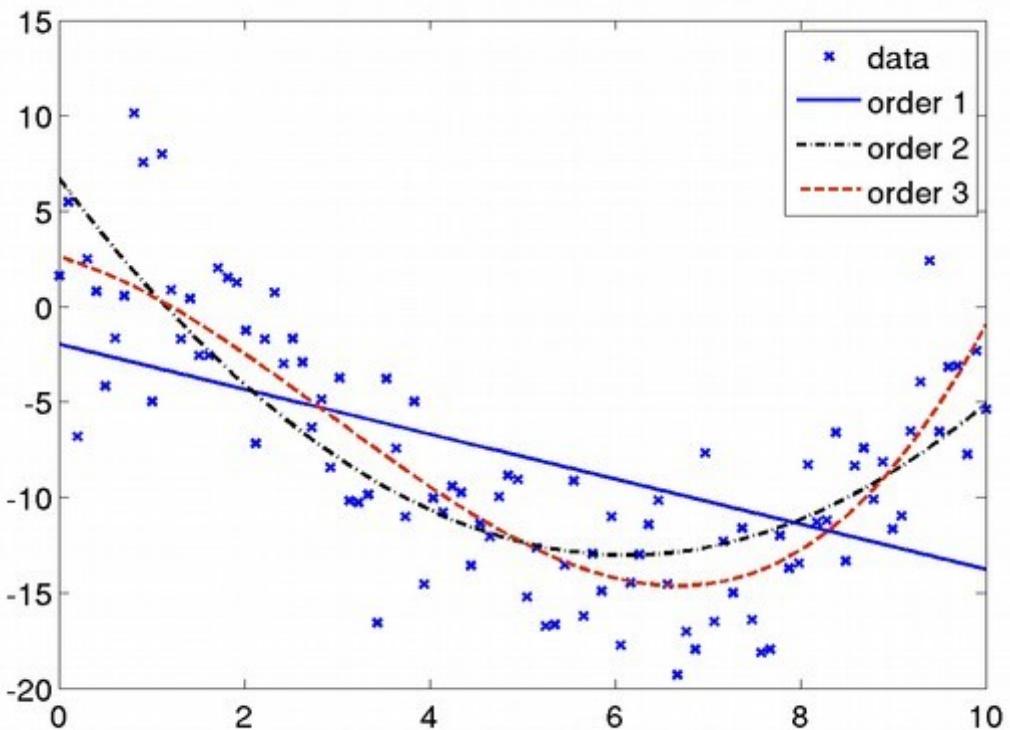


Машинное обучение

Основные понятия



Содержание лекции

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

Задача обучения

X — множество объектов

Y — множество ответов

$y: X \rightarrow Y$ — неизвестная зависимость
(target function)

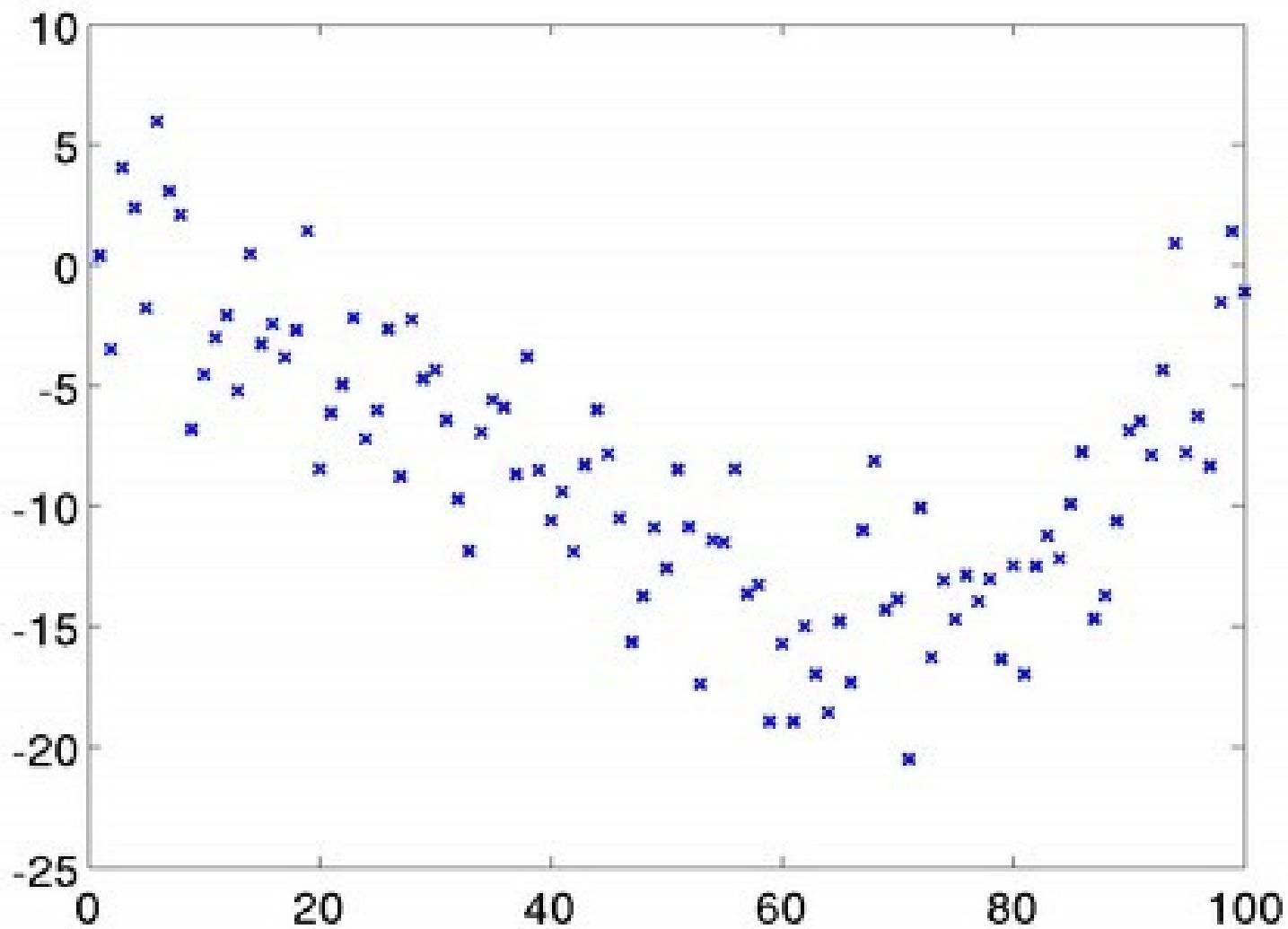
Дано:

$\{x_1, \dots, x_\ell\} \subset X$ — обучающая выборка

(training sample)

$y_i = y(x_i), i = 1, \dots, \ell$ — известные ответы

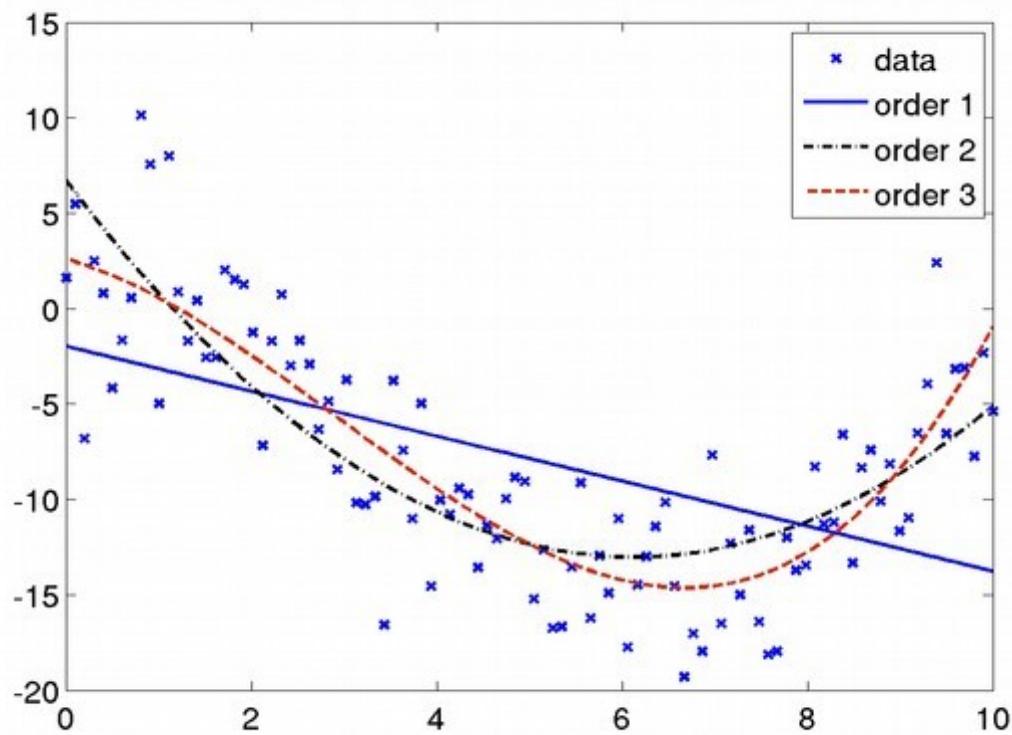
Задача обучения



Задача обучения

Найти:

$a : X \rightarrow Y$ — алгоритм, решающую функцию (decision function), приближающую y на всём множестве X



Типы задач

Задачи классификации (classification):

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

$Y = \{1, \dots, M\}$ — на M непересекающихся классов
(multi-class classification)

$Y = \{0, 1\}^M$ — на M классов, которые могут пересекаться (multi-label classification).

Задачи восстановления регрессии (regression):

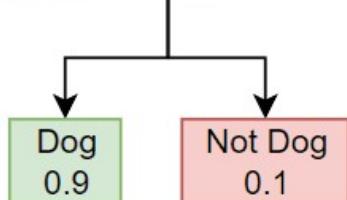
$Y = R$ или $Y = R^m$

Задачи ранжирования (ranking):

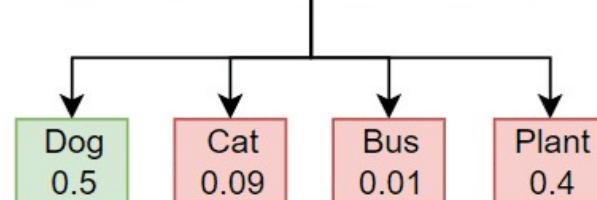
Y — конечное упорядоченное множество

Типы классификаций

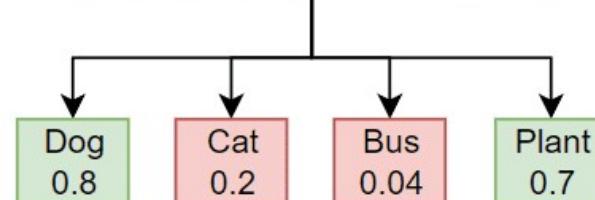
Binary Classification



Multiclass Classification



Multilabel Classification

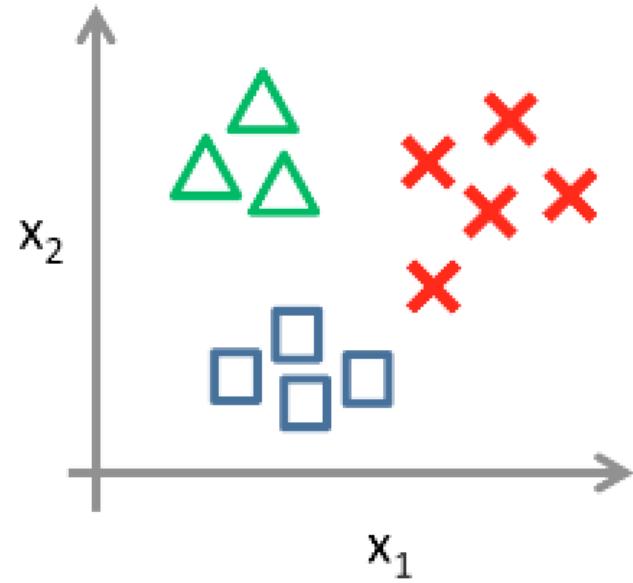


Выбор между multi-class и multi-label

- Пример нетривиальной задачи: классификация участков гистологий. Патологоанатомы разметили знакомые характерные участки в БД изображений названиями известных патологий. Нужно натренировать нейросеть делать это автоматически
- Чем будут отличаться результаты предсказания multi-class и multi-label нейросетей?
- Если мы впоследствии будем сортировать по вероятности принадлежности тому или иному классу, какой тип классификации правильно будет применять?

Сведение многоклассовой к бинарной классификации

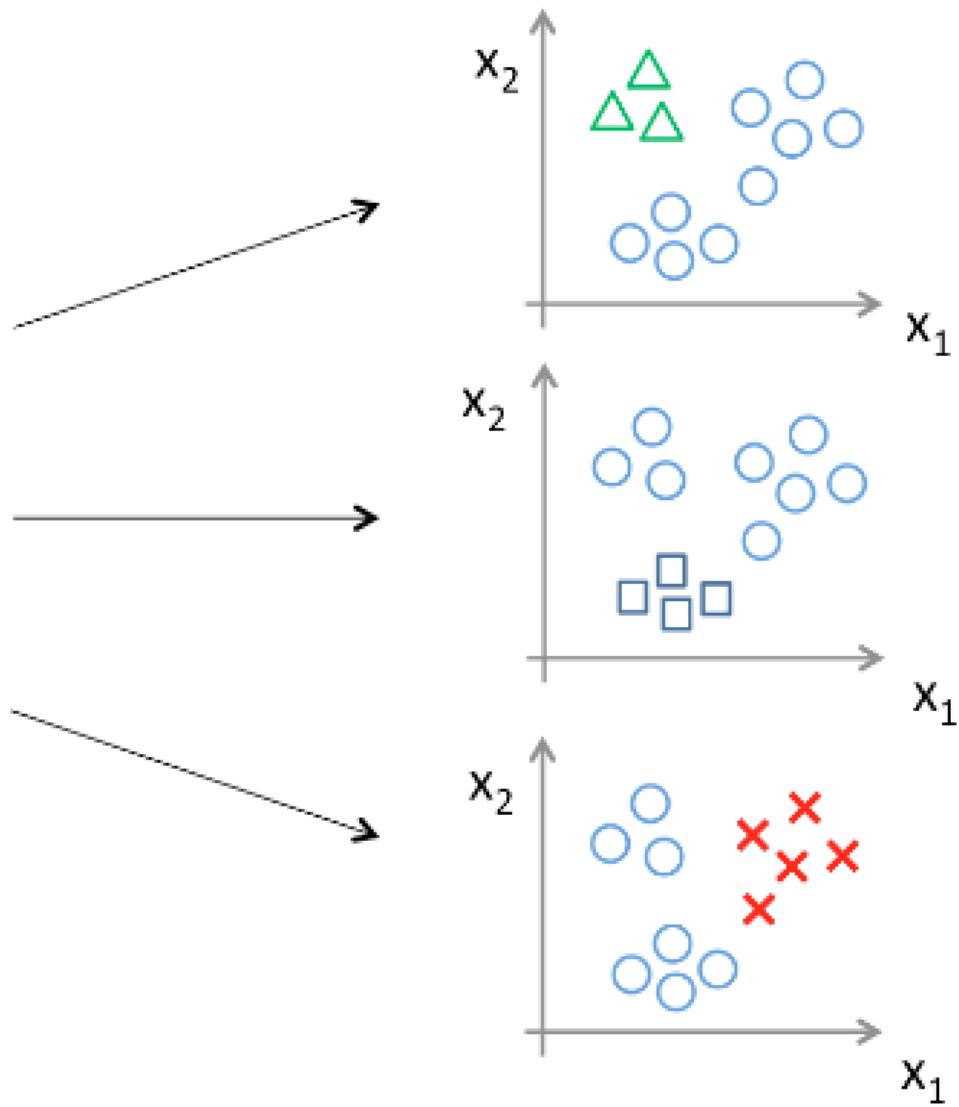
One-vs-all (one-vs-rest):



Class 1:

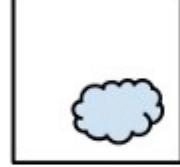
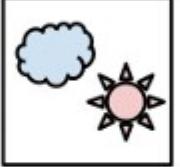
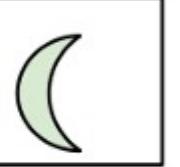
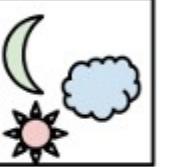
Class 2:

Class 3:



Кодирование класса

Multi-Class

$C = 3$	Samples	
  	  	  
	Labels	

[0 0 1] [1 0 0] [0 1 0]

one-hot encoding

Multi-Label

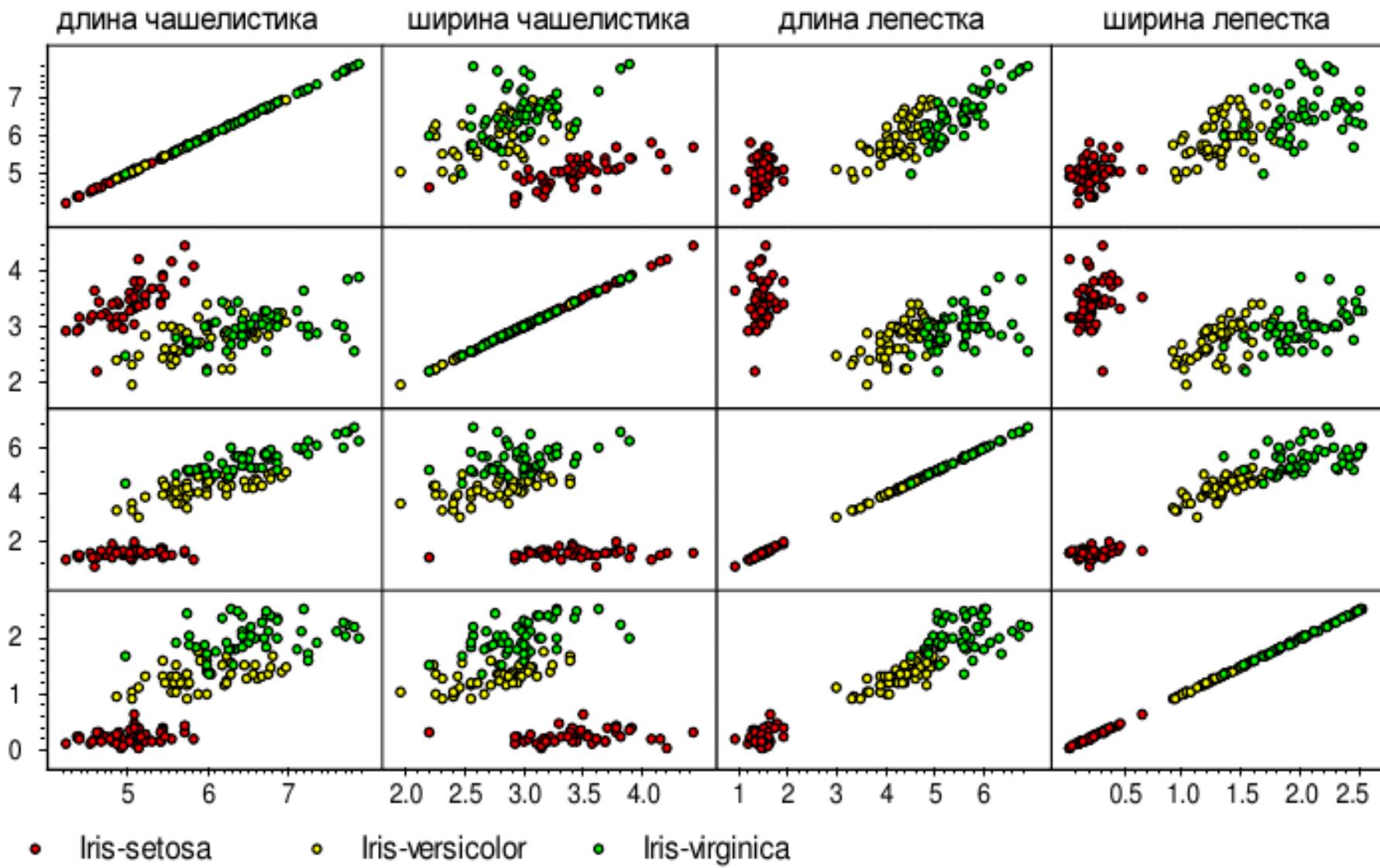
Признаки

- Компьютер всегда имеет дело с признакомым описанием объектов.
Например: пациента можно описать признаками: имя, возраст, номер полиса, жалобы, давление, температура, результаты анализов
- $f: X \rightarrow D_f$
- 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)
хорошо приближает целевую функцию

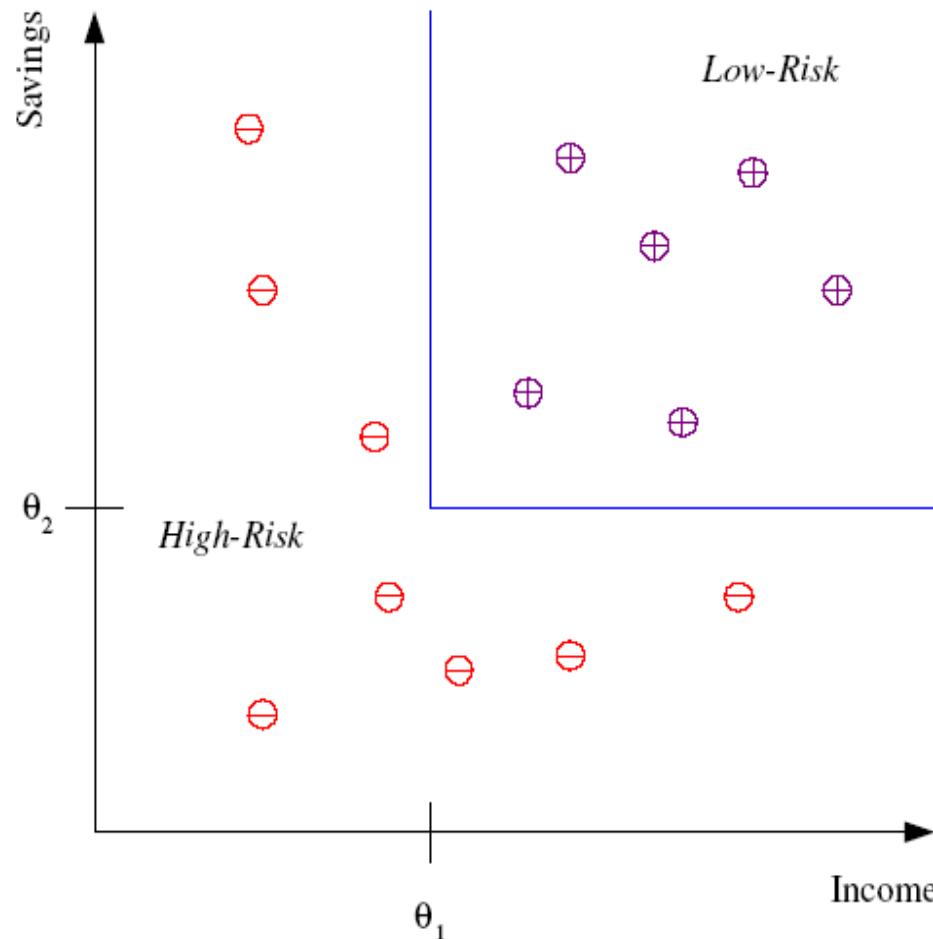
- **Алгоритм обучения**

$$\mu: (X \times Y)^\ell \rightarrow A$$

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

Пример - классификация

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

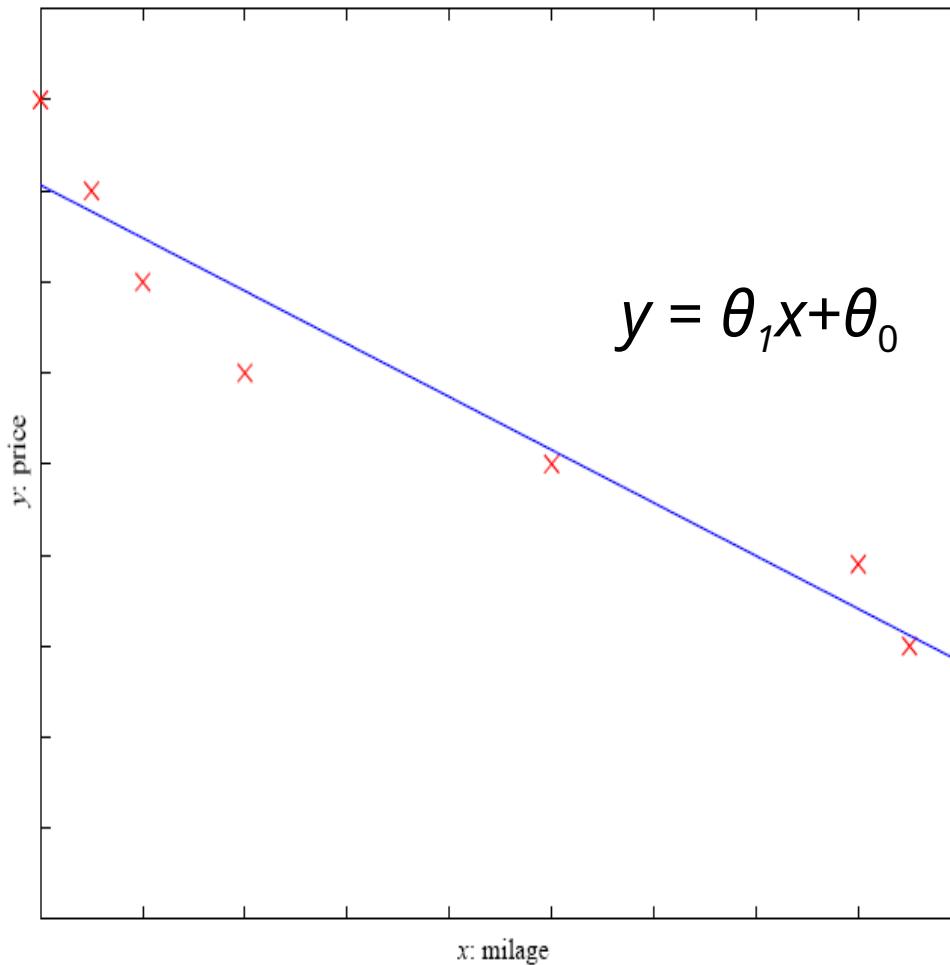


IF $income > \theta_1$, AND $savings > \theta_2$
THEN **low-risk** ELSE **high-risk**

Модель

Пример - регрессия

- y - цена автомобиля
- x – пробег
- $y = \theta_1 x + \theta_0$ – модель
- θ_0, θ_1 - параметры



Обучение на основе минимизации эмпирического риска

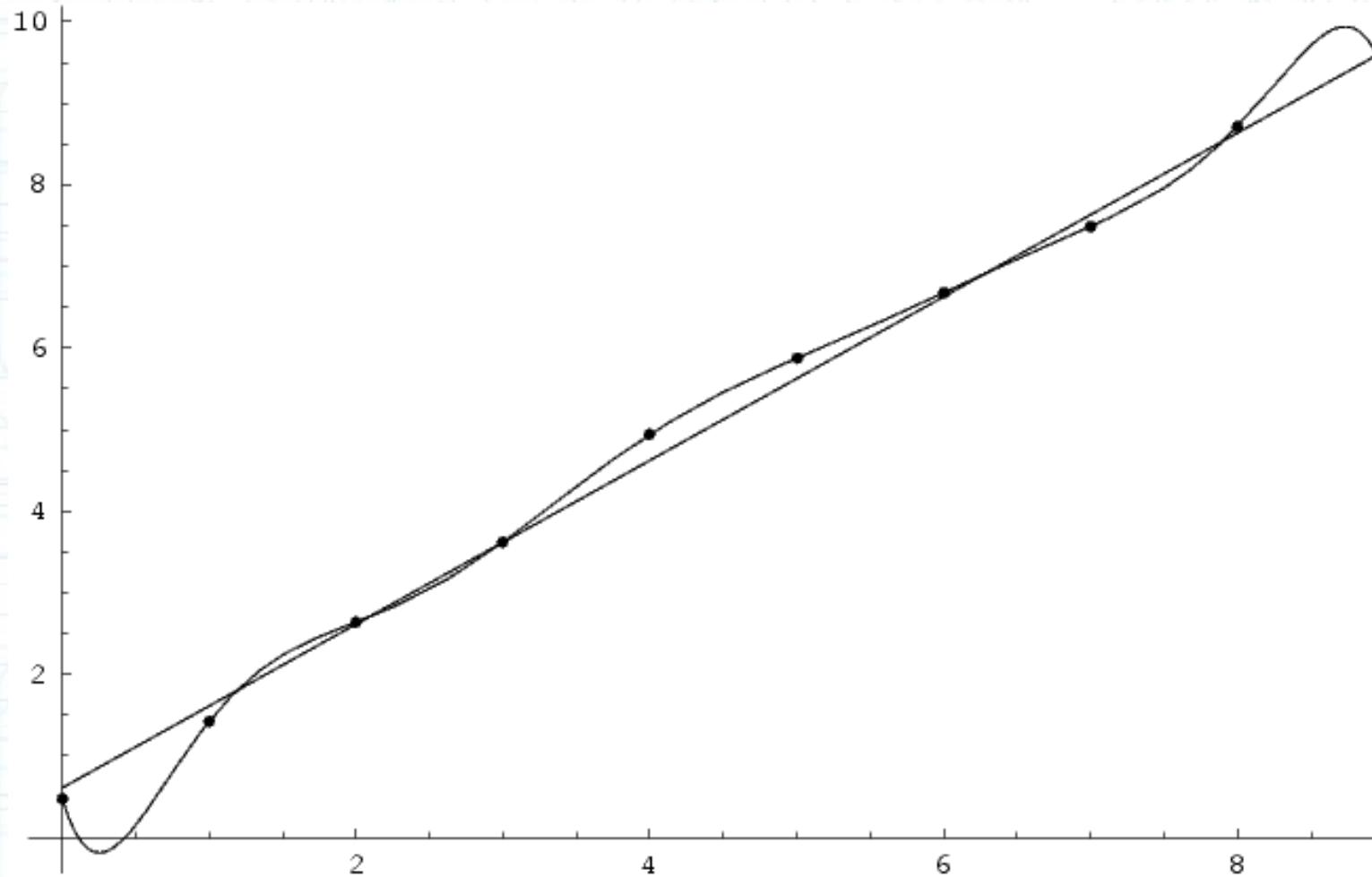
- Функция потерь $\mathcal{L}(a(x), y^*(x))$ - величина ошибки гипотезы a на объекте x .
Примеры:
 - бинарная (где используется?)
 - $\mathcal{L}(a(x), y^*(x)) = |a(x) - y^*(x)|$
 - $\mathcal{L}(a(x), y^*(x)) = (a(x) - y^*(x))^2$
- Эмпирический риск: $Q(a, X^\ell) = \frac{1}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} \mathcal{L}(a(x_i),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

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

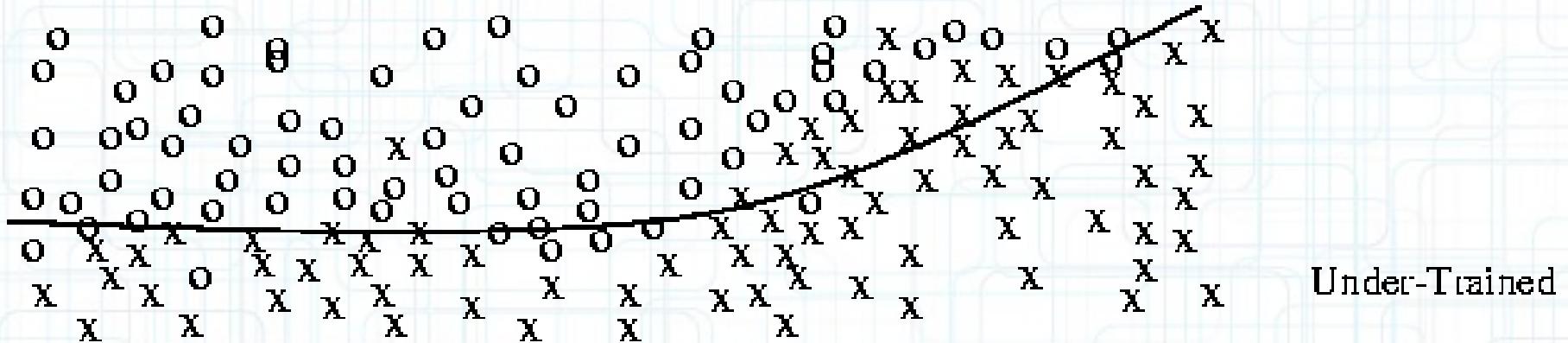
Степени обученности модели

- 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 $X \rightarrow Y$.

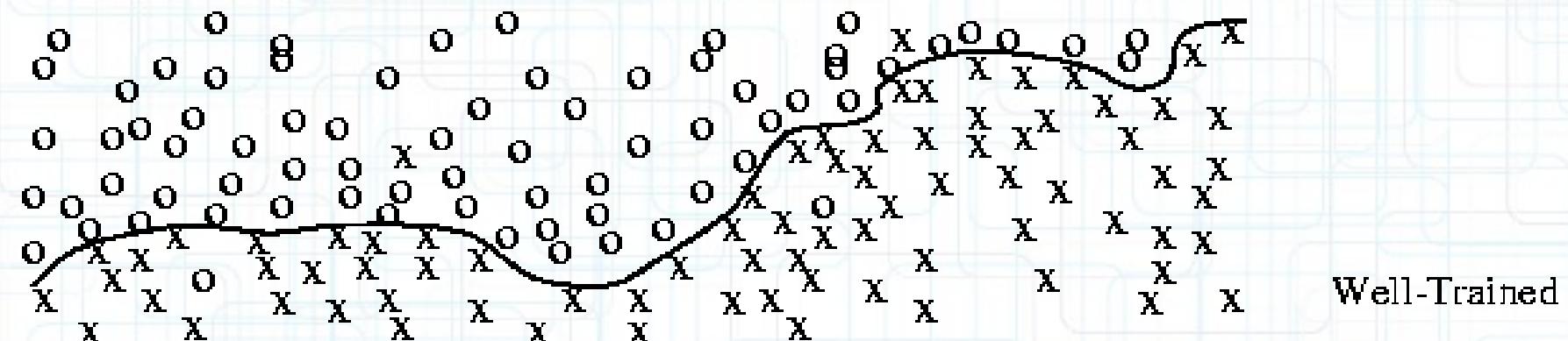
Переобучение



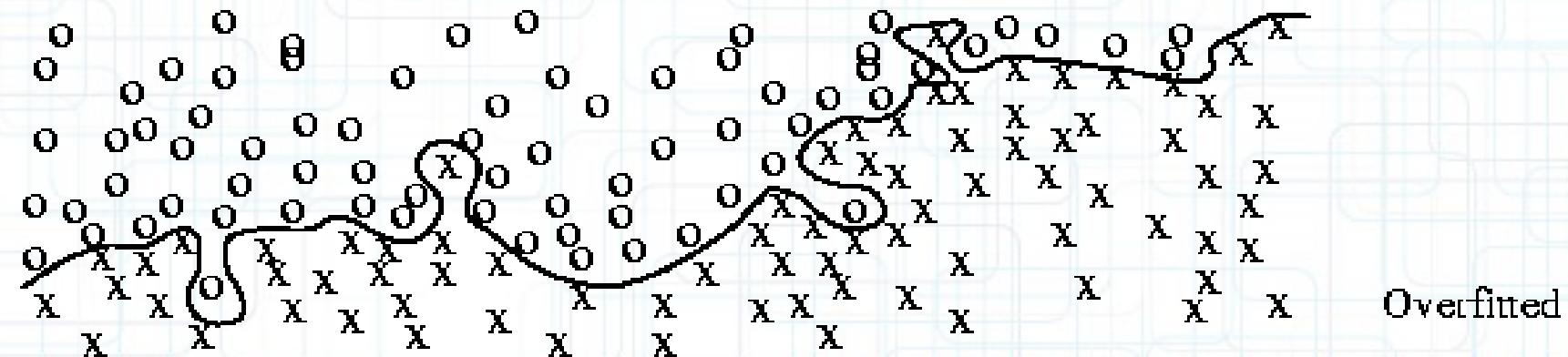
Переобучение



Under-Trained

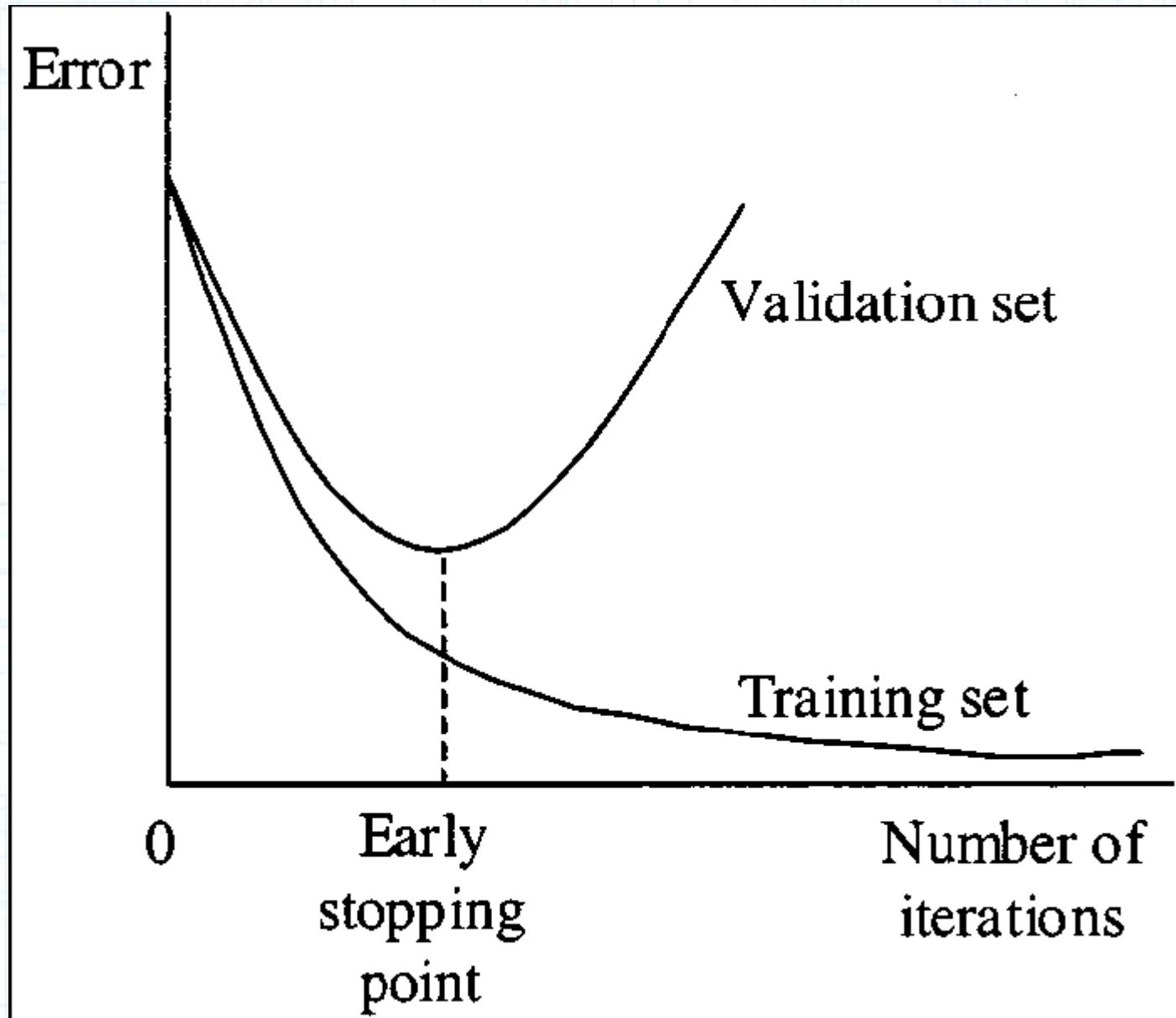


Well-Trained



Overfitted

Когда нужно заканчивать обучаться?



Контроль переобучения

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

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

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

$$\text{LOO}(\mu, X^\ell) = \frac{1}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} \mathcal{L}\left(\mu(X^\ell \setminus \{x_i\})(x_i), y_i\right)$$

- Кросс-проверка (cross-validation):

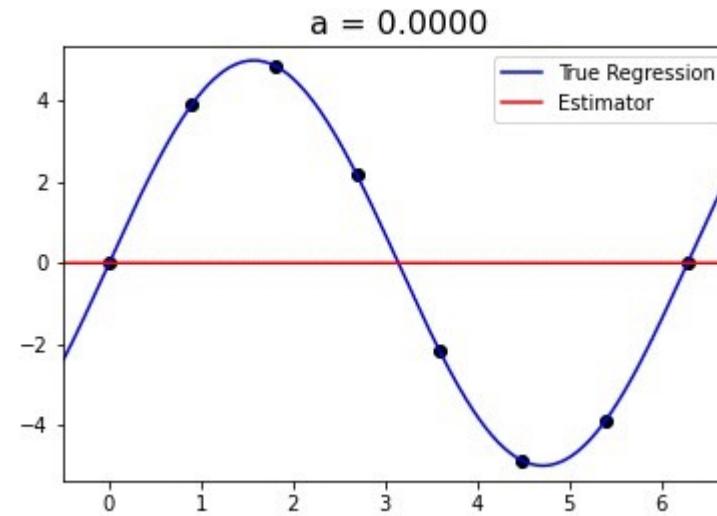
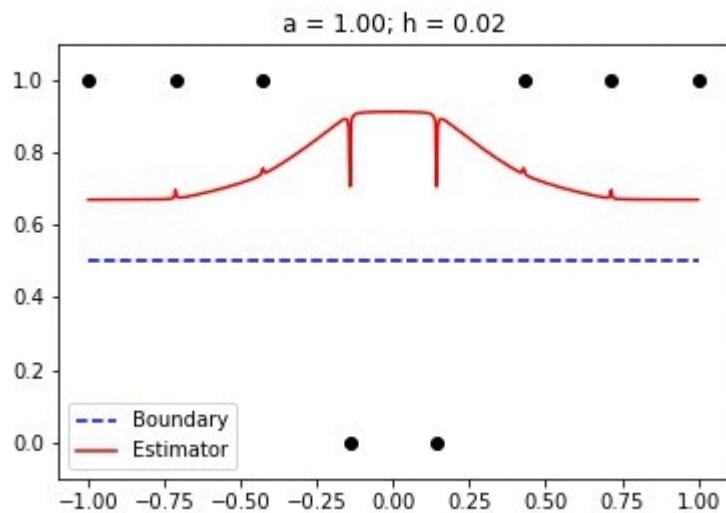
$$\text{CV}(\mu, X^L) = \frac{1}{|N|} \sum_{n \in N} Q(\mu(X_n^\ell), X_n^k) \rightarrow \min$$

- Оценка вероятности переобучения:

$$Q_\varepsilon(\mu, X^L) = \frac{1}{|N|} \sum_{n \in N} \left[Q(\mu(X_n^\ell), X_n^k) - Q(\mu(X_n^\ell), X_n^\ell) \geq \varepsilon \right] \rightarrow \min$$

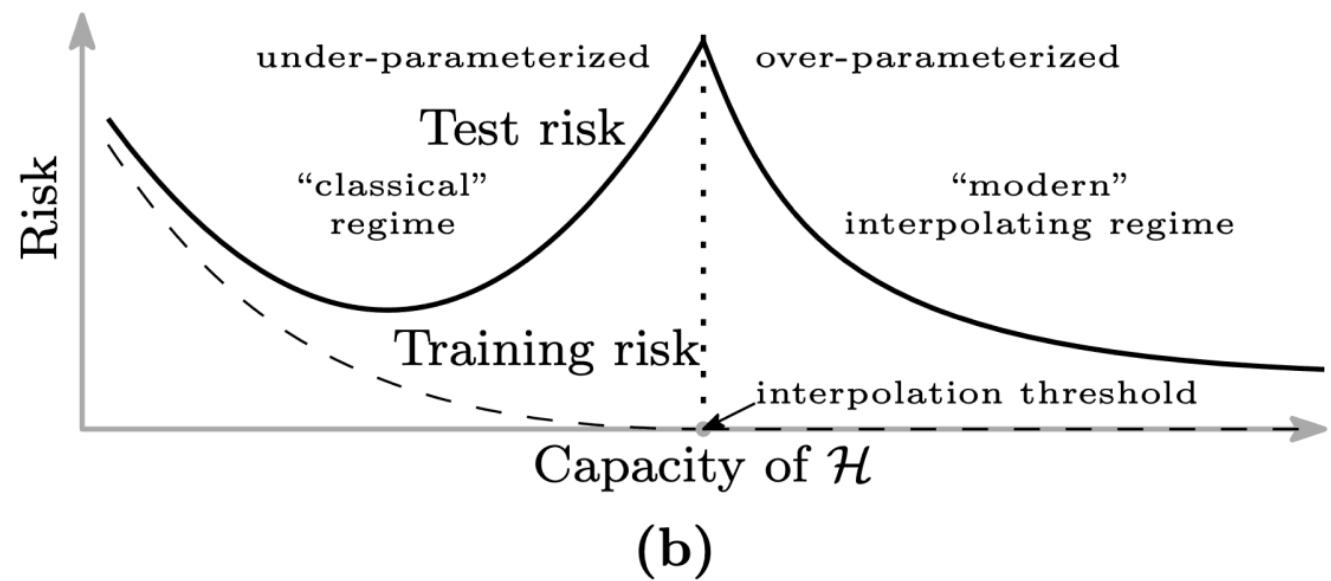
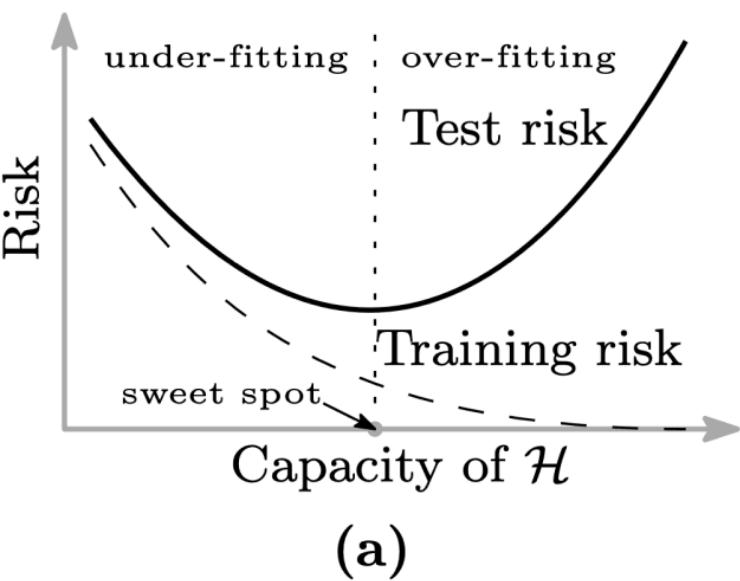
Переобучение переобучению - разница

Даже когда модель “запомнила” обучающую выборку, если ее правильно тренировать дальше, она повышает свою обобщающую способность



Кривая риска для современных алгоритмов

Double descent risk curve - после достижения interpolation threshold алгоритм умеет идеально запоминать обучающую выборку, но неограниченного роста переобучения не происходит



Ошибки кросс-валидации

- Данные, зависящие от времени, нужно разделять на "прошлое" и "будущее", а не пользоваться `train_test_split` да еще и с `shuffle=True`
- Аугментацию нужно проводить не перед, а после разделения на Train и Test (пример: генерация смесей, аугментация фото)

Ошибки кросс-валидации

- Bias - статистическое отличие Train от Test (или от данных, к которым модель собираются применять в будущем).
- Примеры:
 - обучение на фото, собранных в ясную погоду;
 - наем сотрудников в Amazon (м/ж)
 - наш опыт сбора данных по титановым покрытиям
 - конкурсы Яндекса: пробки, панорамы