\tilde{y}_i|\tilde{\mathbf{x}}_i)$. Für die geschätzte Verteilung, die die Wahrscheinlichkeit eines ganzen Label-Vektors $\tilde{\mathbf{y}}$ bei einer Menge von Kandidaten $\tilde{\mathbf{X}}$ beschreibt, schreiben wir $p^{\mathcal{L}}(\tilde{\mathbf{y}}|\tilde{\mathbf{X}})$ (abgekürzt durch $p^{\mathcal{L}}$). Durch Einfügen dieser Schätzung können wir den erwarteten Güteunterschied berechnen, den das Hinzufügen von $\tilde{\mathbf{X}} \otimes \tilde{\mathbf{y}}$ bringen würde:

$$\mathbb{E}_{p^{\mathcal{L}}(\tilde{\mathbf{y}}|\tilde{\mathbf{X}})} \left[\Delta\text{perf}_{\mathcal{E},p}(f^{\mathcal{L}^+}, f^{\mathcal{L}}) \right] = \sum_{\tilde{\mathbf{y}} \in \mathcal{Y}^b} \mathbb{P}^{\mathcal{L}}(\tilde{\mathbf{y}}|\tilde{\mathbf{X}}) \cdot \Delta\text{perf}_{\mathcal{E},p}(f^{\mathcal{L}^+}, f^{\mathcal{L}}) \quad (3)$$

Weiterhin muss noch konkretisiert werden, wie p geschätzt werden kann, um den Güteunterschied zu berechnen. Hierfür könnten wir entweder die aktuell gelabelte Menge $p^{\mathcal{L}}$ oder die neue gelabelte Menge $p^{\mathcal{L}^+}$ verwenden. Während [RM01] $p^{\mathcal{L}}$ zur Schätzung der Güte von $f^{\mathcal{L}}$ und $p^{\mathcal{L}^+}$ für $f^{\mathcal{L}^+}$ verwenden, schlagen wir vor, $p^{\mathcal{L}^+}$ zur Schätzung der Güte beider Klassifikatoren zu verwenden. Dafür gibt es folgende Argumente: (1) Bei der Verwendung verschiedener Schätzungen für die Berechnung der Güte würden wir nicht herausfinden, ob ein Unterschied auf die Änderung des Klassifikators oder auf die Änderung der Schätzungen zurückzuführen ist. (2) In dieser Arbeit gehen wir davon aus, dass das Orakel allwissend ist und daher immer richtig liegt. Folglich können wir davon ausgehen, dass mehr Labels genauere Schätzungen liefern sollten. Daher sollte $p^{\mathcal{L}^+}$ auch für den aktuellen Klassifikator $f^{\mathcal{L}}$ verwendet werden [Ko21c].

Die allgemeine Definition des probabilistischen Nutzen wird nun als Erwartungswert der Gütedifferenz über alle möglichen $\tilde{\mathbf{y}} \in \mathcal{Y}^b$ angegeben.

Definition 1 (Allgemeiner Probabilistischer Nutzen) *Bei einem aktiven Lernszenario mit ungelabelten Instanzen \mathcal{U} und gelabelten Instanzen \mathcal{L} definieren wir den allgemeinen probabilistischen Nutzen, indem wir den Erwartungswert der Gütedifferenz über alle möglichen Label-Möglichkeiten $\tilde{\mathbf{y}}$ für eine geordnete Kandidatenmenge $\tilde{\mathbf{X}} \subset \mathcal{U}$ wie folgt berechnen:*

$$\text{xgain}(\tilde{\mathbf{X}}, \mathcal{L}, \mathcal{E}) = \sum_{\tilde{\mathbf{y}} \in \mathcal{Y}^b} \mathbb{P}^{\mathcal{L}}(\tilde{\mathbf{y}}|\tilde{\mathbf{X}}) \cdot \Delta\text{perf}_{\mathcal{E},p^{\mathcal{L}^+}}(f^{\mathcal{L}^+}, f^{\mathcal{L}}). \quad (4)$$

Bei der Auswahlstrategie besteht die Idee darin, den probabilistischen Nutzen für verschiedene Kandidatenmengen $\tilde{\mathbf{X}} \in \mathcal{C} \subset \mathcal{U}^b$ innerhalb der Menge der Kandidatenmengen zu berechnen und diejenige für das Labeling auszuwählen, die den maximalen Nutzen erwarten lässt.

Definition 2 (Auswahl der besten Kandidaten) *Bei einem aktiven Lernszenario und einer Menge von Kandidatenmengen \mathcal{C} wählen wir das/die Label für die Kandidatenmenge $\tilde{\mathbf{X}} \in \mathcal{C}$, die den probabilistischen Nutzen maximiert.*

$$\tilde{\mathbf{X}}^* = \arg \max_{\tilde{\mathbf{X}} \in \mathcal{C}} (\text{xgain}(\tilde{\mathbf{X}}, \mathcal{L}, \mathcal{E})) \quad (5)$$

Um diesen Ansatz auf ein bestimmtes aktives Lernszenario anzuwenden, muss die obige Definition präzisiert werden, da die folgenden Fragen noch unbeantwortet sind. Diese Fragen werden in den Kapiteln 5–8 der Dissertation [Ko21a] ausführlich besprochen und diskutiert.

1. Wie kann $p^{\mathcal{L}}(y|x)$ (und $p^{\mathcal{L}^+}(y|x)$) definiert werden, um eine robuste Schätzung für $p(y|x)$ zu erhalten, ohne die Grundwahrscheinlichkeitsfunktion zu kennen? Robust beschreibt hier den Zustand, dass kleine Änderungen im Datensatz (z. B. durch Hinzufügen neuer gelabelter Daten) auch zu kleinen Änderungen in der Schätzung führen.
2. Wie können verschiedene Kandidatenmengen $\tilde{\mathbf{X}} \in \mathcal{C}$ erzeugt und deren Wahrscheinlichkeiten $p^{\mathcal{L}}(\tilde{\mathbf{y}}|\tilde{\mathbf{X}})$ bestimmt werden, um sequentielles, batch-basiertes und nicht-myopisches (vorausschauendes) aktives Lernen zu implementieren?
3. Wie kann Δ_{perf} für verschiedene Gütemaße berechnet werden, um eine entscheidungstheoretische Strategie zu implementieren, die in der Lage ist, das von der Anwendung vorgegebene Maß zu optimieren?
4. Wie kann man eine geeignete Evaluationsmenge \mathcal{E} finden, die dem transduktiven bzw. induktiven Szenario entspricht?

3 Experimente und Ergebnisse

In der Dissertation wird gezeigt, dass mehrere bekannte Strategien so umgeschrieben werden können, dass ein theoretischer Vergleich auf der Grundlage der mathematischen Beschreibung von der hier vorgestellten Formalisierung möglich ist. Durch gezieltes Einführen von Annahmen, die von existierenden Methoden implizit getroffen wurden, kann eine Äquivalenz gezeigt werden. Details dazu befinden sich in Kapitel 11 der Dissertation [Ko21a].

Im Folgenden wird das Akquisitionsverhalten von einigen Strategien in so genannten Nutzen-Diagrammen visualisiert. Damit gehen wir über den bisherigen Forschungsansatz hinaus, aktive Lernstrategien nur durch den Vergleich ihrer Lernkurven experimentell zu evaluieren.

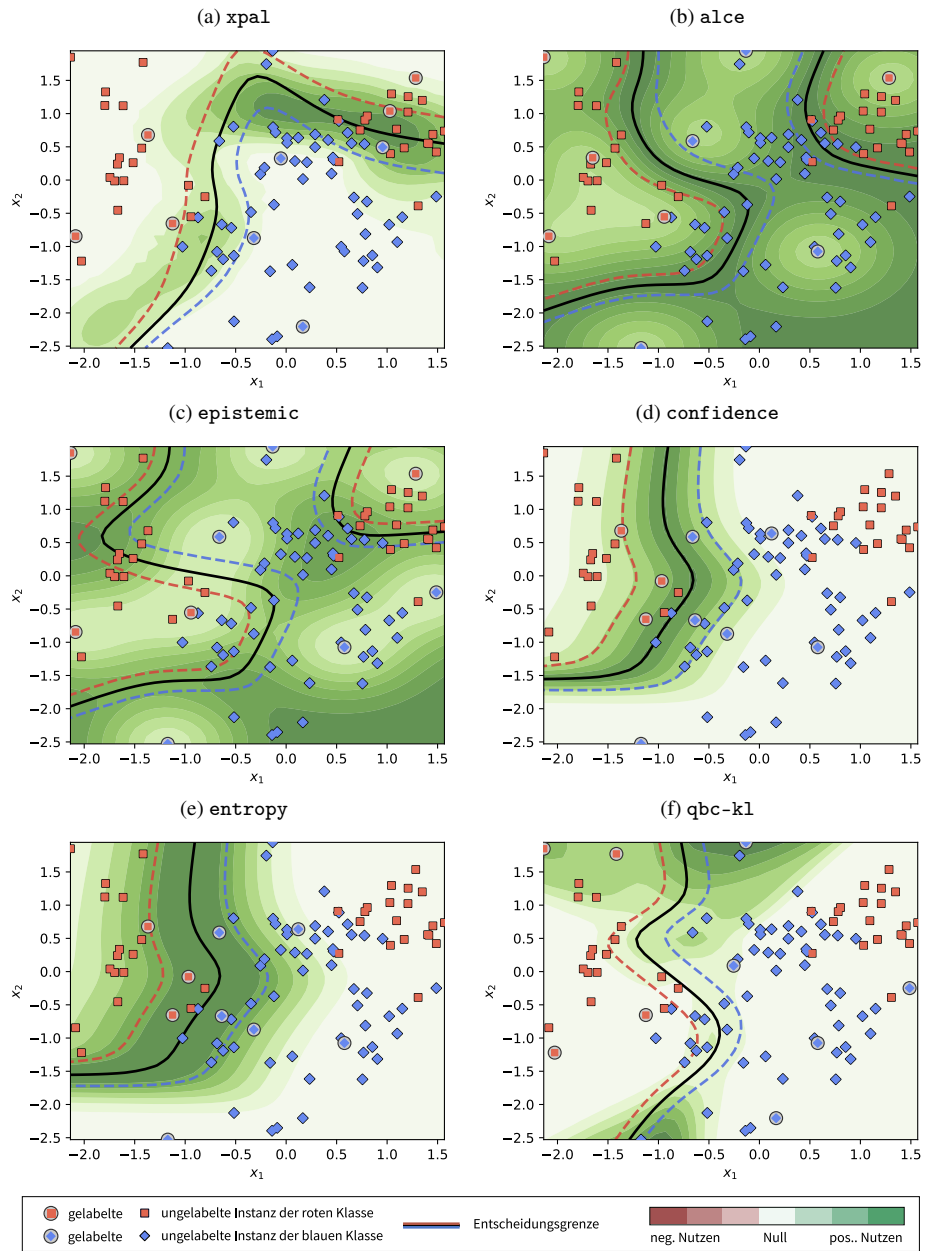


Abb. 1: Nutzen-Diagramme für die ersten 9 Labels, welche von der Selektionsstrategie selbst gewählt wurden.

Die Nutzen-Diagramme in Abb. 1 veranschaulichen, welches die ersten neun Labels sind, die von den Auswahlstrategien akquiriert werden. Weiterhin wird gezeigt, wie nützlich verschiedene Regionen für die anstehende Auswahl gesehen werden. Dafür verwenden wir einen zweidimensionalen Datensatz mit zwei Klassen (blaue Rauten vs. rote Rechtecke). Für die Klassifizierung verwenden wir einen Parzen-Window-Klassifikator [Pa62] mit einer manuell gewählten Bandbreite, so dass das Auswahlverhalten vergleichbar ist. Die Entscheidungsgrenze ist als schwarze Linie dargestellt und die gestrichelten Linien zeigen die Konfidenz des Klassifikators. Die ersten neun gelabelten Instanzen, die von der Auswahlstrategie selbst ausgewählt wurden, sind mit einem grauen Kreis markiert. Die Hintergrundfarbe zeigt, wie die jeweilige Auswahlstrategie den Nutzen eines Bereichs bewertet - dunkelgrüne Bereiche werden als nützlicher angesehen als weiße Bereiche.

Die Abbildung zeigt, dass die vorgestellte Methode `xpal` die ersten 9 Instanzen sehr ausgeglichen akquiriert hat und sich im Folgenden vor allem auf die Verfeinerung der Entscheidungsgrenze konzentrieren wird. Bei den unsicherheitsbasierten Methoden `confidence` und `entropy`, sowie dem Query-by-Committee-Ansatz (`qbc-kl`) kann man erkennen, dass die Exploration nicht ausreichend funktioniert hat, da hier die Ansammlung roter Instanzen im oberen, rechten Bereich nicht erkannt wurde. Dieses Verhalten zeigt sich auch in der folgenden quantitativen Analyse, welche anhand von Ranganalysen vorgenommen wurde.

Um die Güte der vorgenannten Auswahlstrategien quantitativ zu bewerten, führen wir Experimente an realen Datensätzen mit verschiedenen Gütemaßen, Klassifikatoren und für die Batch-Erfassung durch. Wir haben alle Algorithmen in der Python-Bibliothek `scikit-activeml`³ [Ko21b] implementiert und veröffentlicht, die auf `scikit-learn` aufbaut. Es wurden 22 Datensätze aus der `openML`-Bibliothek [Va13] verwendet. Um die Experimente durchzuführen, teilen wir jeden Datensatz nach dem Zufallsprinzip in einen Trainingssatz, der aus 66% der Instanzen besteht, und einen Testsatz, der die verbleibenden 34% enthält, auf und wiederholen dies 50 Mal. Zu Beginn sind alle Instanzen ungelabelt. Da es aufgrund der großen Anzahl von Datensätzen schwierig ist, die Güte anhand von Lernkurven zu vergleichen, haben wir die Ergebnisse in Tabelle 1 zusammengefasst. Hier berechnen wir den Rang der Fläche unter der Lernkurve für jede der 50-Wiederholungen und mitteln diesen Rang für jede Kombination aus Auswahlstrategie und Datensatz. Wir verwenden Farben, um die Güte schneller erkennen zu können: Grün steht für einen guten und Rot für einen schlechten Rang. Außerdem haben wir einen Wilcoxon Signed-Rank-Test durchgeführt, um festzustellen, ob die paarweisen Unterschiede zwischen `xpal` und seinen Konkurrenten mit einem p -Wert von 0,01 signifikant sind. Unten in der Tabelle wird außerdem die Anzahl der Siege, Unentschieden und Verluste auf der Basis des Tests gezählt. Tabelle 1 zeigt die Ergebnisse für das Gütemaß des Klassifikationsfehlers mit einem Parzen-Window-Klassifikator für eine sequenzielle Auswahl. Weitere Ergebnisse befinden sich in Kapitel 12 und 13 der Dissertation [Ko21a].

Die Ergebnisse zeigen, dass `xpal` eine leistungsstarke, gut funktionierende Auswahlstrategie ist, die auch verschiedene Gütemaße optimieren kann. Außerdem sind wir nicht auf einen bestimmten Klassifikatortyp beschränkt. Zum Beispiel konnte gezeigt werden, dass

³ <https://github.com/scikit-activeml/scikit-activeml>

xpal auch für einen Entscheidungsbaum gut funktioniert, obwohl sich die Art der Klassifizierung von der eines kernelbasierten Verfahrens deutlich unterscheidet.

	<i>optimal</i>	<i>xpal</i>	<i>mcpal</i>	<i>random</i>	<i>chappelle</i>	<i>emr</i>	<i>confidence</i>	<i>entropy</i>	<i>qbc_kl</i>	<i>alce</i>	<i>epistemic</i>	
iris	2.3 [^]	3.8	2.6 [^]	6.4 _↓	5.9 _↓	8.1 _↓	7.2 _↓	7.2 _↓	6.4 _↓	5.1 _↓	-	
corral	2.7 [^]	5.1	2.9 [^]	8.8 _↓	10.2 _↓	10.4 _↓	4.5 [◇]	4.5 [◇]	8.4 _↓	3.9 [^]	4.7 [◇]	
wine	2.1 [^]	3.3	6.3 _↓	8.0 _↓	3.8 [◇]	5.6 _↓	6.5 _↓	5.9 _↓	7.5 _↓	6.0 _↓	-	
parkinsons	3.0 [◇]	2.8	5.3 _↓	7.7 _↓	6.0 _↓	7.1 _↓	6.1 _↓	6.1 _↓	7.6 _↓	6.5 _↓	7.9 _↓	
prnn_crabs	1.0 [^]	5.5	3.0 [^]	8.4 _↓	9.9 _↓	10.2 _↓	6.5 _↓	6.5 _↓	7.7 _↓	4.0 [^]	3.4 [^]	
sonar	2.1 [^]	3.3	4.2 _↓	7.6 _↓	4.8 _↓	7.2 _↓	5.3 _↓	5.3 _↓	9.9 _↓	8.3 _↓	8.0 _↓	
seeds	4.2 [◇]	3.5	2.9 [^]	6.1 _↓	5.1 _↓	8.1 _↓	7.0 _↓	6.8 _↓	6.1 _↓	5.3 _↓	-	
glass	1.3 [^]	3.0	5.5 _↓	6.3 _↓	7.9 _↓	9.1 _↓	5.0 _↓	5.7 _↓	6.1 _↓	5.2 _↓	-	
qualitative-bank.	2.7 [^]	4.9	9.9 _↓	8.4 _↓	9.1 _↓	7.0 _↓	3.9 [◇]	3.9 [◇]	7.0 _↓	4.0 [◇]	5.1 [◇]	
vertebra-column	1.7 [^]	4.2	4.8 [◇]	6.3 _↓	7.2 _↓	8.0 _↓	5.4 _↓	5.9 _↓	6.0 _↓	5.6 _↓	-	
ecoli	3.0 [◇]	2.9	5.9 _↓	8.3 _↓	4.1 _↓	6.1 _↓	6.1 _↓	5.7 _↓	6.4 _↓	6.5 _↓	-	
ionosphere	1.3 [^]	4.5	5.2 [◇]	9.2 _↓	3.2 [^]	5.0 [◇]	7.3 _↓	7.3 _↓	6.8 _↓	7.7 _↓	8.3 _↓	
user-knowledge	1.2 [^]	2.5	3.4 _↓	6.6 _↓	7.4 _↓	9.3 _↓	5.2 _↓	8.5 _↓	6.8 _↓	4.3 _↓	-	
kc2	8.0 _↓	5.8	5.3 [◇]	6.2 [◇]	5.1 [◇]	7.0 [◇]	5.2 [◇]	5.0 [◇]	5.0 [◇]	6.4 [◇]	7.0 [◇]	
monks-problems-1	1.3 [^]	6.2	4.9 [^]	8.7 _↓	10.4 _↓	10.6 _↓	3.5 [^]	3.8 [^]	8.3 _↓	3.8 [^]	4.4 [^]	
balance-scale	1.0 [^]	4.5	5.2 [◇]	5.2 [◇]	9.1 _↓	8.7 _↓	5.8 _↓	5.1 [◇]	4.8 [◇]	5.7 _↓	-	
blood-transfusion	1.8 [^]	4.3	6.2 _↓	7.2 _↓	8.0 _↓	8.4 _↓	5.9 _↓	5.9 _↓	5.9 _↓	6.0 _↓	6.5 _↓	
diabetes	1.5 [^]	6.3	7.6 _↓	6.1 [◇]	6.8 [◇]	5.8 [◇]	5.9 [◇]	5.9 [◇]	4.7 [^]	7.9 _↓	7.5 _↓	
vehicle	1.1 [^]	2.7	4.0 _↓	6.0 _↓	8.4 _↓	8.6 _↓	6.3 _↓	7.8 _↓	6.8 _↓	3.2 _↓	-	
banknote-auth.	1.0 [^]	4.9	2.1 [^]	9.5 _↓	9.2 _↓	9.3 _↓	5.2 [◇]	5.2 [◇]	9.6 _↓	4.4 [◇]	5.6 _↓	
car-evaluation	1.0 [^]	3.0	2.5 [^]	6.0 _↓	9.0 _↓	9.0 _↓	7.2 _↓	8.4 _↓	5.4 _↓	3.6 _↓	-	
steel-plates-fault	1.0 [^]	2.0	4.1 _↓	8.2 _↓	6.2 _↓	8.3 _↓	4.3 _↓	4.4 _↓	10.6 _↓	6.6 _↓	10.2 _↓	
Durchschnitt	2.1	4.0	4.7	7.3	7.1	8.0	5.7	5.9	7.0	5.4	6.5	
Konkurrent vs. xpal	besser	18	0	7	0	1	0	1	1	1	3	2
	gleich	3	0	4	3	3	3	5	6	2	3	3
	schlechter	1	0	11	19	18	19	16	15	19	16	7

Tab. 1: Der mittlere Rang für alle Kombinationen von Auswahlstrategien und Datensätzen über 50 Wiederholungen in Bezug auf den Klassifikationsfehler unter Verwendung eines Parzen-Window-Klassifikators. Die Symbole zeigen an, ob ein Konkurrent signifikant besser ([^]), schlechter (_↓) oder statistisch nicht signifikant ([◇]) gegenüber xpal ist, wobei ein Wilcoxon Signed-Rank-Test mit einem p -Wert von 0,01 verwendet wurde.

4 Zusammenfassung und Ausblick

In dieser Dissertation wurde Probabilistisches Aktives Lernen vorgestellt, welches eine ganzheitliche Sichtweise der Nutzenschätzung für Auswahlstrategien bietet. Zusammenfassend lässt sich sagen, dass dieses Verfahren den Probabilistischen Nutzen berechnet, der die erwartete Güteverbesserung eines Klassifikators schätzt, wenn die Labels einiger ausgewählter, noch ungelabelter Instanzen zu seiner Trainingsmenge hinzugefügt werden.

Probabilistisches Aktives Lernen kann so spezifiziert werden, dass es für eine Vielzahl von Anwendungen und Szenarien geeignet ist. Die Experimente zeigen eine hervorragende Güte für alle genannten Varianten. Alle Entwurfsparameter (z. B. Klassifikator, Gütemaß) sind direkt durch die Anwendung vorgegeben. Neben dem methodischen Beitrag dieser Arbeit wurde das transduktive aktive Lernen formell eingeführt, ein Spezialfall, der bisher unwissentlich wie induktives Lernen behandelt wurde. Wir diskutieren, dass Selektionsstrategien das Wissen über die aktuellen Testinstanzen einbeziehen sollten, da diese in diesem Szenario bereits im Voraus bekannt sind. Darüber hinaus haben wir die minimalen aggregierten Kosten (mac) vorgeschlagen, die die Fehlklassifizierungs- und Annotationskosten zusammenfassen und einen wirtschaftlich optimalen Haltepunkt für ein gegebenes Kostenverhältnis definieren. Diese Dissertation trägt wesentlich zu einem tieferen Verständnis über aktives Lernen in dem Sinne bei, dass sie theoretische und empirische Vergleiche verschiedener Strategien liefert. Darüber hinaus zeigen wir Nutzen-Diagramme, die ein intuitives Verständnis dafür vermitteln, wie die verschiedenen Selektionsstrategien funktionieren.

Die hier vorgestellte Arbeit lässt sich in vielerlei Hinsicht erweitern, was zum Teil auch bereits in Publikationen festgehalten ist: Mehrere und unsichere Orakel [He21, Sa19], Unsicherheitsbetrachtungen für Aktives Lernen in Neuronalen Netzen [Hu21], Güteschätzungen und Abbruchkriterien [Ko19], andere Szenarien im Aktiven Lernen [Ph21, Ko16] und Anwendungen [Sc18].

Literaturverzeichnis

- [BBS19] Bressan, Rafael S; Bugatti, Pedro H; Saito, Priscila TM: Breast cancer diagnosis through active learning in content-based image retrieval. *Neurocomputing*, 357:1–10, 2019.
- [Ha20] Haussmann, Elmar; Fenzi, Michele; Chitta, Kashyap; Ivanecky, Jan; Xu, Hanson; Roy, Donna; Mittel, Akshita; Koumchatzky, Nicolas; Farabet, Clement; Alvarez, Jose M: Scalable active learning for object detection. In: *Proceedings of the Intelligent Vehicles Symposium*. IEEE, S. 1430–1435, 2020.
- [He21] Herde, Marek; Kottke, Daniel; Huseljic, Denis; Sick, Bernhard: Multi-annotator probabilistic active learning. In: *Proceedings of the International Conference on Pattern Recognition*. IEEE, S. 10281–10288, 2021.
- [Hu21] Huseljic, Denis; Sick, Bernhard; Herde, Marek; Kottke, Daniel: Separation of aleatoric and epistemic uncertainty in deterministic deep neural networks. In: *Proceedings of the International Conference on Pattern Recognition*. IEEE, S. 9172–9179, 2021.

- [Ko16] Kottke, Daniel; Kreml, Georg; Stecklina, Marianne; Styp von Rekowski, Cornelius; Sabsch, Tim; Pham Minh, Tuan; Deliano, Matthias; Spiliopoulou, Myra; Sick, Bernhard: Probabilistic active learning for active class selection. In: Proceedings of the Future of Interactive Learning Machines Workshop at NIPS. 2016.
- [Ko19] Kottke, Daniel; Schellinger, Jim; Huseljic, Denis; Sick, Bernhard: Limitations of assessing active learning performance at runtime. arXiv, 1901(10338), 2019.
- [Ko21a] Kottke, Daniel: A Holistic, Decision-Theoretic Framework for Pool-Based Active Learning. Dissertation, University of Kassel, 2021.
- [Ko21b] Kottke, Daniel; Herde, Marek; Minh, Tuan Pham; Benz, Alexander; Mergard, Pascal; Roghman, Atal; Sandrock, Christoph; Sick, Bernhard: scikit-activeml: A library and toolbox for active learning algorithms. Preprints, (2021030194):1–6, 2021.
- [Ko21c] Kottke, Daniel; Herde, Marek; Sandrock, Christoph; Huseljic, Denis; Kreml, Georg; Sick, Bernhard: Toward optimal probabilistic active learning using a Bayesian approach. Machine Learning, 110:1199–1231, 2021.
- [Pa62] Parzen, Emanuel: On estimation of a probability density function and mode. The Annals of Mathematical Statistics, 33(3):1065–1076, 1962.
- [Ph21] Pham, Tuan; Kottke, Daniel; Kreml, Georg; Sick, Bernhard: Stream-based active learning for sliding windows under the influence of verification latency. Machine Learning, 2021. (minor revision).
- [RM01] Roy, Nicholas; McCallum, Andrew: Toward optimal active learning through monte carlo estimation of error reduction. In: Proceedings of the International Conference on Machine Learning. S. 441–448, 2001.
- [Sa19] Sandrock, Christoph; Herde, Marek; Calma, Adrian; Kottke, Daniel; Sick, Bernhard: Combining self-reported confidences from uncertain annotators to improve label quality. In: Proceedings of the International Joint Conference on Neural Networks. IEEE, S. 1–8, 2019.
- [Sc18] Scharei, Kristina; Herde, Marek; Bieshaar, Maarten; Calma, Adrian; Kottke, Daniel; Sick, Bernhard: Automated active learning with a robot. Archives of Data Science, Series A (Online First), 5(1):1–16, 2018.
- [Va13] Vanschoren, Joaquin; van Rijn, Jan N; Bischl, Bernd; Torgo, Luis: OpenML: Networked science in machine learning. SIGKDD Explorations, 15(2):49–60, 2013.



Daniel Kottke (geb. 1989) hat an der Otto-von-Guericke Universität in Magdeburg Informatik studiert und seinen Master in Data and Knowledge Engineering mit Auszeichnung abgeschlossen. Anschließend forschte er zum Thema Aktives Lernen in Magdeburg am Lehrstuhl „Knowledge Management & Discovery“ und in Kassel am Fachgebiet „Intelligente Eingebettete Systeme“. Im September 2021 schloss er seine Dissertation „A Holistic, Decision-Theoretic Framework for Pool-Based Active Learning“ mit summa cum laude ab. Aktuell ist er Gruppenleiter für „Methods for Intelligent Interactive Systems“ in Kassel. Er ist

Ko-Organisator des Workshops „Interactive Adaptive Systems“ seit seiner Gründung in 2016, welcher Forscher:innen und Anwender:innen zusammenzubringen soll und ist Mitglied im Vorstand des Rats der Graduiertenakademie an der Universität Kassel.