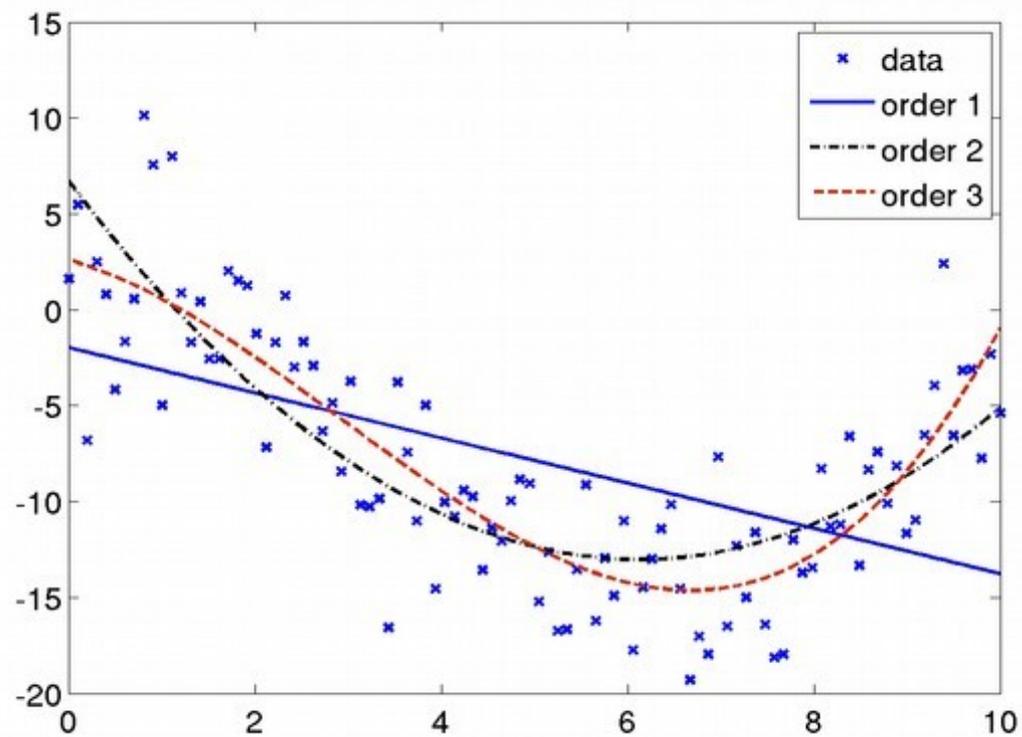


Машинное обучение

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

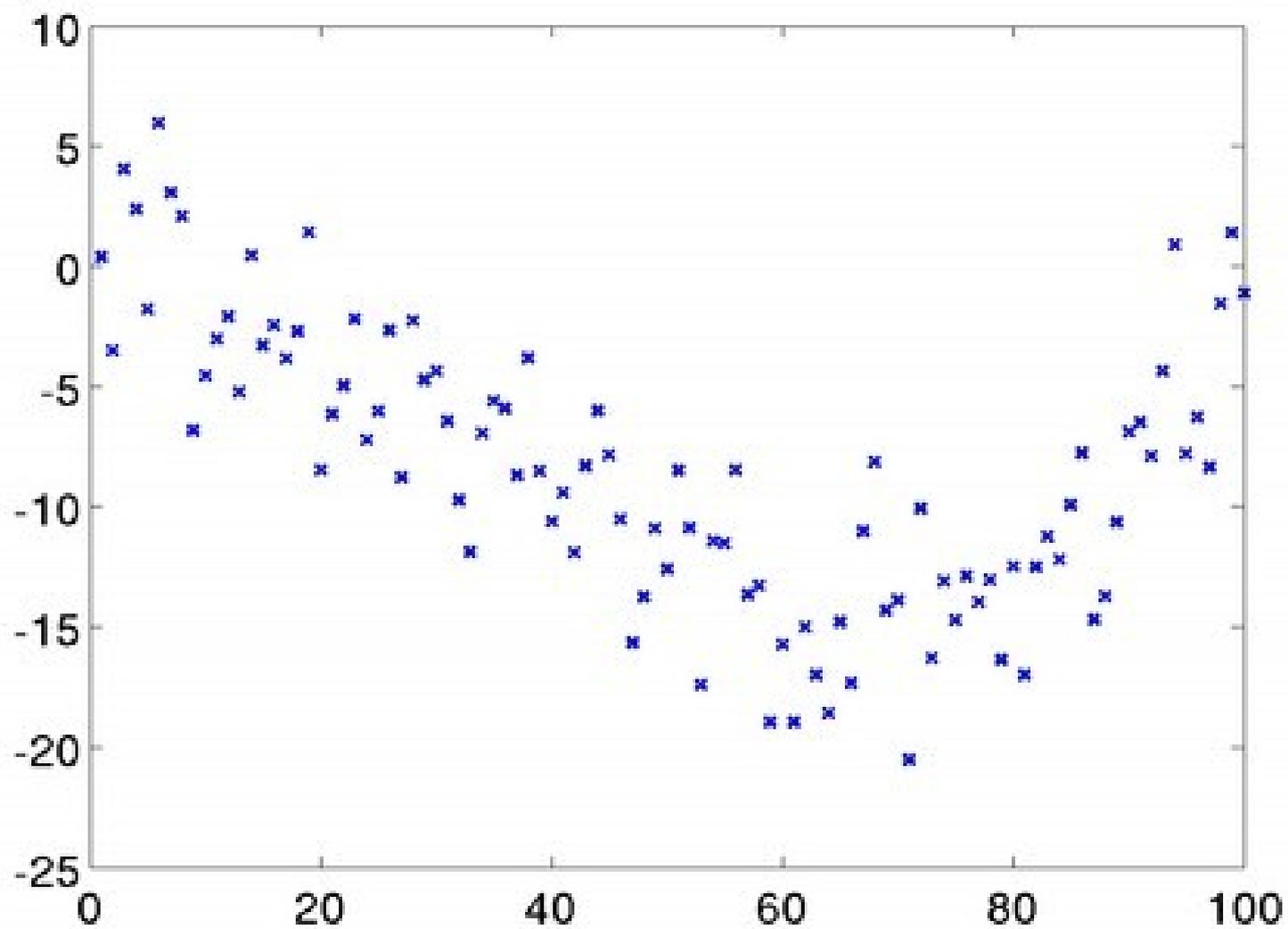
$y : X \rightarrow Y$ — неизвестная зависимость
(target function)

Дано:

$\{x_1, \dots, x_\ell\} \subset X$ — обучающая выборка
(training sample)

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

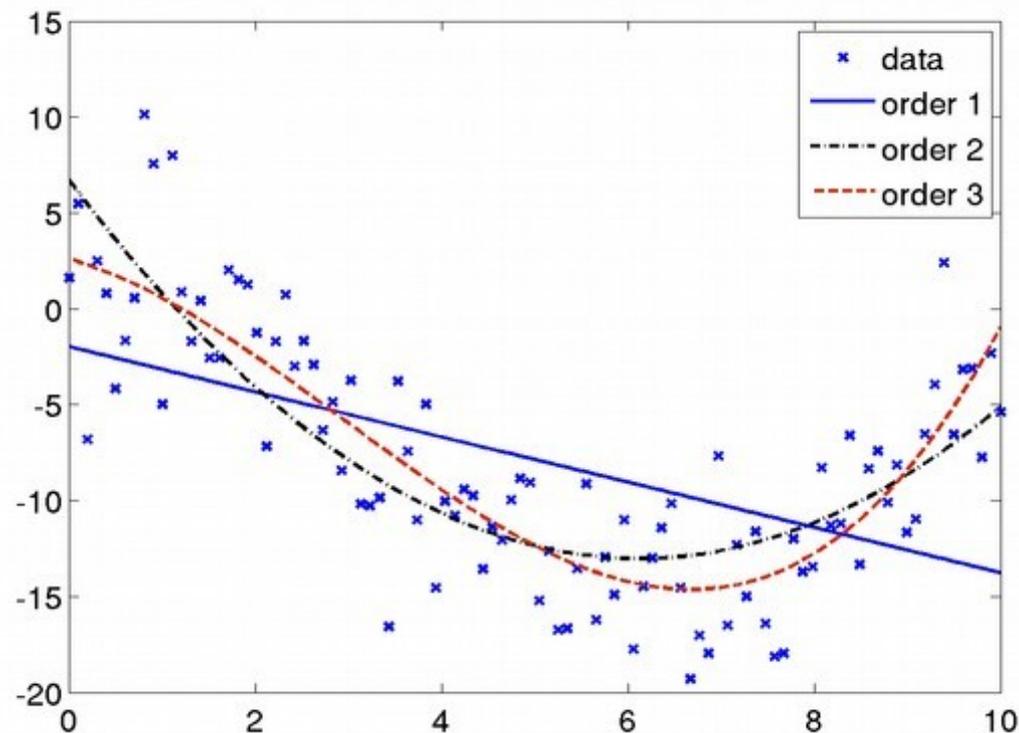
Задача обучения



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):

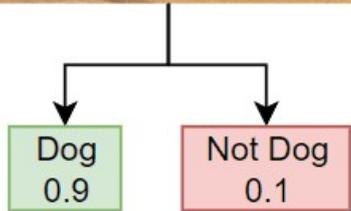
$Y = \mathbb{R}$ или $Y = \mathbb{R}^m$

Задачи ранжирования (ranking):

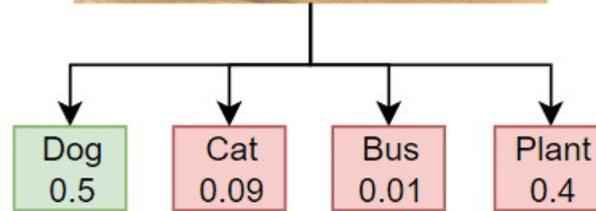
Y — конечное упорядоченное множество

Типы классификаций

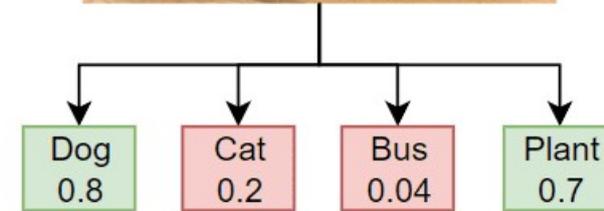
Binary Classification



Multiclass Classification

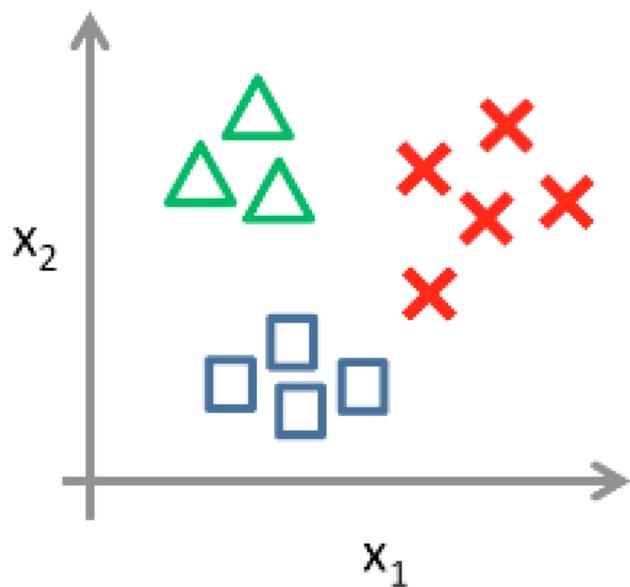


Multilabel Classification

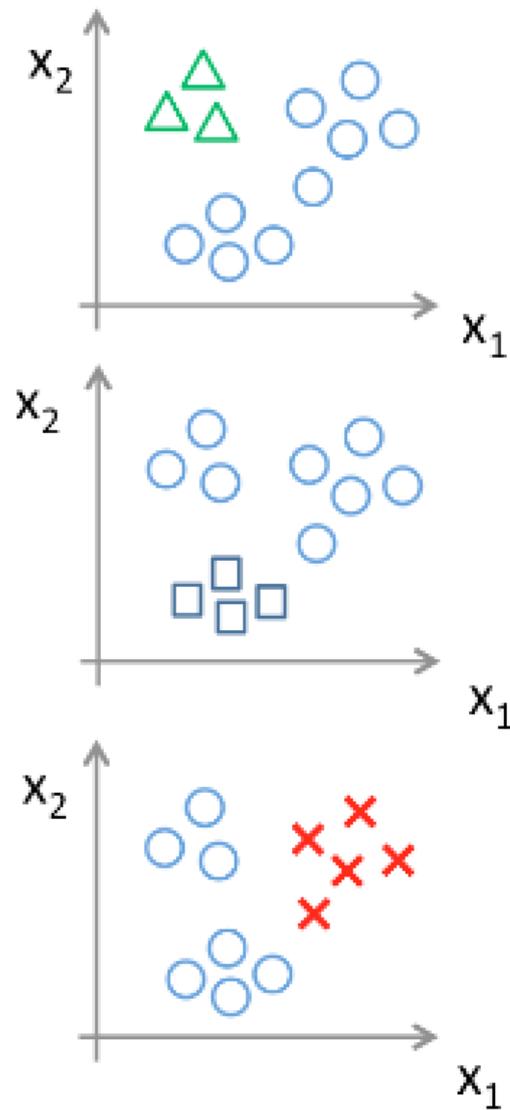
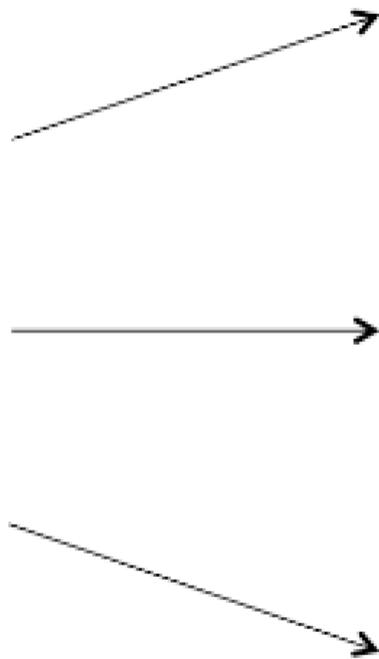


Сведение многоклассовой к бинарной классификации

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



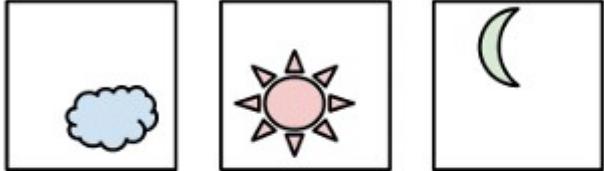
- Class 1: 
- Class 2: 
- Class 3: 



Кодирование класса

Multi-Class

Multi-Label

$C = 3$	<p>Samples</p>  <p>Labels</p> <p>[0 0 1] [1 0 0] [0 1 0]</p> <p>one-hot encoding</p>	<p>Samples</p>  <p>Labels</p> <p>[1 0 1] [0 1 0] [1 1 1]</p>
---------	--	---

Признаки

- Компьютер всегда имеет дело с признаковым описанием объектов. Например: пациента можно описать признаками: имя, возраст, номер полиса, жалобы, давление, температура, результаты анализов

- $f : X \rightarrow D_f$

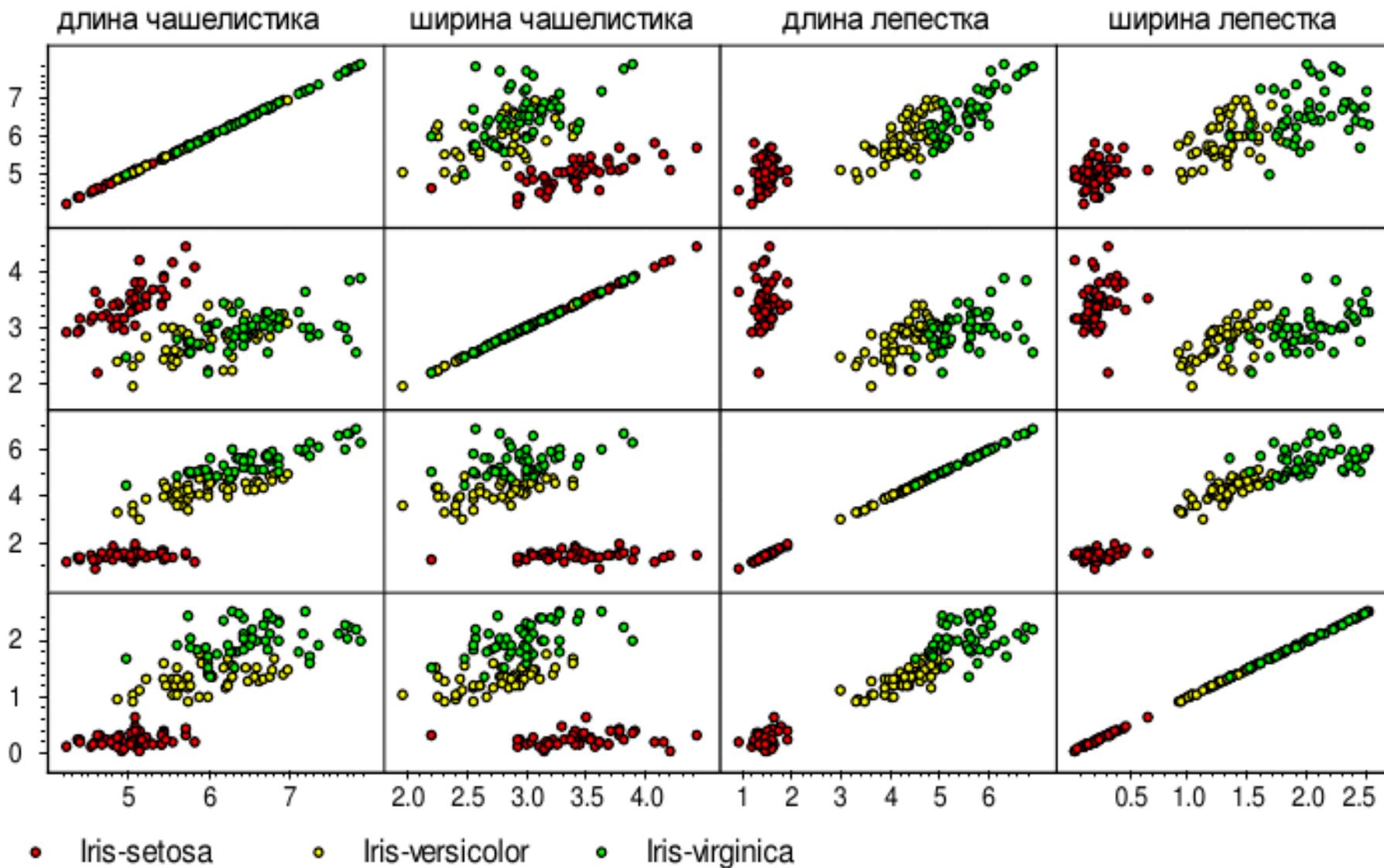
- Типы признаков:

- 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

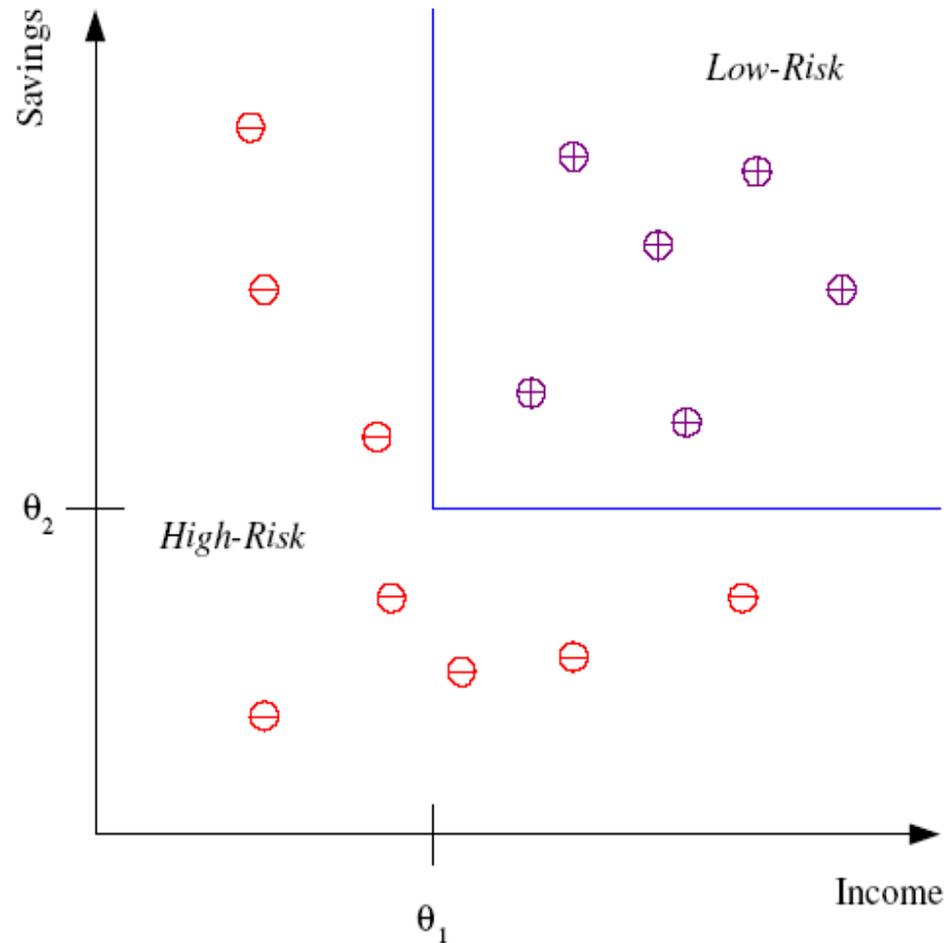
- **Алгоритм обучения**

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

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

Пример - классификация

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

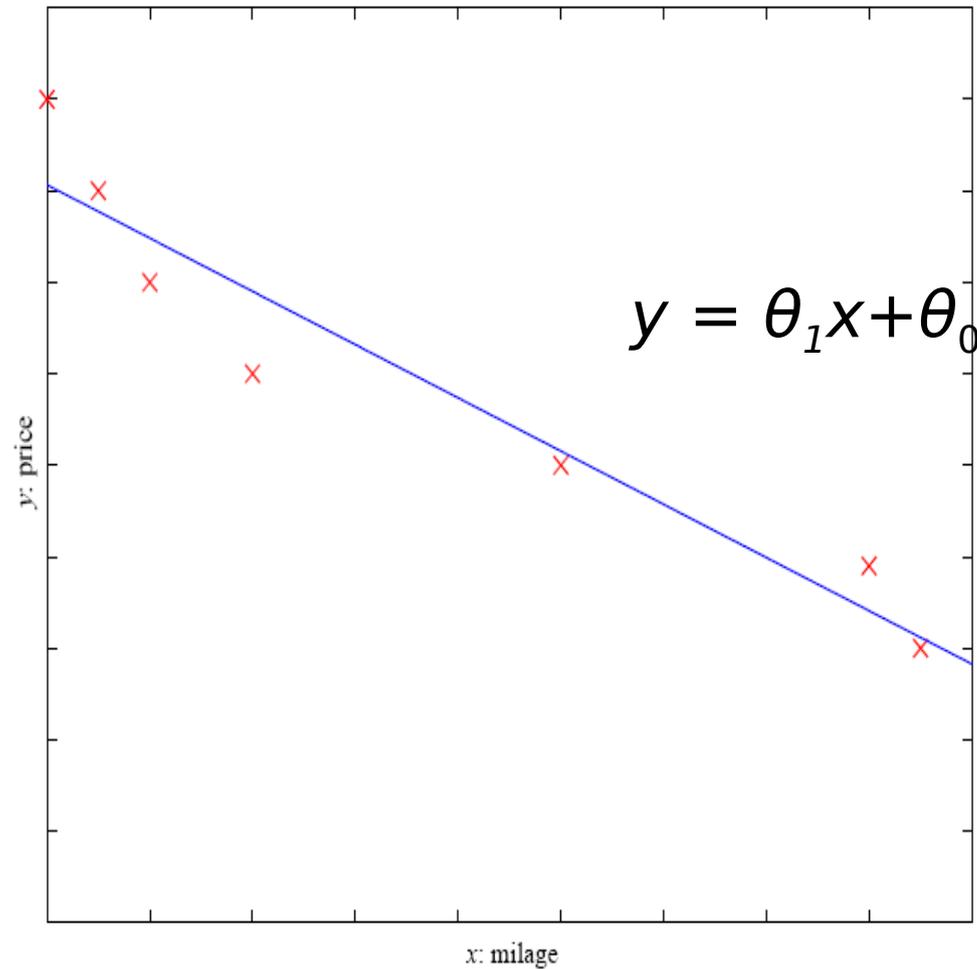


IF *income* $> \theta_1$ AND *savings* $> \theta_2$
THEN **low-risk** ELSE **high-risk**

Модель

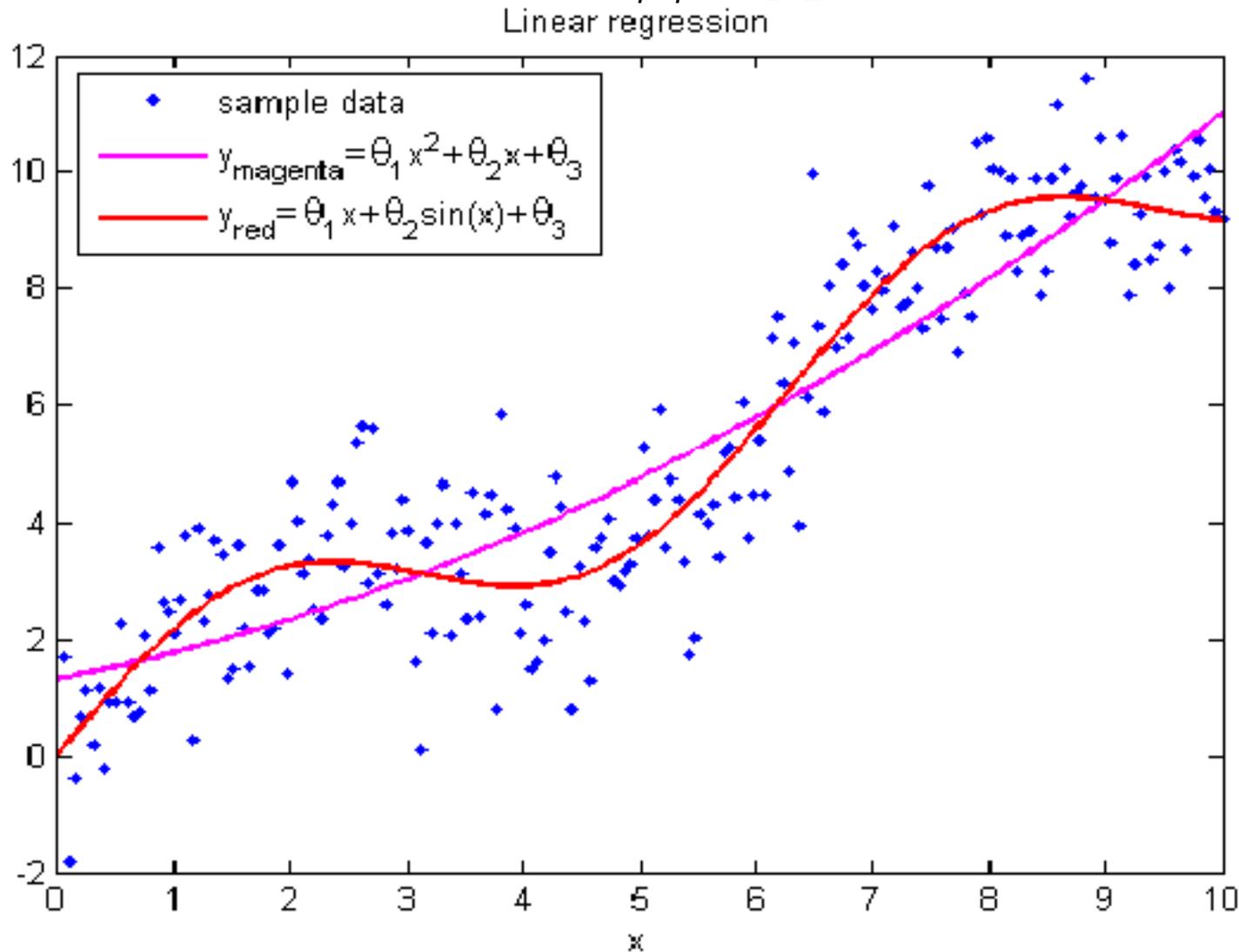
Пример - регрессия

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



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 $\mathcal{L}(a(x), y^*(x))$ - 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:

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

Проблемы реальных задач

- Одинаковые признаковые описания могут соответствовать разным объектам
- Объекты с похожими (даже одинаковыми) значениями признаков могут иметь различные значения целевой функции
- Необходимый заказчику функционал качества (прибыль компании) не оптимизируется во время обучения модели

Вероятностная постановка задачи

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

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

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:

$$a(x) = \arg \min_s E_y \mathcal{L}(s, y)$$

- 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 слайда 14

Несимметричные потери

- Пример: нужно предсказать, сколько фирма потратит на рекламу (**m** - мало 50 т.р, **B** - много 200 т.р.)
- $L(a=m, y=B) = ???$
- $L(a=B, y=m) = ???$

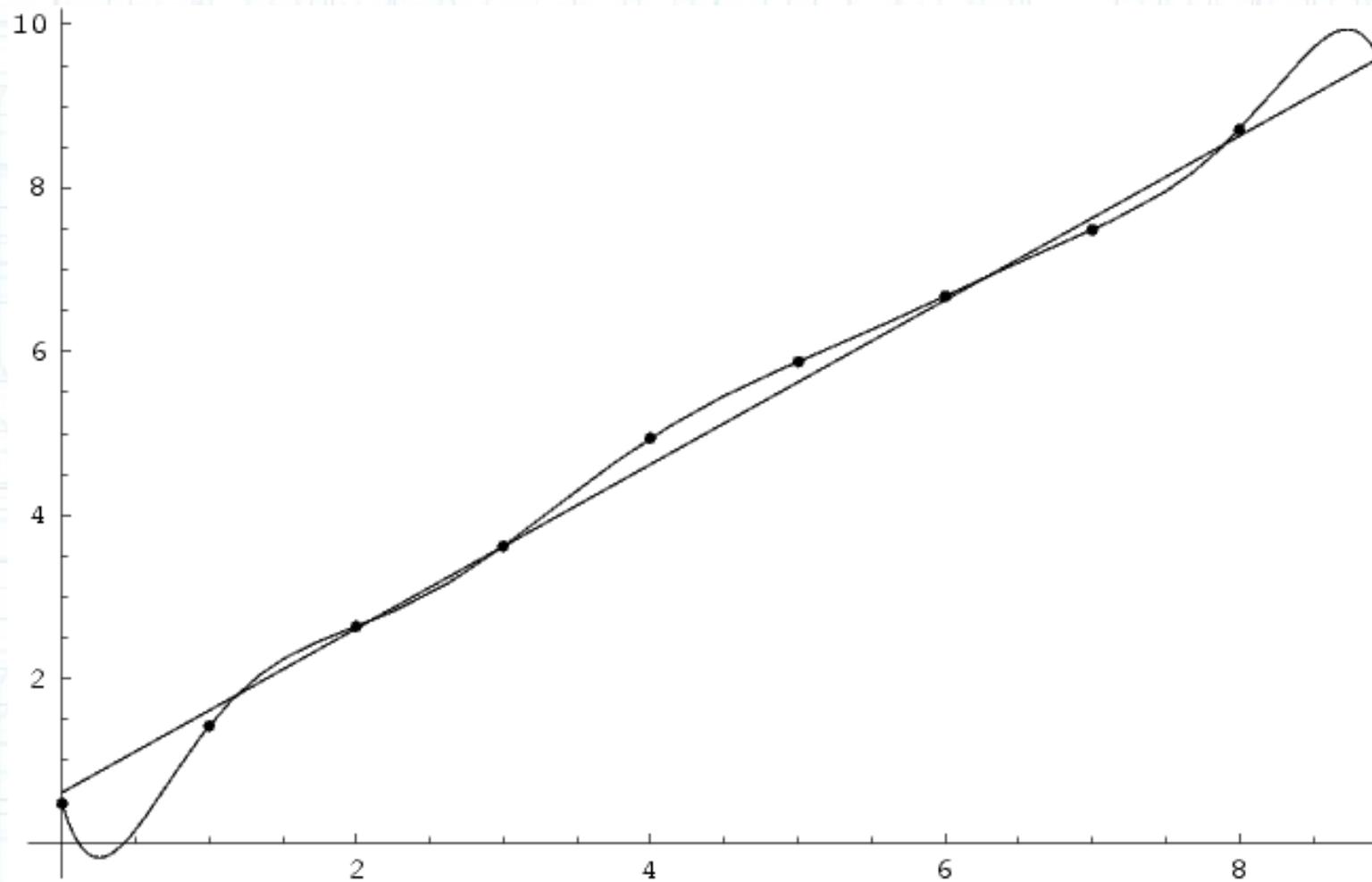
Несимметричные потери

- Пример: нужно предсказать, сколько фирма потратит на рекламу (**m** - мало 50 т.р, **B** - много 200 т.р.)
- $L(a=m, y=B)$ — не сделаем подарочную скидку и от нас могут отказаться и не заказать много рекламы
 $L(m, B) = 200\text{т.р.} * 0.8$ (вер-ть отказа)
- $L(a=B, y=m)$ — сделаем большую скидку, а закажут мало рекламы по низкой цене
 $L(B, m) = 50\text{т.р.} * 0.3$ (скидка)
- Допустим, что метод МО предсказал
 $p(m|x) = 0.9$ $p(B|x) = 0.1$
Скидку делать?

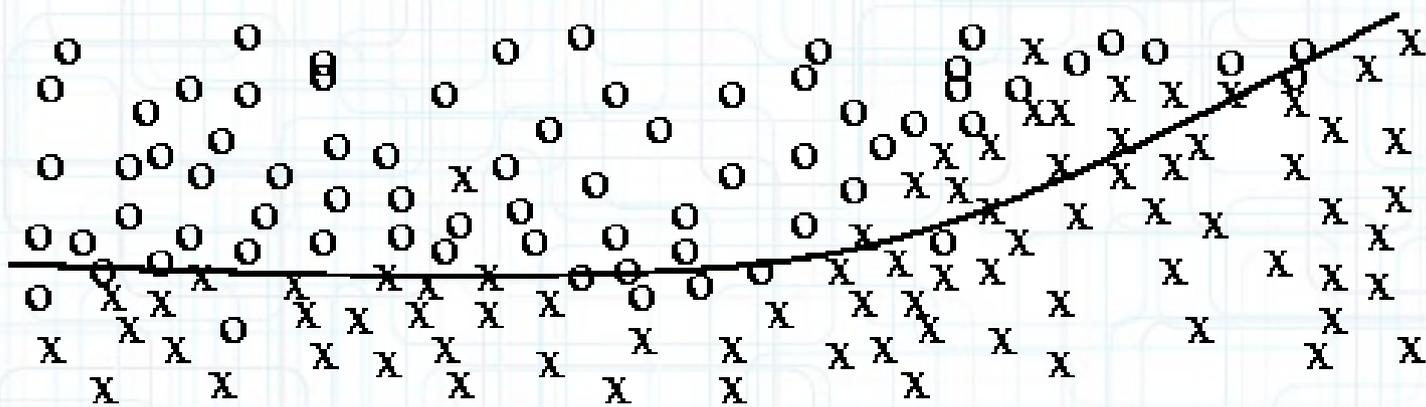
Степени обученности модели

- 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 $X \rightarrow Y$.

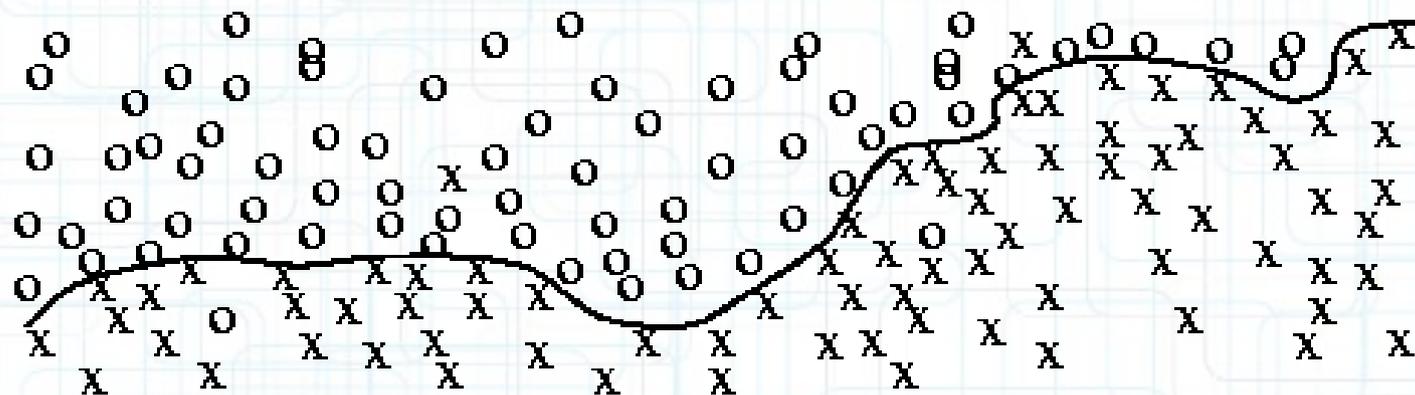
Переобучение



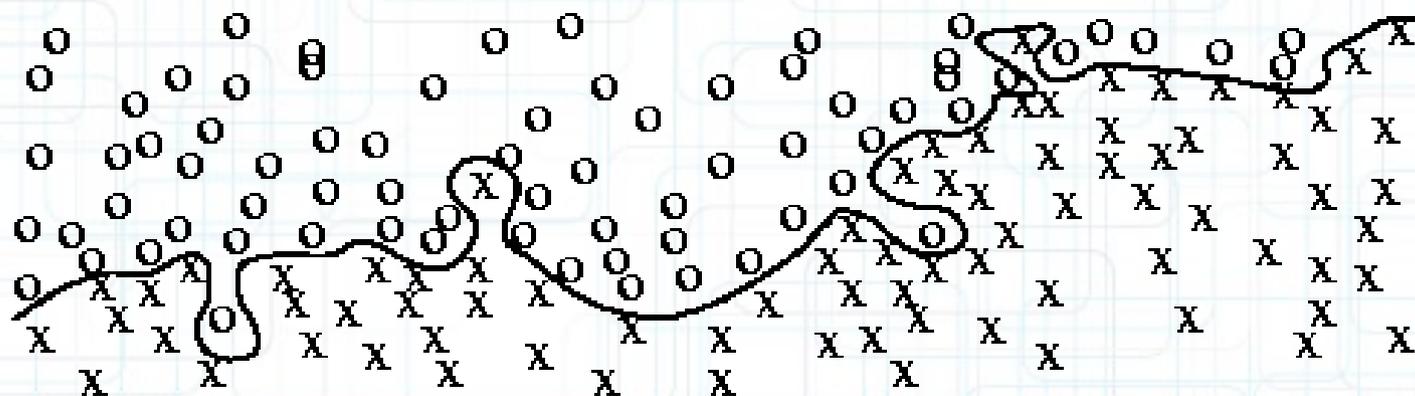
Переобучение



Under-Trained

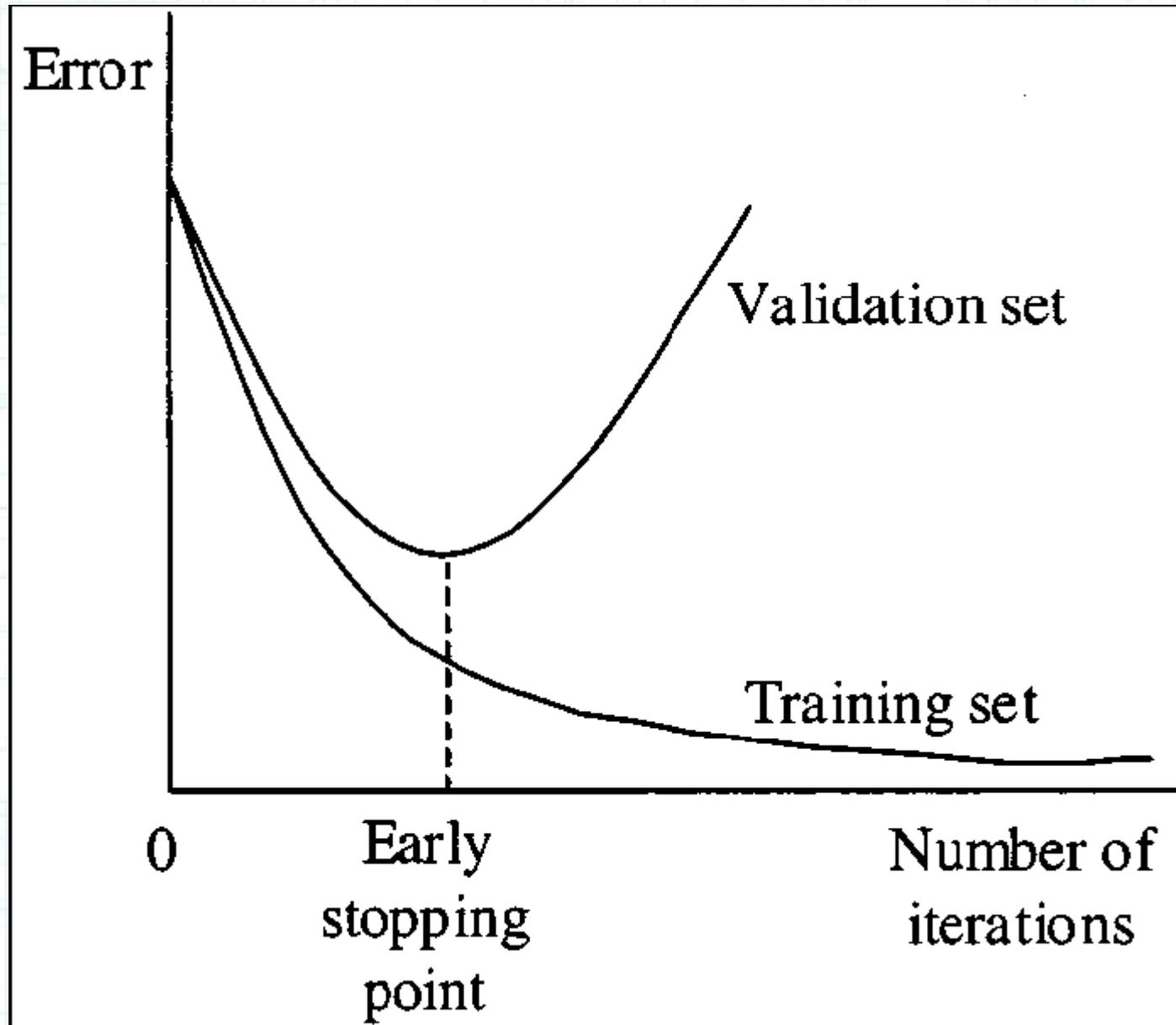


Well-Trained



Overfitted

Когда нужно заканчивать обучение?



Контроль переобучения

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

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

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

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

- 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:

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

Контрольные вопросы

- Сгенерируйте случайную выборку из 10 объектов с двумя бинарными признаками X и бинарным целевым признаком Y .
- Рассчитайте вероятности $p(y|x_1, x_2)$ для всех комбинаций значений x_1, x_2, y
- Предскажите самый вероятный класс для каждого объекта и вычислите ассигасу
- Рассчитайте вероятности $p(x_1, x_2, y)$ и вычислите правдоподобие. Насколько оно отличается от правдоподобия модели, предсказывающей всем точкам одинаковую вероятность $p(x_1, x_2, y)$?

Контрольные вопросы

- Сгенерируйте случайную выборку из 10 объектов с одним признаком X и вещественными целевыми значениями Y .
- Среди всех моделей вида $a(x) = C$, где C – целое число, найдите ту, которая доставляет минимум среднему эмпирическому риску с функцией потерь $L(a, y) = |a - y|$

Контрольные вопросы

- Сгенерируйте случайную выборку из 4-х объектов с одним признаком X и вещественными целевыми значениями Y .
- Вычислите значение среднего эмпирического риска для модели $a(x)=2x-1$, если в качестве потери определяются формулой $L(a,y) = |a-y|$

Контрольные вопросы

- Сгенерируйте случайную выборку из 7 объектов с одним бинарным признаком X и бинарными целевыми значениями Y .
- Среди всех вероятностных моделей вида $p(x=0, y=0) = C$, $p(x=1, y=0) = 0.5-C$, $p(x=0, y=1)=0.2$, $p(x=1, y=1)=0.3$ найдите самую правдоподобную

Контрольные вопросы

- Сгенерируйте случайную выборку из 10 объектов с одним бинарным признаком X и бинарными целевыми значениями Y .
- Возьмите в качестве модели предсказания класса функцию, которая всем объектам предсказывает одинаковый самый популярный класс.
- Оцените ассигасу такой модели, используя 5-кратную кросс-проверку