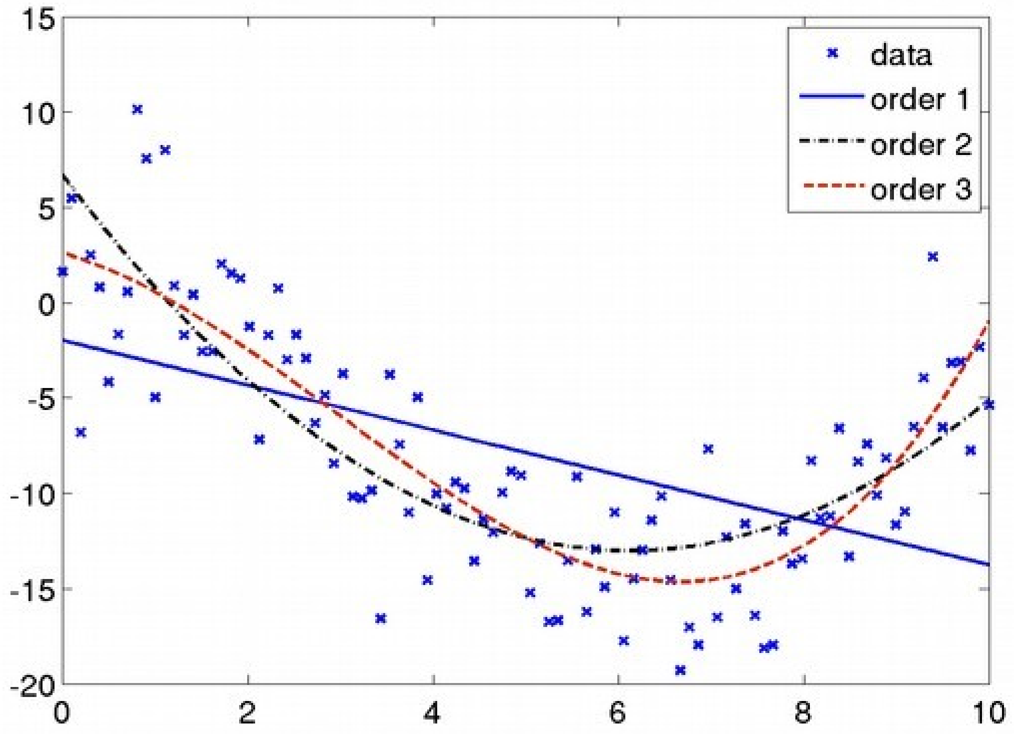
Машинное обучение
Лекция 2. Основные понятия



Содержание лекции

- Задача обучения
- Матрица объектов-признаков
- Модель алгоритмов и метод обучения
- Функционал качества
- Вероятностная постановка задачи обучения
- Проблема переобучения

Литература

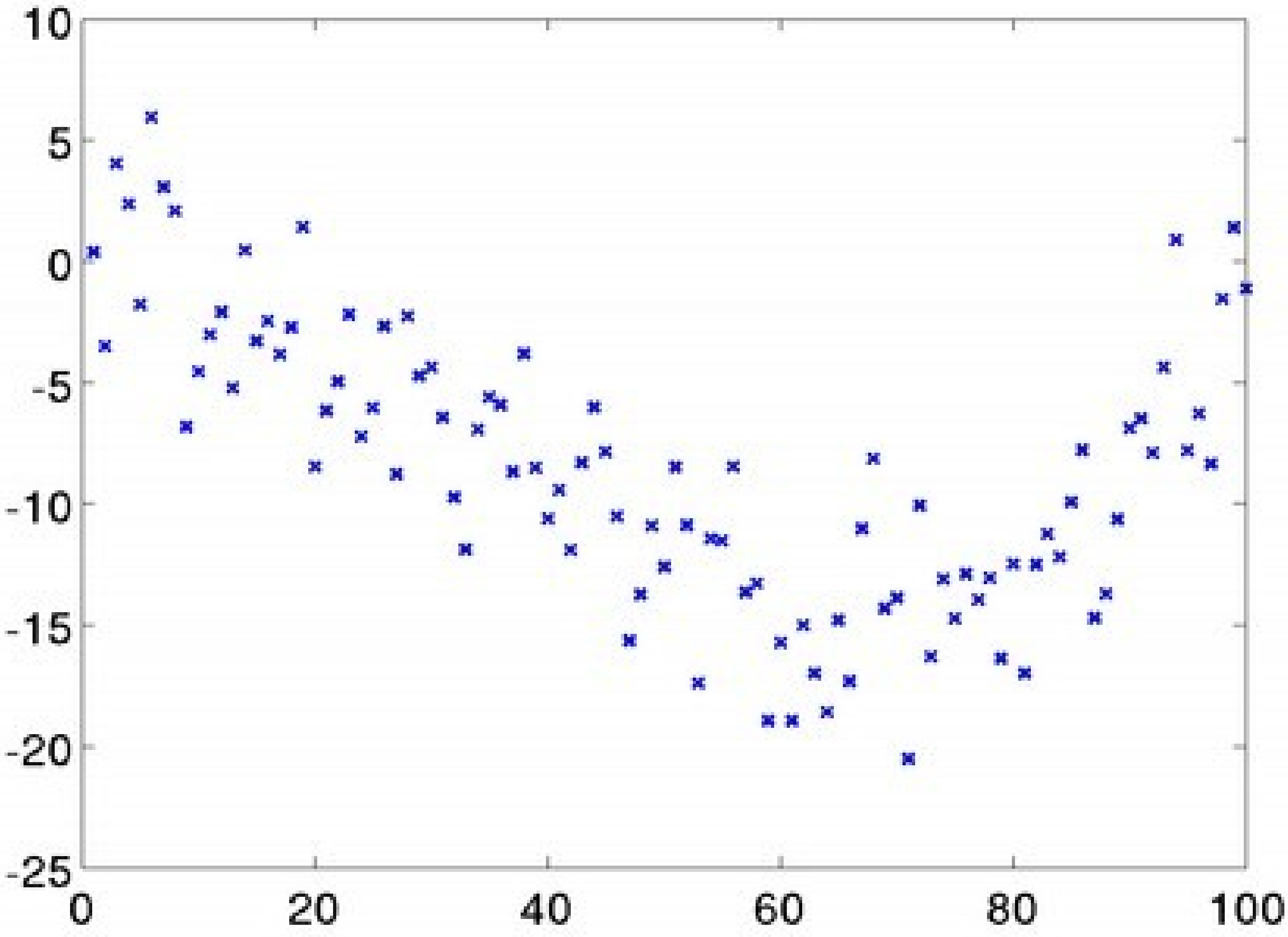
- http://www.machinelearning.ru
- Курс К.В.Воронцова
- https://www.kaggle.com/

Задача обучения

X — множество объектов
Y — множество ответов
$y : X \to Y$ — неизвестная зависимость
(target function)

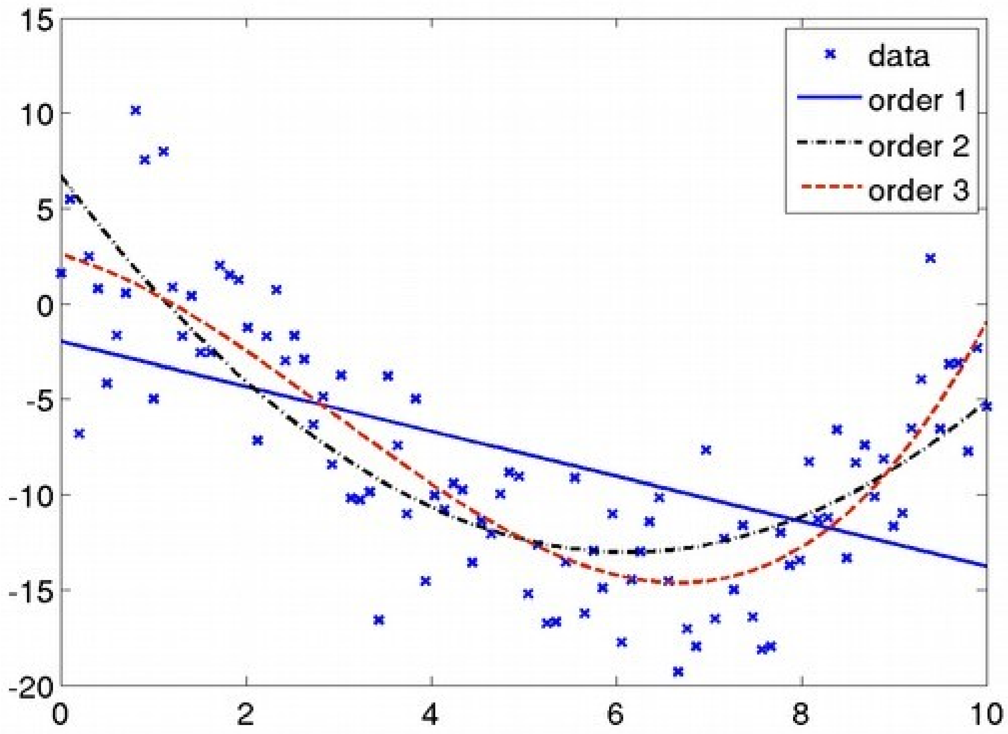
Дано:
$\{x_1, \dots, x_\ell\} \subset X$ — обучающая выборка
(training sample)
$y_i = y(x_i),\ i = 1, \dots, \ell$ — известные ответы

Задача обучения



Задача обучения

Найти:
a : X → Y — алгоритм, решающую функцию (decision function), приближающую y на всём множестве X



Типы задач

Задачи классификации (classification):

$Y = \{-1, +1\}$ — классификация на 2 класса

$Y = \{1, . . . , M\}$ — на M непересекающихся классов

$Y = \{0, 1\}^M$ — на M классов, которые могут пересекаться.

Задачи восстановления регрессии (regression):

$Y = R$ или $Y = R^m$

Задачи ранжирования (ranking):

Y — конечное упорядоченное множество

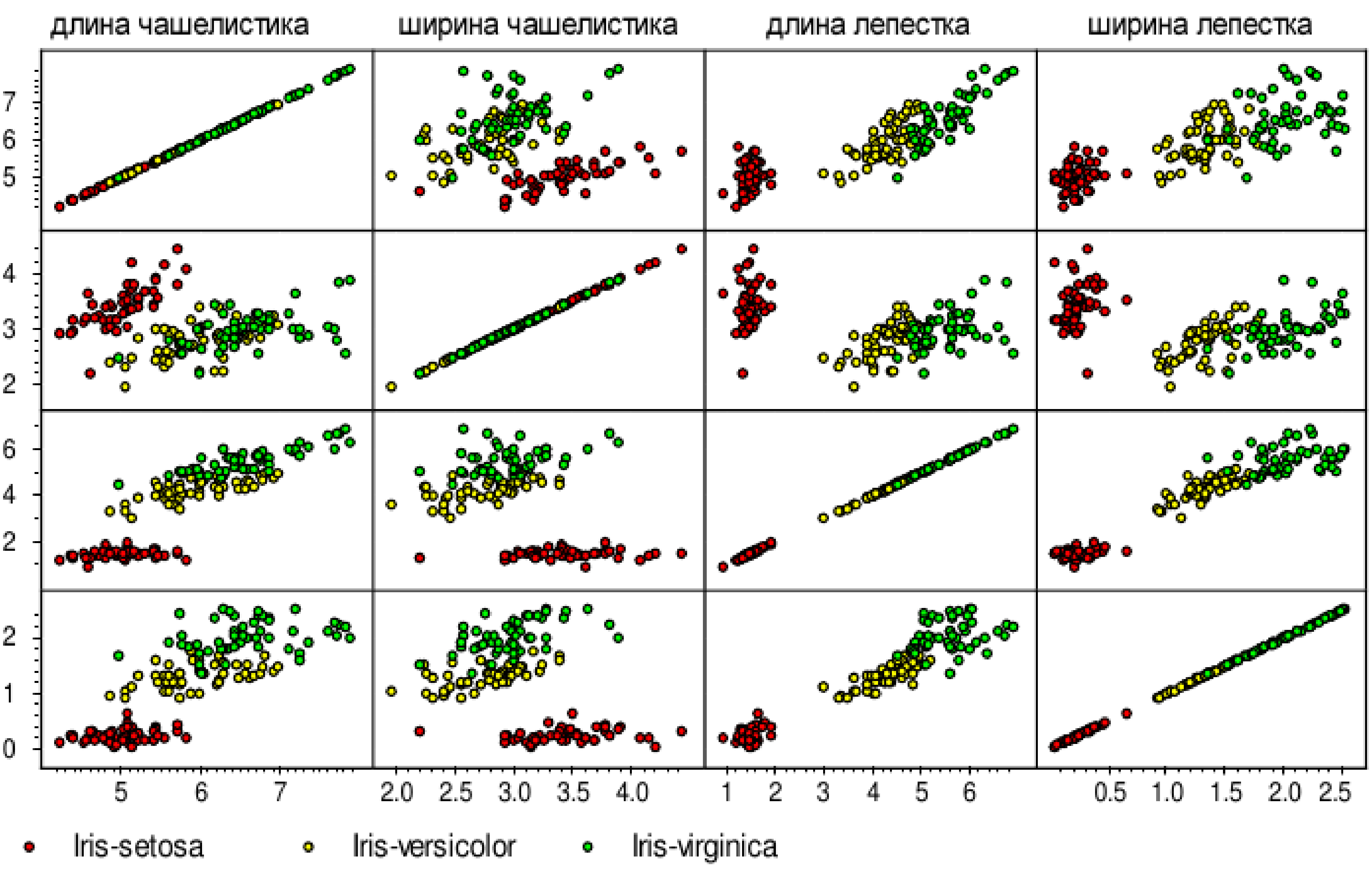
Признаки

- Компьютер всегда имеет дело с признаковым описанием объектов. Например: пациента можно описать признаками: имя, возраст, номер полиса, жалобы, давление, температура, результаты анализов
- $f : X \to D_f$
- Типы признаков:
  - бинарный
  - номинальный
  - порядковый
  - количественный

Матрица объектов-признаков:

$$\begin{pmatrix} f_1(x_1) & \dots & f_n(x_1) \\ \dots & \dots & \dots \\ f_1(x_\ell) & \dots & f_n(x_\ell) \end{pmatrix}$$

Пример. Задача классификации видов ириса (Фишер 1936)



Модель и алгоритм обучения

- **Модель** – это семейство “гипотез”

$$A = \{g(x, \theta) \mid \theta \in \Theta\}$$

  одна из которых (как мы надеемся) приближает целевую функцию

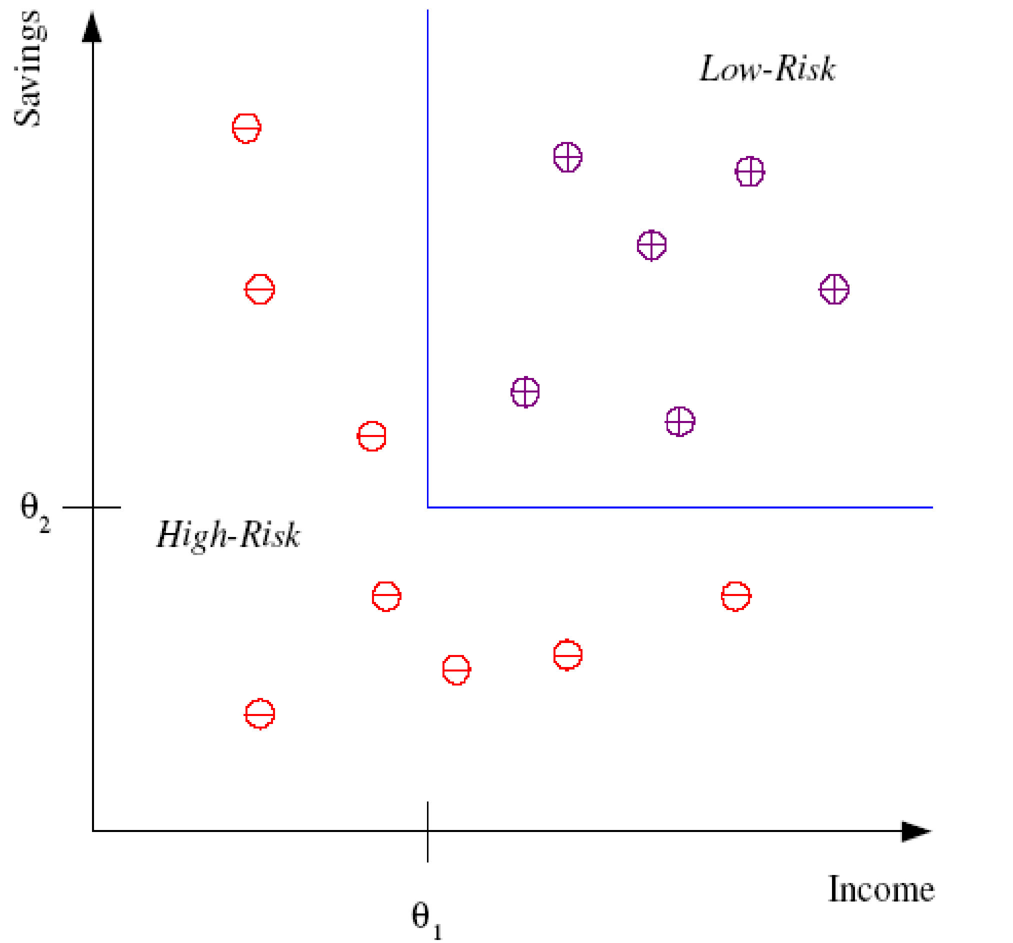
- **Алгоритм обучения**

$$\mu \colon (X \times Y)^\ell \to A$$

  находит гипотезу в модели, которая наилучшим образом приближает целевую функцию, используя известные значения (обучающую выборку)

Пример - классификация

- Кредитный скоринг
- Разделение клиентов на low-risk и high-risk по их зарплате и сбережениям



IF *income* > θ_1 AND *savings* > θ_2
THEN low-risk ELSE high-risk

Модель

Пример - регрессия

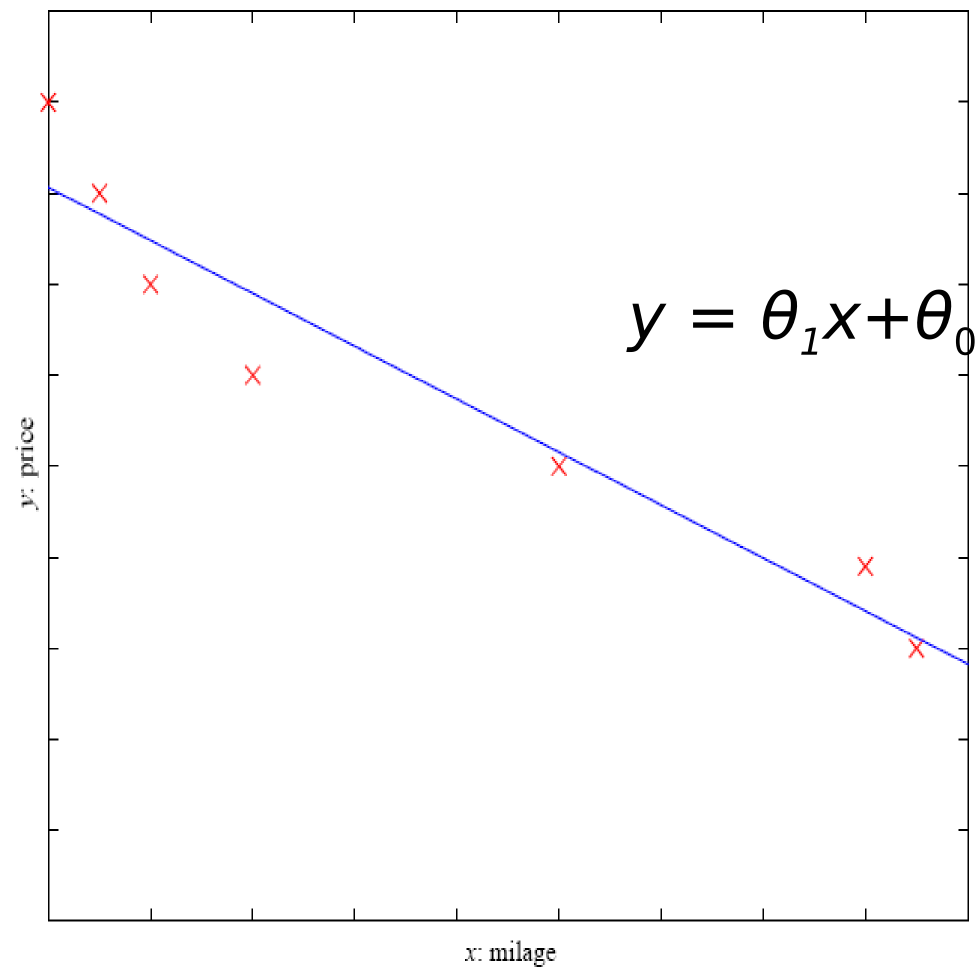
- Цена автомобиля
- *x* : признаки (пробег)

y : цена

$y = g(x \mid \theta)$

g ( ) модель,

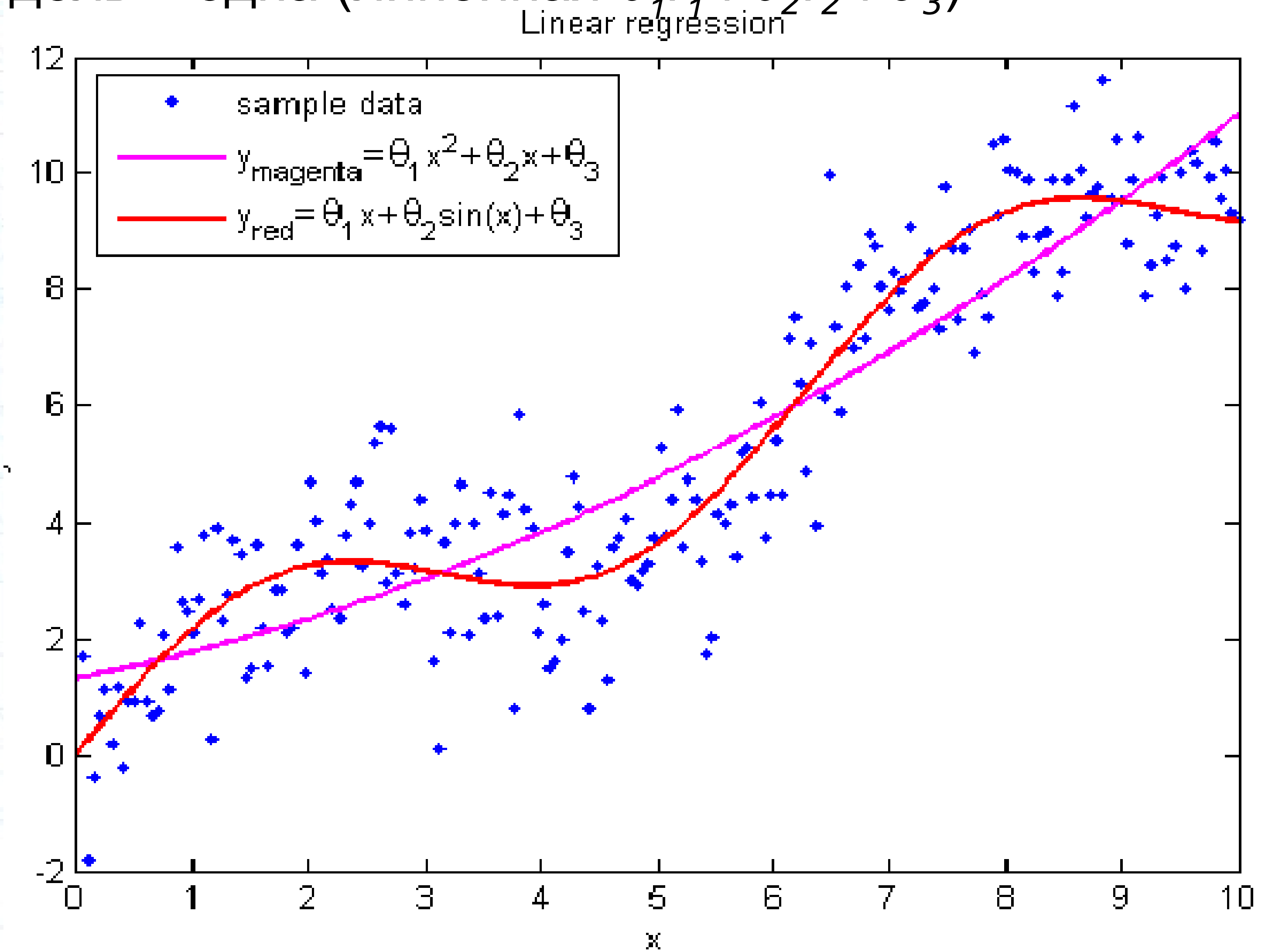
□θ_0, θ_1 *параметры*



12

Пример – две точки зрения

1. x – один признак, $\theta_1 x^2+\theta_2 x+\theta_3$ и $\theta_1 x+\theta_2 \sin(x)+\theta_3$ – две модели
2. $\{x^2,x\}$, $\{x,\sin(x)\}$ – два набора разных признаков, модель – одна (линейная $\theta_1 f_1+\theta_2 f_2+\theta_3$)



Обучение на основе минимизации эмпирического риска

- Функция потерь $\mathscr{L}(a,x)$ - величина ошибки гипотезы а на объекте х. Примеры:
  - бинарная (где используется?)
  - $\mathscr{L}(a,x) = |a(x) - y^*(x)|$
  - $\mathscr{L}(a,x) = (a(x) - y^*(x))^2$
- Эмпирический риск: $Q(a, X^\ell) = \frac{1}{\ell}\sum_{i=1}^{\ell}\mathscr{L}(a, x_i)$
- Самый популярный алгоритм обучения – минимизация эмпирического риска:

$$\mu(X^\ell) = \arg\min_{a \in A} Q(a, X^\ell)$$

Проблемы реальных задач

- Одинаковые признаковые описания могут соответствовать разным объектам
- Объекты с похожими (даже одинаковыми) значениями признаков могут иметь различные значения целевой функции

Вероятностная постановка задачи

- p(x,y) – неизвестная точная плотность распределения на X×Y
- X^ℓ - выборка из случайных, независимых и одинаково распределенных прецендентов
- $p(X^\ell) = p\big((x_1, y_1), \dots, (x_\ell, y_\ell)\big) = p(x_1, y_1) \times \dots \times p(x_\ell, y_\ell)$
- $\varphi(x, y, \theta)$ - модель
- Принцип максимума правдоподобия:

$$L(\theta, X^\ell) = \prod_{i=1}^{\ell} \varphi(x_i, y_i, \theta) \to \max_{\theta}$$

Decision function

- Предположим, что мы нашли вероятность p(y|x)=p(x,y)/p(x). Какое значение y нужно предсказать для заданного x ?
- Минимизация среднего риска:

$$a(x) = \arg\min_y E_s \ \mathscr{L}(s, y)$$

- Упражнение:

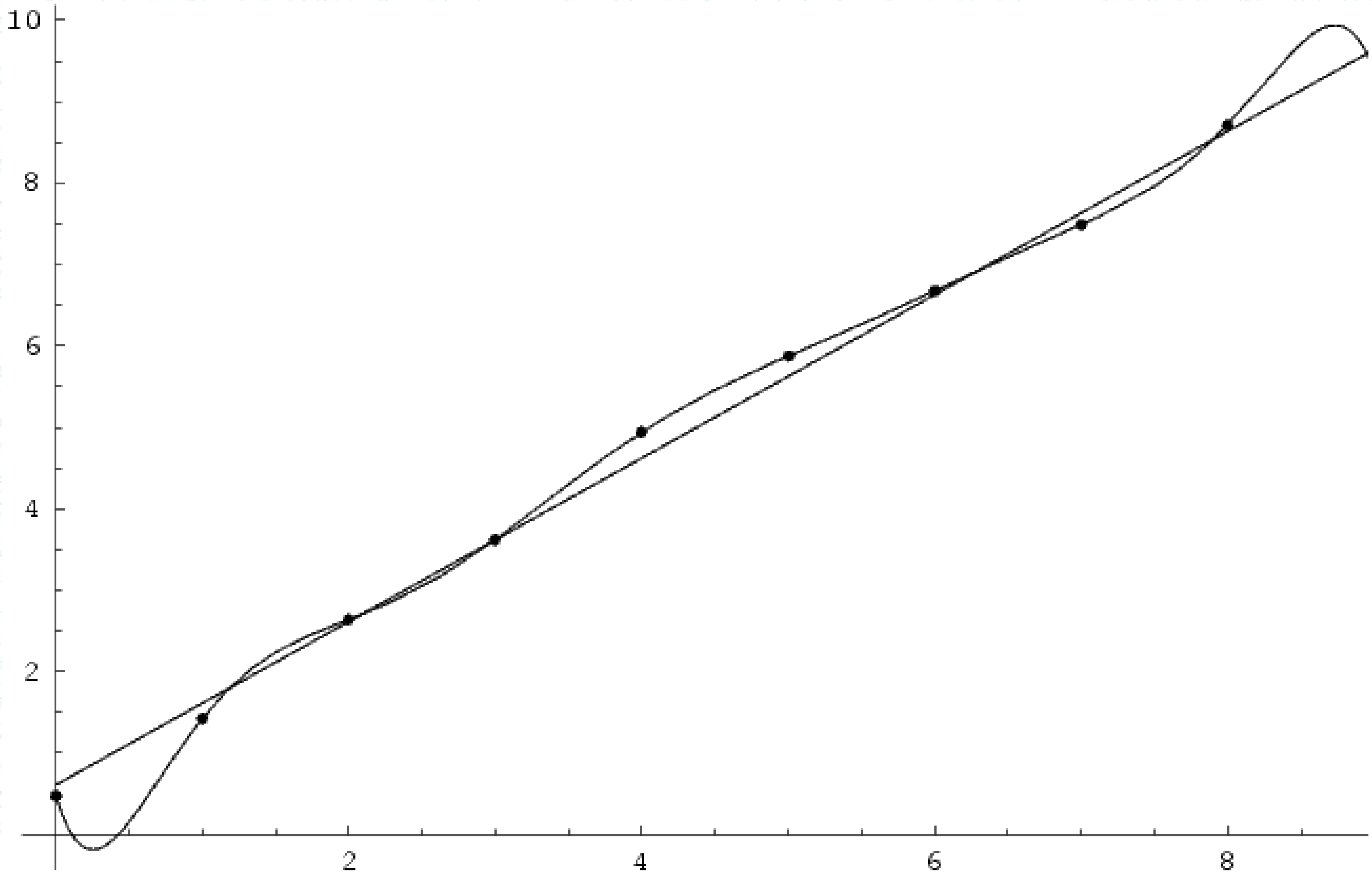
y	2	3	4	5
p(y|x)	0.1	0.2	0.3	0.4

примите правильные решения a(x) для каждой функции потерь со слайда14

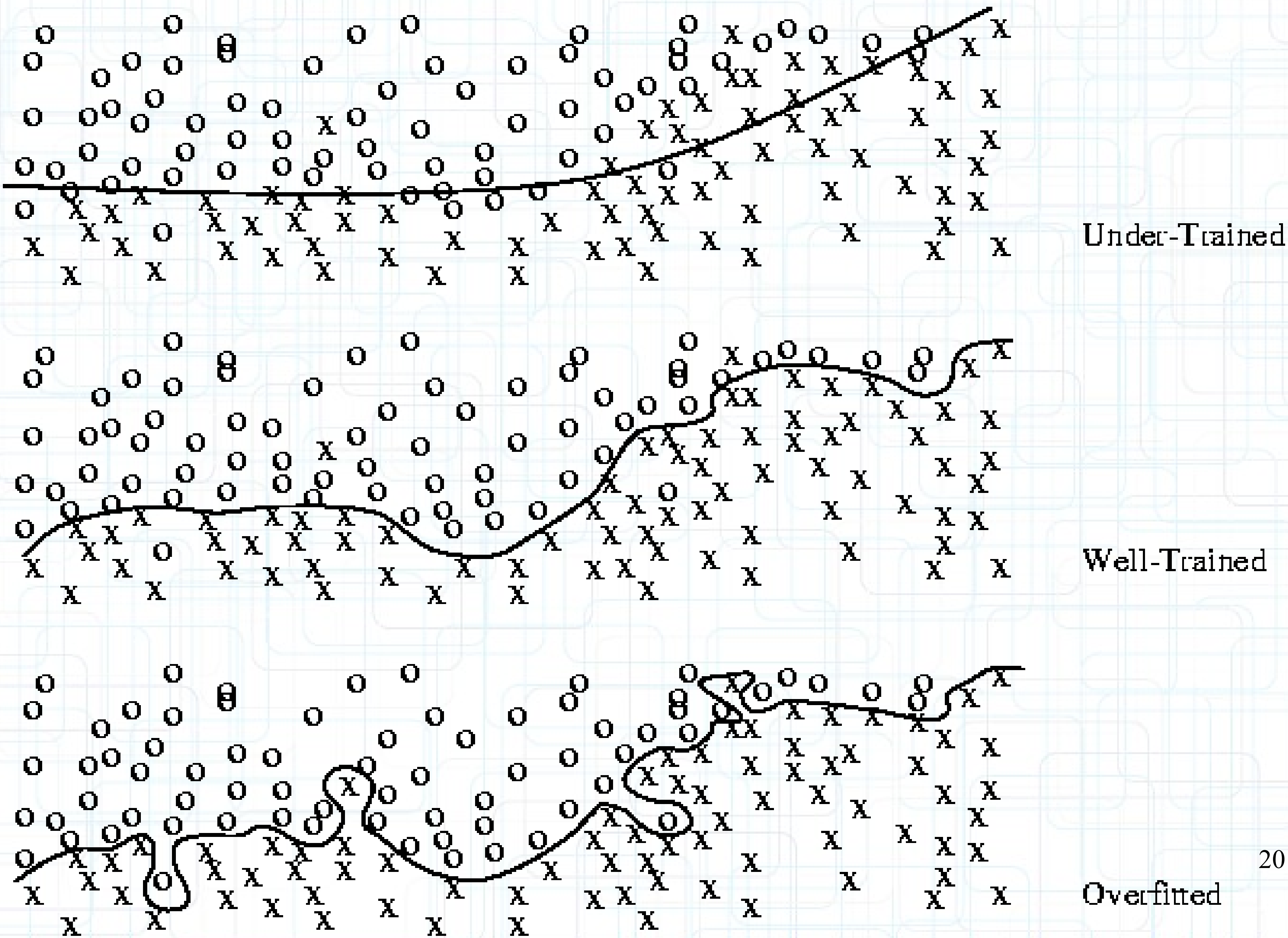
Степени обученности модели

- Недообученная модель
  - Модель, слишком сильно упрощающая закономерность $X \rightarrow Y$.
- Переобученная модель
  - Модель, слишком сильно настроенная на особенности обучающей выборки (на шум в наблюдениях), а не на реальную закономерность $X \rightarrow Y$.

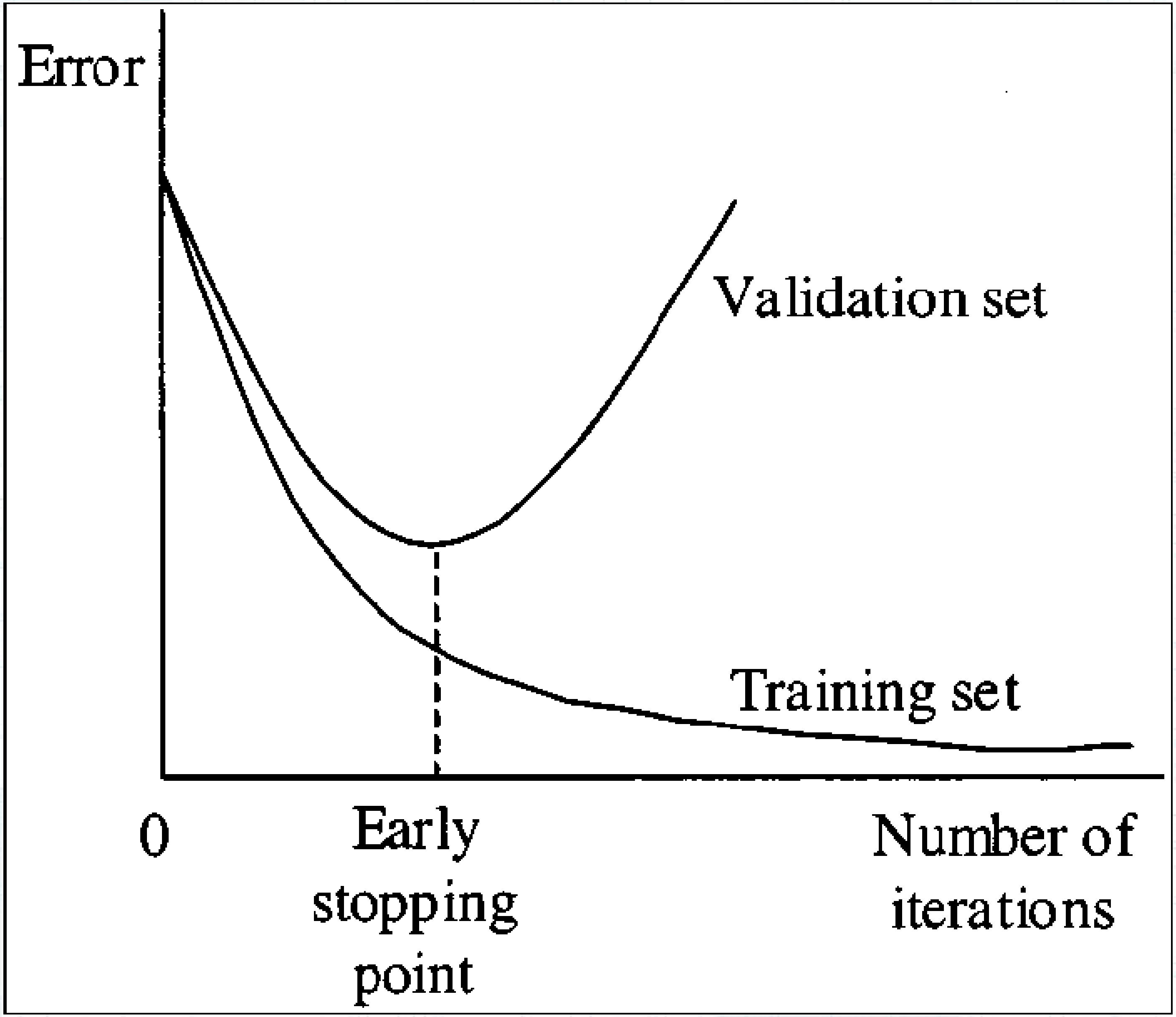
Переобучение



Переобучение



Когда нужно заканчивать обучаться?



Контроль переобучения

- Для оценки обобщающей способности алгоритма обучения μ используют:
  - Эмпирический риск на тестовых данных (hold-out):

$$\mathrm{HO}(\mu, X^\ell, X^k) = Q(\mu(X^\ell), X^k) \to \min$$

  - Скользящий контроль (leave-one-out), L=l+1:

$$\mathrm{LOO}(\mu, X^L) = \frac{1}{L}\sum_{i=1}^{L} \mathscr{L}(\mu(X^L \setminus \{x_i\}), x_i) \to \min$$

  - Кросс-проверка (cross-validation):

$$\mathrm{CV}(\mu, X^L) = \frac{1}{|N|}\sum_{n\in N} Q(\mu(X_n^\ell), X_n^k) \to \min$$

  - Оценка вероятности переобучения:

$$Q_\varepsilon(\mu, X^L) = \frac{1}{|N|}\sum_{n\in N} \Big[Q\big(\mu(X_n^\ell), X_n^k\big) - Q\big(\mu(X_n^\ell), X_n^\ell\big) \geqslant \varepsilon \Big] \to \min$$