Машинное обучение

Задача обучения по прецедентам

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

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

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

Весь курс машинного обучения — это конкретизация:

- как задаются объекты и какими могут быть ответы;
- как строить функцию a;
- в каком смысле a должен приближать y.

Как задаются объекты. Признаковое описание

$f_j\colon X \to D_j$, $j = 1, \ldots, n$ — признаки объектов (features).

Типы признаков:

- $D_j = \{0, 1\}$ — *бинарный* признак f_j;
- $|D_j| < \infty$ — *номинальный* признак f_j;
- $|D_j| < \infty$, D_j упорядочено — *порядковый* признак f_j;
- $D_j = \mathbb{R}$ — *количественный* признак f_j.

Вектор $(f_1(x), \ldots, f_n(x))$ — *признаковое описание* объекта x.

Матрица «*объекты–признаки*» (feature data)

$$F = \|f_j(x_i)\|_{\ell \times n} = \begin{pmatrix} f_1(x_1) & \ldots & f_n(x_1) \\ \ldots & \ldots & \ldots \\ f_1(x_\ell) & \ldots & f_n(x_\ell) \end{pmatrix}$$

Как задаются ответы. Типы задач

Задачи классификации (classification):

- $Y = \{-1, +1\}$ — *классификация* на 2 класса.
- $Y = \{1, \ldots, M\}$ — на M непересекающихся классов.
- $Y = \{0, 1\}^M$ — на M классов, которые могут пересекаться.

Задачи восстановления регрессии (regression):

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

Задачи ранжирования (ranking, learning to rank):

- Y — конечное упорядоченное множество.

Предсказательная модель

Модель (predictive model) — параметрическое семейство функций

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

где $g\colon X \times \Theta \to Y$ — фиксированная функция,
Θ — множество допустимых значений параметра θ.

Пример.
Линейная модель с вектором параметров $\theta = (\theta_1, \ldots, \theta_n)$, $\Theta = \mathbb{R}^n$:

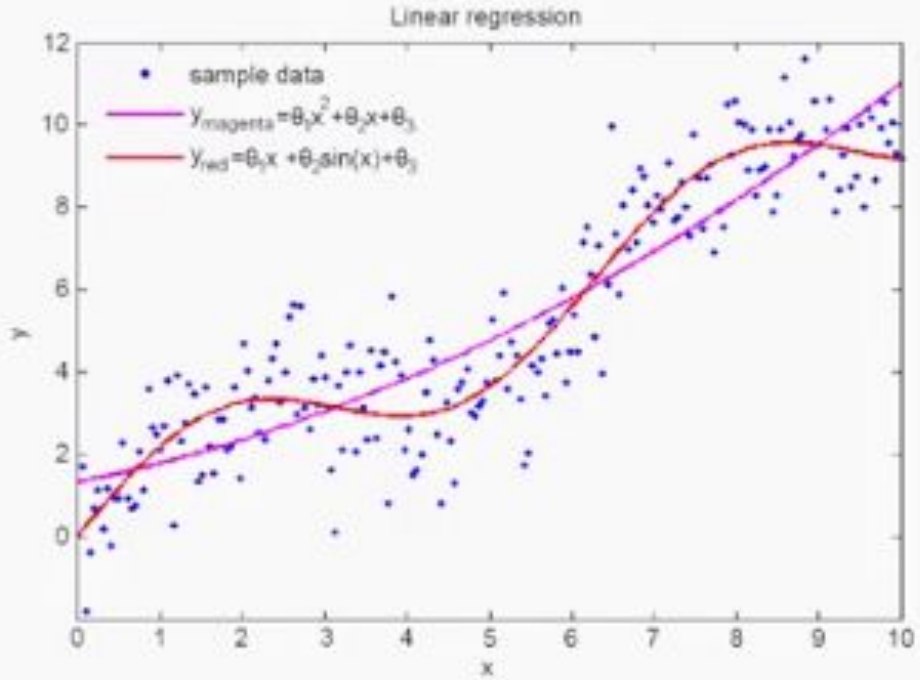
$g(x, \theta) = \sum_{j=1}^{n} \theta_j f_j(x)$ — для регрессии и ранжирования, $Y = \mathbb{R}$;

$g(x, \theta) = \operatorname{sign} \sum_{j=1}^{n} \theta_j f_j(x)$ — для классификации, $Y = \{-1, +1\}$.

Пример: задача регрессии, модельные данные

$X = Y = \mathbb{R}$, $\ell = 200$, $n = 3$ признака: $\{x, x^2, 1\}$ или $\{x, \sin x, 1\}$

$X = Y = \mathbb{R}$, $\ell = 200$, $n = 3$ признака: $\{x, x^2, 1\}$ или $\{x, \sin x, 1\}$



Вывод: признаковое описание можно задавать по-разному

Этап обучения (train):

Метод обучения (learning algorithm) $\mu\colon (X \times Y)^\ell \to A$
по выборке $X^\ell = (x_i, y_i)_{i=1}^\ell$ строит алгоритм $a = \mu(X^\ell)$:

$$\begin{pmatrix} f_1(x_1) & \dots & f_n(x_1) \\ \dots & \dots & \dots \\ f_1(x_\ell) & \dots & f_n(x_\ell) \end{pmatrix} \xrightarrow{y} \begin{pmatrix} y_1 \\ \dots \\ y_\ell \end{pmatrix} \xrightarrow{\mu} a$$

Этап применения (test):

алгоритм a для новых объектов $x'_1, \dots, x'_k$ выдаёт ответы $a(x'_i)$.

$$\begin{pmatrix} f_1(x'_1) & \dots & f_n(x'_1) \\ \dots & \dots & \dots \\ f_1(x'_k) & \dots & f_n(x'_k) \end{pmatrix} \xrightarrow{a} \begin{pmatrix} a(x'_1) \\ \dots \\ a(x'_k) \end{pmatrix}$$

$\mathscr{L}(a, x)$ — *функция потерь* (loss function) — величина ошибки алгоритма $a \in A$ на объекте $x \in X$.

Функции потерь для задач классификации:

- $\mathscr{L}(a, x) = \left[a(x) \neq y(x)\right]$ — индикатор ошибки;

Функции потерь для задач регрессии:

- $\mathscr{L}(a, x) = \left|a(x) - y(x)\right|$ — абсолютное значение ошибки;
- $\mathscr{L}(a, x) = \left(a(x) - y(x)\right)^2$ — квадратичная ошибка.

Эмпирический риск — функционал качества алгоритма a на X^ℓ:

$$Q(a, X^\ell) = \frac{1}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} \mathscr{L}(a, x_i).$$

Понятие обобщающей способности (generalization performance):

- найдём ли мы «закон природы» или *переобучимся*, то есть подгоним функцию $g(x_i, \theta)$ под заданные точки?
- будет ли $a = \mu(X^\ell)$ приближать функцию y на всём X?
- будет ли $Q(a, X^k)$ мало́ на новых данных — *контрольной выборке* $X^k = (x'_i, y'_i)_{i=1}^k$, $y'_i = y(x_i)$?

Восстановление зависимостей по эмпирическим данным

Задача восстановления зависимости $y = y(x)$ по точкам *обучающей выборки* (x_i, y_i), $i = 1, \ldots, \ell$.

Дано: векторы $x_i = (x_i^1, \ldots, x_i^n)$ — объекты обучающей выборки, $y_i = y(x_i)$ — правильные ответы, $i = 1, \ldots, \ell$:

$$\begin{pmatrix} x_1^1 & \ldots & x_1^n \\ \ldots & \ldots & \ldots \\ x_\ell^1 & \ldots & x_\ell^n \end{pmatrix} \xrightarrow{y} \begin{pmatrix} y_1 \\ \ldots \\ y_\ell \end{pmatrix}$$

Найти: функцию $a(x)$, способную давать правильные ответы на *тестовых объектах* $\tilde{x}_i = (\tilde{x}_i^1, \ldots, \tilde{x}_i^n)$, $i = 1, \ldots, k$:

$$\begin{pmatrix} \tilde{x}_1^1 & \ldots & \tilde{x}_1^n \\ \ldots & \ldots & \ldots \\ \tilde{x}_k^1 & \ldots & \tilde{x}_k^n \end{pmatrix} \xrightarrow{a?} \begin{pmatrix} a(\tilde{x}_1) \\ \ldots \\ a(\tilde{x}_k) \end{pmatrix}$$

Задачи медицинской диагностики

Объект — пациент в определённый момент времени.

Классы: диагноз или способ лечения или исход заболевания.

Примеры признаков:

- **бинарные:** пол, головная боль, слабость, тошнота, и т. д.
- **порядковые:** тяжесть состояния, желтушность, и т. д.
- **количественные:** возраст, пульс, артериальное давление, содержание гемоглобина в крови, доза препарата, и т. д.

Особенности задачи:

- обычно много «пропусков» в данных;
- как правило, недостаточный объём данных;
- нужен интерпретируемый алгоритм классификации;
- нужна оценка вероятности

Задача кредитного скоринга

Объект — заявка на выдачу банком кредита.

Классы — bad или good.

Примеры признаков:

- **бинарные:** пол, наличие телефона, и т. д.
- **номинальные:** место проживания, профессия, работодатель, и т. д.
- **порядковые:** образование, должность, и т. д.
- **количественные:** возраст, зарплата, стаж работы, доход семьи, сумма кредита, и т. д.

Особенности задачи:

- нужно оценивать вероятность дефолта $P(\text{bad})$.

Задача предсказания оттока клиентов

Объект — абонент в определённый момент времени.

Классы — уйдёт или не уйдёт в следующем месяце.

Примеры признаков:

- **бинарные:** корпоративный клиент, включение услуг, и т. д.
- **номинальные:** тарифный план, регион проживания, и т. д.
- **количественные:** длительность разговоров (входящих, исходящих, СМС, и т. д.), частота оплаты, и т. д.

Особенности задачи:

- нужно оценивать вероятность ухода;
- сверхбольшие выборки;
- не ясно, какие признаки вычислять по «сырым» данным.

Задача категоризации текстовых документов

Объект — текстовый документ.

Классы — рубрики иерархического тематического каталога.

Примеры признаков:

- **номинальные:** автор, издание, год, и т. д.
- **количественные:** для каждого термина — частота в тексте, в заголовках, в аннотации, и т. д.

Особенности задачи:

- лишь небольшая часть документов имеют метки y_i;
- документ может относиться к нескольким рубрикам;
- в каждом ребре дерева свой классификатор на 2 класса.

Задача прогнозирования стоимости недвижимости

Объект — квартира в Москве.

Примеры признаков:

- **бинарные:** наличие балкона, лифта, мусоропровода, охраны, и т. д.
- **номинальные:** район города, тип дома (кирпичный/панельный/блочный/монолит), и т. д.
- **количественные:** число комнат, жилая площадь, расстояние до центра, до метро, возраст дома, и т. д.

Особенности задачи:

- выборка неоднородна, стоимость меняется со временем;
- разнотипные признаки;
- для линейной модели нужны преобразования признаков.

Задача прогнозирования объемов продаж

Объект — тройка ⟨товар, магазин, день⟩.

Примеры признаков:

- **бинарные**: выходной день, праздник, промоакция, и т. д.
- **количественные**: объёмы продаж в предшествующие дни.

Конкурс kaggle.com: TFI Restaurant Revenue Prediction

Объект — место для открытия нового ресторана.

Предсказать — прибыль от ресторана через год.

Задача ранжирования поисковой выдачи

Объект — пара ⟨запрос, документ⟩.

Классы — релевантен или не релевантен,
разметка делается людьми — асессорами.

Примеры признаков:

- **количественные:**
  частота слов запроса в документе,
  число ссылок на документ,
  число кликов на документ: всего, по данному запросу,
  и т. д.

Особенности задачи:

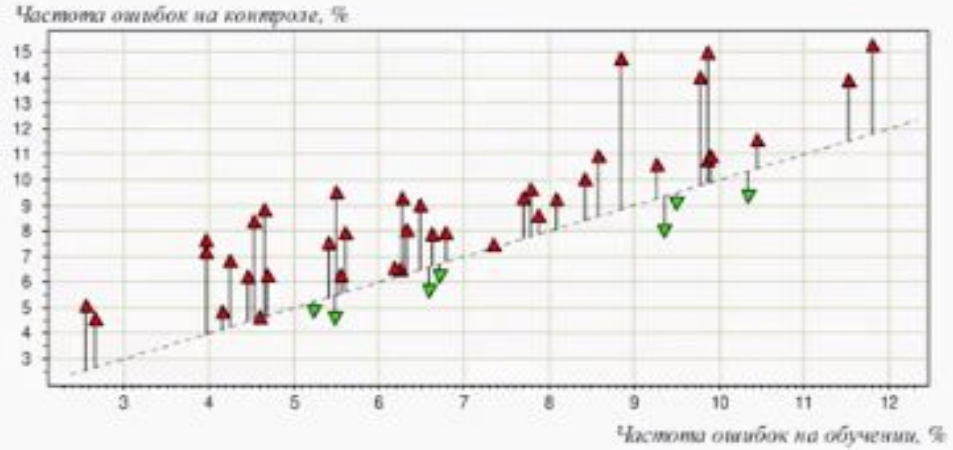
- оптимизируется не число ошибок, а качество ранжирования;
- сверхбольшие выборки;
- проблема конструирования признаков
  по сырым данным.

Задача ранжирования в рекомендательных системах

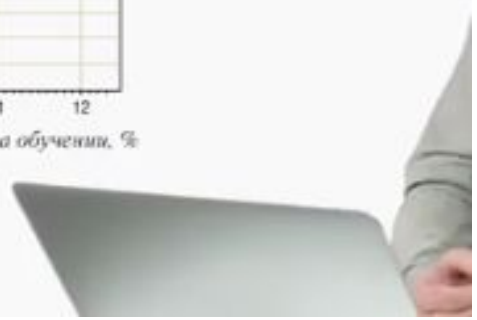
Объект — пара ⟨клиент, товар⟩
(товары — книги, фильмы, музыка).

Предсказать: вероятность покупки или рейтинг товара.

Пример. Переобучение в задаче медицинской диагностики

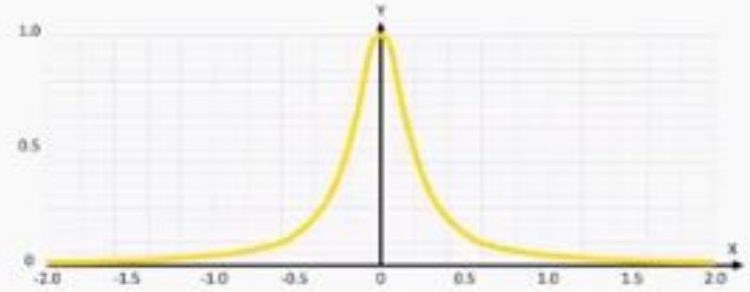


Задача предсказания отдалённого результата хирургического лечения атеросклероза.
Точки — различные алгоритмы.



Пример. Переобучение полиномиальной регрессии

Зависимость $y(x) = \dfrac{1}{1+25x^2}$ на отрезке $x \in [-2, 2]$.



Признаковое описание $x \mapsto (1, x^1, x^2, \ldots, x^n)$.

Модель полиномиальной регрессии

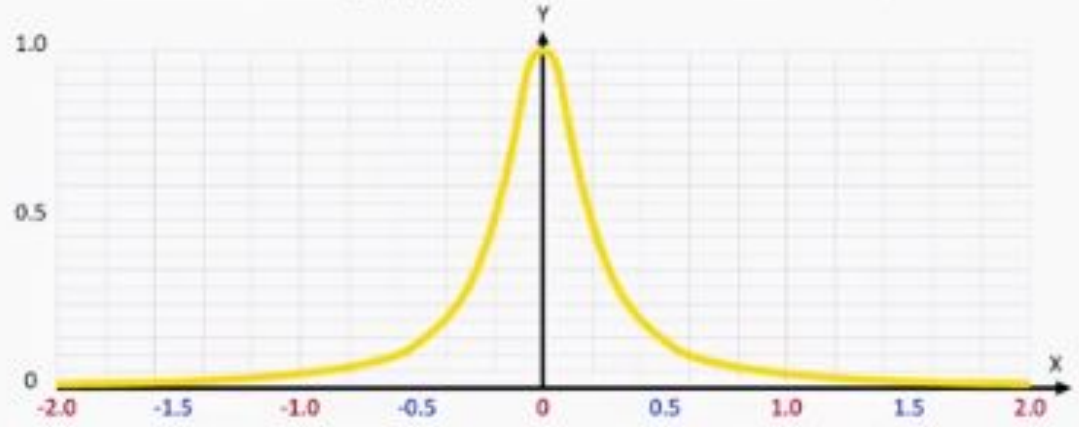
$$a(x, \theta) = \theta_0 + \theta_1 x + \cdots + \theta_n x^n \quad \text{— полином степени } n.$$

Обучение методом наименьших квадратов:

$$Q(a, X^\ell) = \sum_{i=1}^{\ell} (\theta_0 + \theta_1 x_i + \cdots + \theta_n x_i^n - y_i)^2 \to \min_{\theta_0, \ldots, \theta_n}.$$

Пример. Переобучение полиномиальной регрессии

Зависимость $y(x) = \dfrac{1}{1+25x^2}$ на отрезке $x \in [-2, 2]$.



Обучающая выборка:

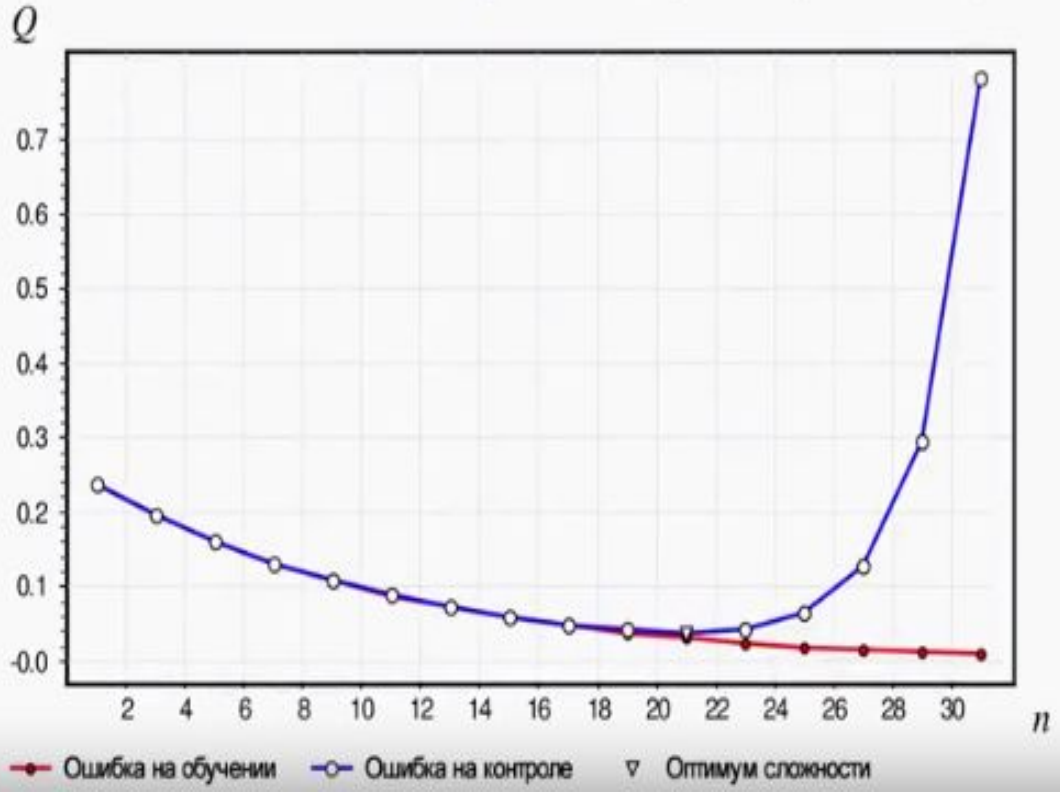
$X^\ell = \left\{ x_i = 4\frac{i-1}{\ell-1} - 2 \;\middle|\; i = 1, \ldots, \ell \right\}.$

Контрольная выборка:

$X^k = \left\{ x_i = 4\frac{i-0.5}{\ell-1} - 2 \;\middle|\; i = 1, \ldots, \ell-1 \right\}.$

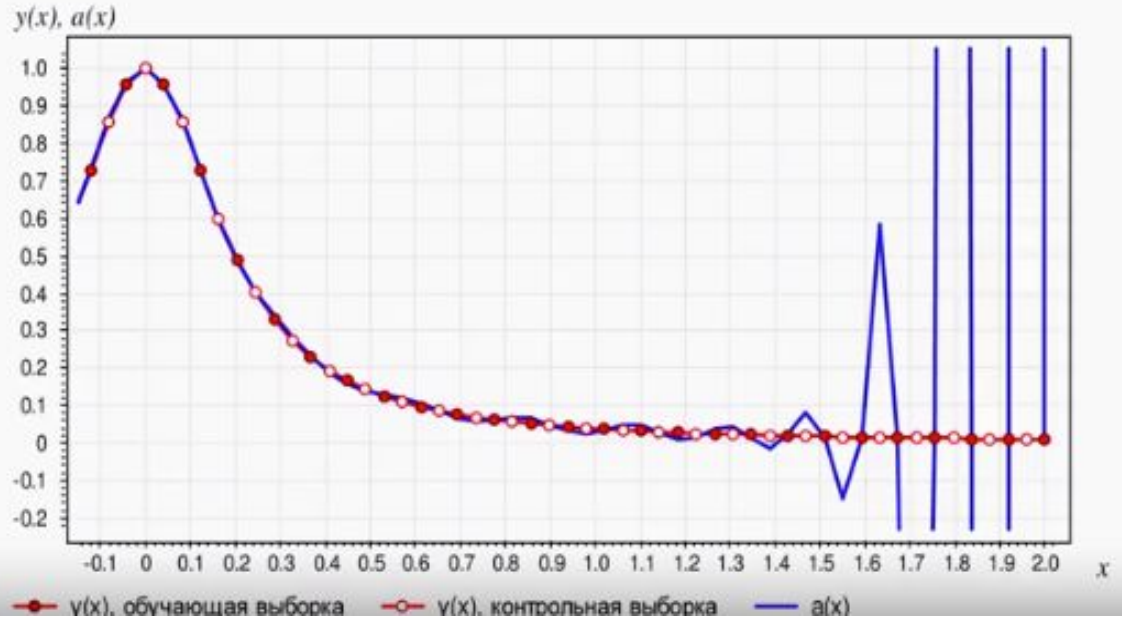
Пример переобучения: эксперимент при l = 50, n = 1,...,31

Переобучение — это когда $Q(\mu(X^\ell), X^k) \gg Q(\mu(X^\ell), X^\ell)$:



Пример переобучения: эксперимент при l = 50, n = 38

$$y(x) = \frac{1}{1 + 25x^2}; \quad a(x) \text{ — полином степени } n = 38$$



- 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), $L = \ell + 1$:

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

- Кросс-проверка (cross-validation) по N разбиениям, $X^L = X_n^\ell \sqcup X_n^k$, $L = \ell + k$:

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

Эксперименты на реальных данных

Эксперименты на конкретной прикладной задаче:

- цель — решить задачу как можно лучше
- важно понимание задачи и данных
- важно придумывать информативные признаки
- конкурсы по анализу данных: http://www.kaggle.com

Эксперименты на наборах прикладных задач:

- цель — протестировать метод в разнообразных условиях
- нет необходимости (и времени) разбираться в сути задач :(
- признаки, как правило, уже кем-то придуманы
- репозиторий UC Irvine Machine Learning Repository http://archive.ics.uci.edu/ml (308 задач, 09-02-2015)

Используются для тестирования новых методов обучения.
Преимущество — мы знаем истинную $y(x)$ (ground truth)

Эксперименты на модельных (synthetic) данных:

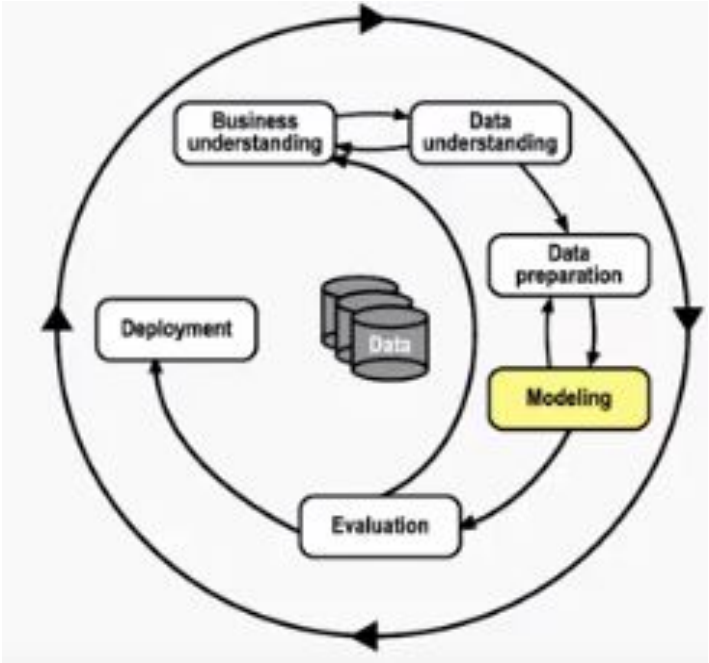
- цель — отладить метод, выявить границы применимости
- объекты x_i из придуманного распределения (часто 2D)
- ответы $y_i = y(x_i)$ для придуманной функции $y(x)$
- двумерные данные + визуализация выборки

Эксперименты на полумодельных (semi-synthetic) данных:

- цель — протестировать помехоустойчивость модели
- объекты x_i из реальной задачи (+ шум)
- ответы $y_i = a(x_i)$ для полученного решения $a(x)$ (+ шум)

CRISP-DM: CRoss Industry Standart Process for Data Mining

CRISP-DM — межотраслевой стандарт решения задач интеллектуального анализа данных



Резюме

Этапы решения задач машинного обучения:

- понимание задачи и данных;
- предобработка данных и изобретение признаков;
- построение модели;
- сведение обучения к оптимизации;
- решение проблем оптимизации и переобучения;
- оценивание качества решения;
- внедрение и эксплуатация.

Задача классификации (обучение с учителем)

Задача восстановления зависимости $y\colon X \to Y$, $|Y| < \infty$
по точкам *обучающей выборки* (x_i, y_i), $i = 1, \ldots, \ell$.

Дано: векторы $x_i = (x_i^1, \ldots, x_i^n)$ — объекты обучающей выборки,
$y_i = y(x_i)$ — классификации, ответы учителя, $i = 1, \ldots, \ell$:

$$\begin{pmatrix} x_1^1 & \ldots & x_1^n \\ \ldots & \ldots & \ldots \\ x_\ell^1 & \ldots & x_\ell^n \end{pmatrix} \xrightarrow{y^*} \begin{pmatrix} y_1 \\ \ldots \\ y_\ell \end{pmatrix}$$

Найти: функцию $a(x)$, способную классифицировать объекты произвольной *тестовой выборки* $\tilde{x}_i = (\tilde{x}_i^1, \ldots, \tilde{x}_i^n)$, $i = 1, \ldots, k$:

$$\begin{pmatrix} \tilde{x}_1^1 & \ldots & \tilde{x}_1^n \\ \ldots & \ldots & \ldots \\ \tilde{x}_k^1 & \ldots & \tilde{x}_k^n \end{pmatrix} \xrightarrow{a?} \begin{pmatrix} a(\tilde{x}_1) \\ \ldots \\ a(\tilde{x}_k) \end{pmatrix}$$

Определение бинарного решающего дерева

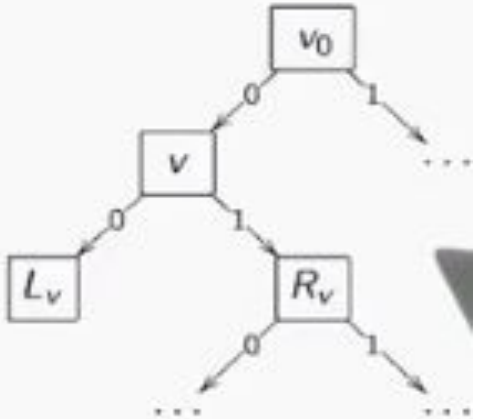
Бинарное решающее дерево — алгоритм классификации $a(x)$, задающийся бинарным деревом:

1) $\forall v \in V_{\text{внутр}} \rightarrow$ предикат $\beta_v : X \to \{0,1\}$, $\beta_v \in \mathscr{B}$,

2) $\forall v \in V_{\text{лист}} \rightarrow$ имя класса $c_v \in Y$,

где $\mathscr{B}$ — множество бинарных признаков или предикатов (например, вида $\beta(x) = [x^j \geqslant \theta_j]$, $x^j \in \mathbb{R}$)

```
1: v := v0;
2: пока v ∈ V_внутр
3:     если β_v(x) = 1 то
4:         переход вправо: v := R_v;
5:     иначе
6:         переход влево: v := L_v;
7: вернуть c_v.
```



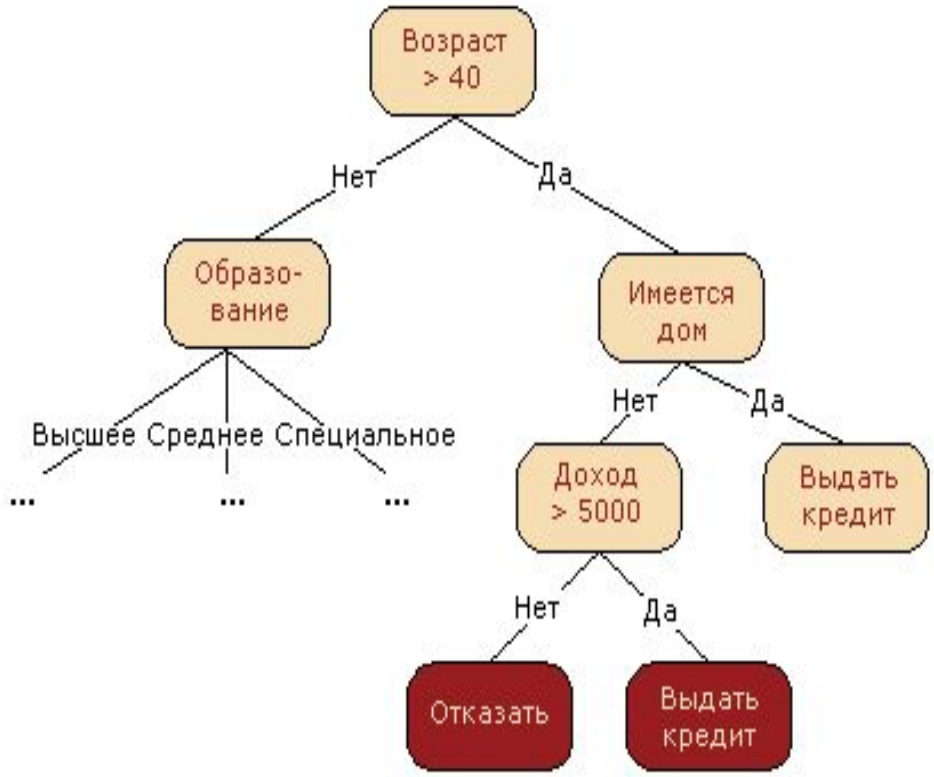

Возраст
> 40
Нет
Да
Образо-
вание
Имеется
дом
Высшее Среднее Специальное
...
...
...
Нет
Да
Доход
> 5000
Выдать
кредит
Нет
Да
Отказать
Выдать
кредит

Рисунок 1