Мат.модели машинного обучения: вводная лекция

Воронцов Константин Вячеславович
k.v.vorontsov@phystech.edu
http://www.MachineLearning.ru/wiki?title=User:Vokov

Этот курс доступен на странице вики-ресурса
http://www.MachineLearning.ru/wiki
«Машинное обучение (курс лекций, К.В.Воронцов)»

МФТИ • 6 сентября 2024

Эпиграф №1

«Четвёртая технологическая революция строится
на вездесущем и мобильном Интернете, искусственном
интеллекте и машинном обучении» (2016)

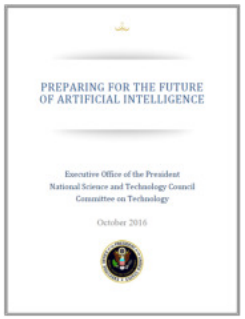
Клаус Мартин Шваб,
президент Всемирного экономического форума

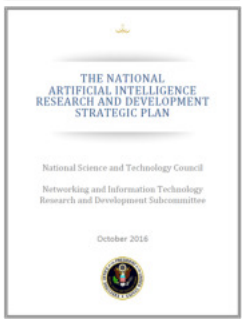
Мир наконец поверил в искусственный интеллект
Машинное обучение — новый двигатель прогресса
Машинное обучение — технология, которая меняет мир

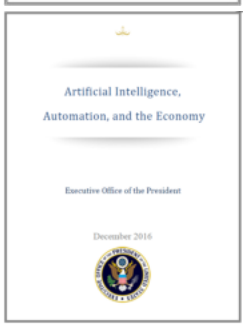
Эпиграф №2 (отчёты Белого Дома США, октябрь 2016)

«Nations with the strongest presence in AI R&D will establish leading positions in the automation of the future»

- Цифровая и распределённая экономика
- Автоматизация и сокращение издержек
- Автономный транспорт и роботизация
- Оптимизация логистики и цепей поставок
- Оптимизация энергетических сетей (Energy Tech)
- Автоматизация банковских услуг (Fin Tech)
- Автоматизация юридических услуг (Legal Tech)
- Автоматизация образовательных услуг (Ed Tech)
- Автоматизация работы с кадрами (HR Tech)
- Персональная медицина (Med Tech)
- Автоматизация в сельском хозяйстве (Agro Tech)
- Автономные системы вооружений (Mil Tech)







Preparing for the Future of Artificial Intelligence. NSTC. 2016.

Содержание

1. **Основные понятия и обозначения**
   - Данные в задачах обучения по прецедентам
   - Параметрические модели и алгоритмы обучения
   - Обучение и переобучение
2. **Примеры прикладных задач**
   - Задачи классификации
   - Задачи регрессии
   - Задачи ранжирования
3. **О методологии машинного обучения**
   - Особенности данных
   - Стандарт CRISP-DM и взгляд на эволюцию ИИ
   - Эксперименты на синтетических и реальных данных

Оптимизационная постановка задач машинного обучения

X — пространство *объектов*
Y — множество *ответов* (предсказаний / оценок / прогнозов)
$y(x)$, $y\colon X \to Y$ — неизвестная зависимость (target function)

Дано:
$\{x_1, \ldots, x_\ell\} \subset X$ — *обучающая выборка* (training sample)
$a(x, w)$, $a\colon X \times W \to Y$ — параметрическая модель зависимости

Найти:
$w \in W$ — вектор параметров модели такой, что $a(x, w) \approx y(x)$

Критерий минимизации эмпирического риска:

$$\sum_{i=1}^{\ell} \mathscr{L}(w, x_i) \to \min_w \quad \text{(empirical risk minimization, ERM)}$$

где $\mathscr{L}(w, x)$ — *функция потерь* (loss function) — тем больше, чем сильнее $a(x, w)$ отклоняется от правильного ответа $y(x)$

Как задаются объекты. Векторное признаковое описание

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

Скалярные (одномерные) 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 $\big(f_1(x), \ldots, f_n(x)\big)$ — *признаковое описание* объекта x

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

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

Как задаются объекты. Сложно структурированные данные

Сложные типы признаков:

- текст, символьная дискретнозначная последовательность
- сигнал, непрерывнозначная последовательность
- изображение, 2D-матрица
- многозональное изображение, 3D-матрица
- видео, последовательность изображений
- транзакции, взаимодействия с другими объектами
- всё это вместе — мультимодальные данные

Выделение признаков (feature extraction)

- вычисление признаков по формулам (feature engineering)
- генерация векторов признаков (feature generation):
  $f(x, w')$, $f : X \times W' \to \mathbb{R}^n$ — модель векторизации объекта
  $\sum_{i=1}^{\ell} \mathscr{L}\big(w, f(x_i, w')\big) \to \min_{w,w'}$ — обучение векторизатора

Как задаются ответы. Типы задач

Задачи обучения с учителем (supervised learning):

- заданы «ответы учителя» $y_i = y(x_i)$ на обучающих x_i

— задачи классификации (classification, Y — class labels):

- $Y = \{-1, +1\}$ — на 2 класса (binary classification)
- $Y = \{1, \ldots, M\}$ — на много классов (multiclass c.)
- $Y = \{0, 1\}^M$ — на пересекающиеся классы (multilabel c.)

— задачи ~~восстановления~~ регрессии (regression):

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

— задачи ранжирования (ranking, learning to rank):

- Y — конечное упорядоченное множество

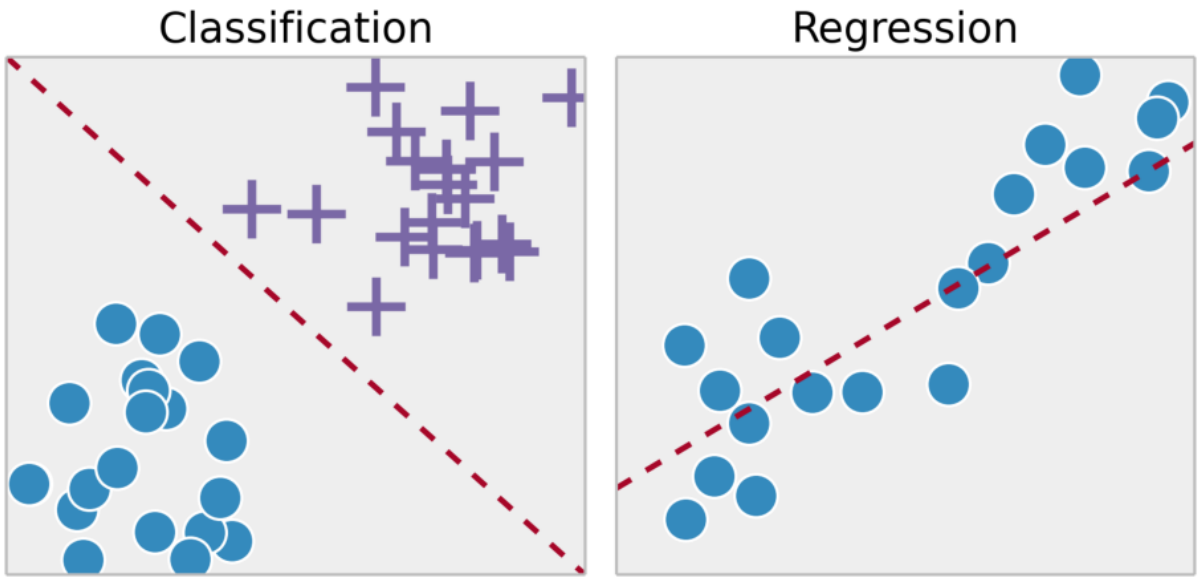
Задачи обучения без учителя (unsupervised learning):

- ответов нет, требуется что-то делать с самими объектами

Статистическое (машинное) обучение с учителем

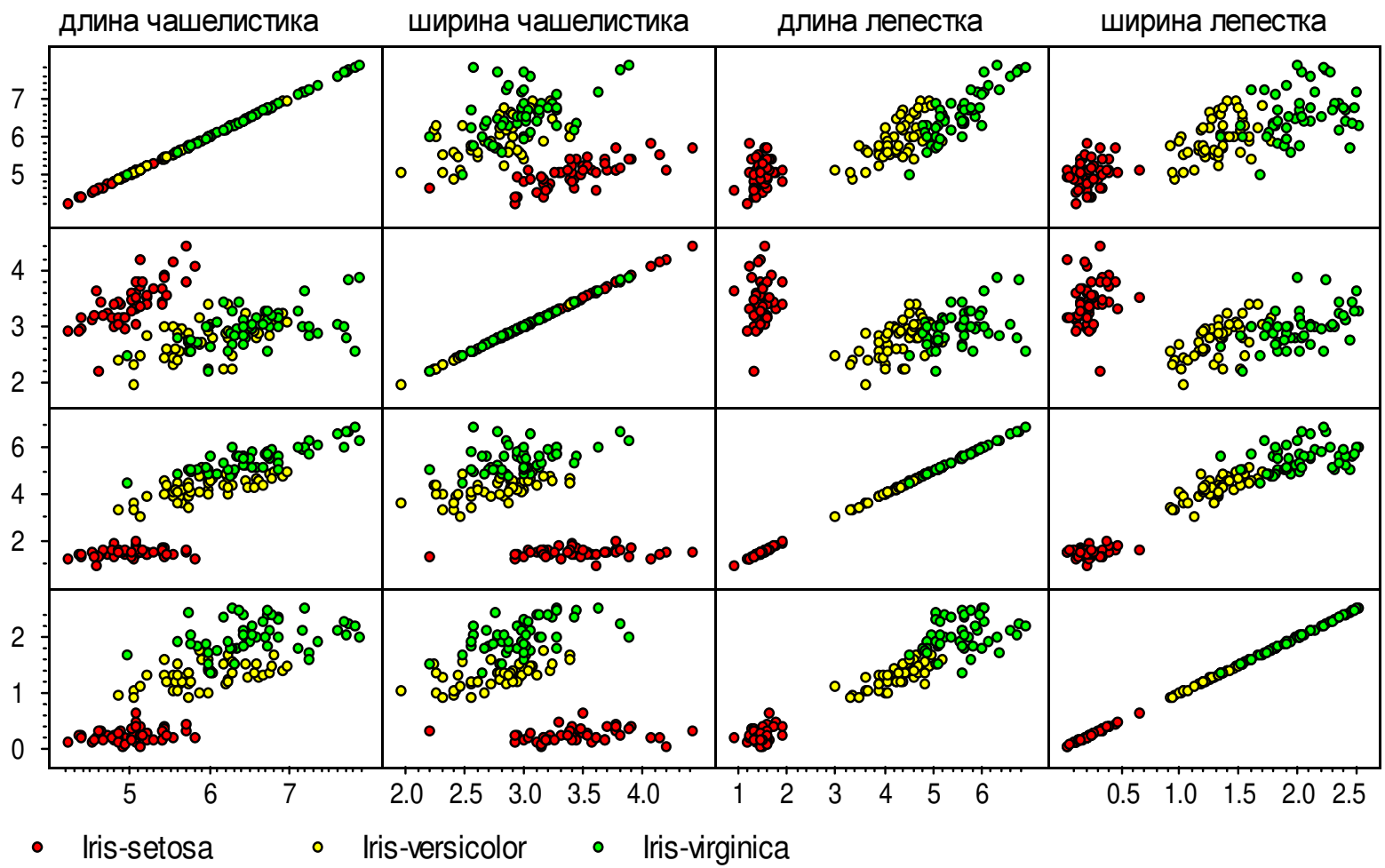
= обучение по прецедентам
= восстановление зависимостей по эмпирическим данным
= предсказательное моделирование
= аппроксимация функций по заданным точкам

Два основных типа задач — *классификация* и *регрессия*



Пример: задача классификации цветков ириса [Фишер, 1936]

$n = 4$ признака, $|Y| = 3$ класса, длина выборки $\ell = 150$.



Как задаются предсказательные модели

Модель (predictive model) — параметрическое семейство функций

$$A = \{a(x, w) \mid w \in W\},$$

где $a\colon X \times W \to Y$ — фиксированная функция,
W — множество допустимых значений параметра w

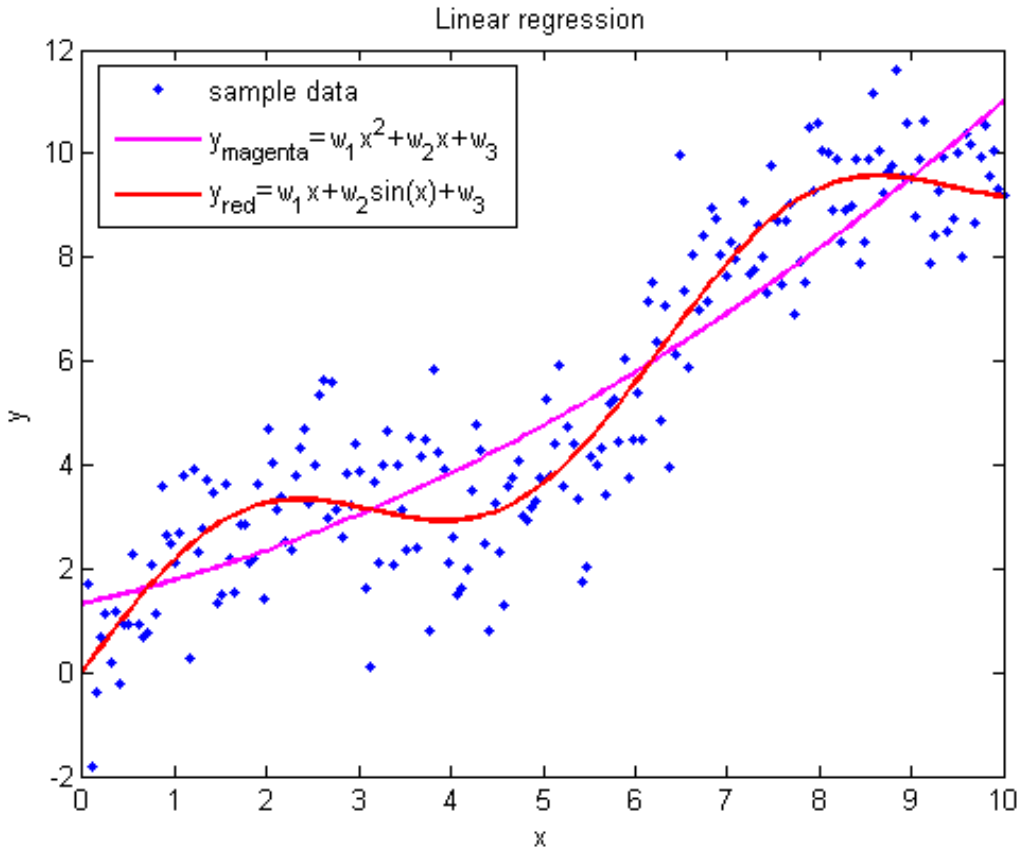
Пример.
Линейная модель с вектором параметров $w = (w_1, \ldots, w_n) \in \mathbb{R}^n$:

$$a(x, w) = \sum_{j=1}^{n} w_j f_j(x) \quad \text{— для регрессии и ранжирования,} \quad Y = \mathbb{R}$$

$$a(x, w) = \operatorname{sign} \sum_{j=1}^{n} w_j f_j(x) \quad \text{— для классификации,} \quad Y = \{-1, +1\}$$

Пример: задача регрессии, синтетические данные

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



- вычисление новых признаков может обогатить модель
- на практике очень важно «правильно угадать модель»

Алгоритм обучения, этапы обучения и применения

Этап *обучения* (train):

алгоритм обучения (learning algorithm) $\mu\colon (X \times Y)^\ell \to W$
по выборке $X^\ell = (x_i, y_i)_{i=1}^\ell$ строит функцию $a(x, w)$,
оценивая (оптимизируя) параметры модели $w \in W$:

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

Этап *применения* (test):

функция $a(x, w)$ для новых объектов x'_i выдаёт ответы $a(x'_i, w)$:

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

Как задаются функции потерь

Функции потерь для задач классификации:

- $\mathscr{L}(w,x) = \big[a(x,w) \neq y(x)\big]$ — индикатор ошибки
- для модели $a(x,w) = \operatorname{sign} b(x,w)$, где b непрерывна по w:
  $M = b(x,w)y(x)$ — *отступ (margin)* объекта x,
  $L(M)$ — непрерывная невозрастающая функция отступа,
  $\mathscr{L}(w,x) = L\big(b(x,w)y(x)\big)$ — margin-based функция потерь

Функции потерь для задач регрессии:

- $\mathscr{L}(w,x) = \big|a(x,w) - y(x)\big|$ — абсолютное значение ошибки
- $\mathscr{L}(w,x) = \big(a(x,w) - y(x)\big)^2$ — квадратичная ошибка

Метод наименьших квадратов — частный случай ERM:

$$\sum_{i=1}^{\ell} \big(a(x_i,w) - y_i\big)^2 \to \min_w$$

Пример Рунге. Аппроксимация функции полиномом

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

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

Модель полиномиальной регрессии

$$a(x, w) = w_0 + w_1 x + \cdots + w_n x^n \quad \text{— полином степени } n$$

Обучение методом наименьших квадратов:

$$Q(w, X^\ell) = \sum_{i=1}^{\ell} (w_0 + w_1 x_i + \cdots + w_n x_i^n - y_i)^2 \to \min_{w_0,\ldots,w_n}$$

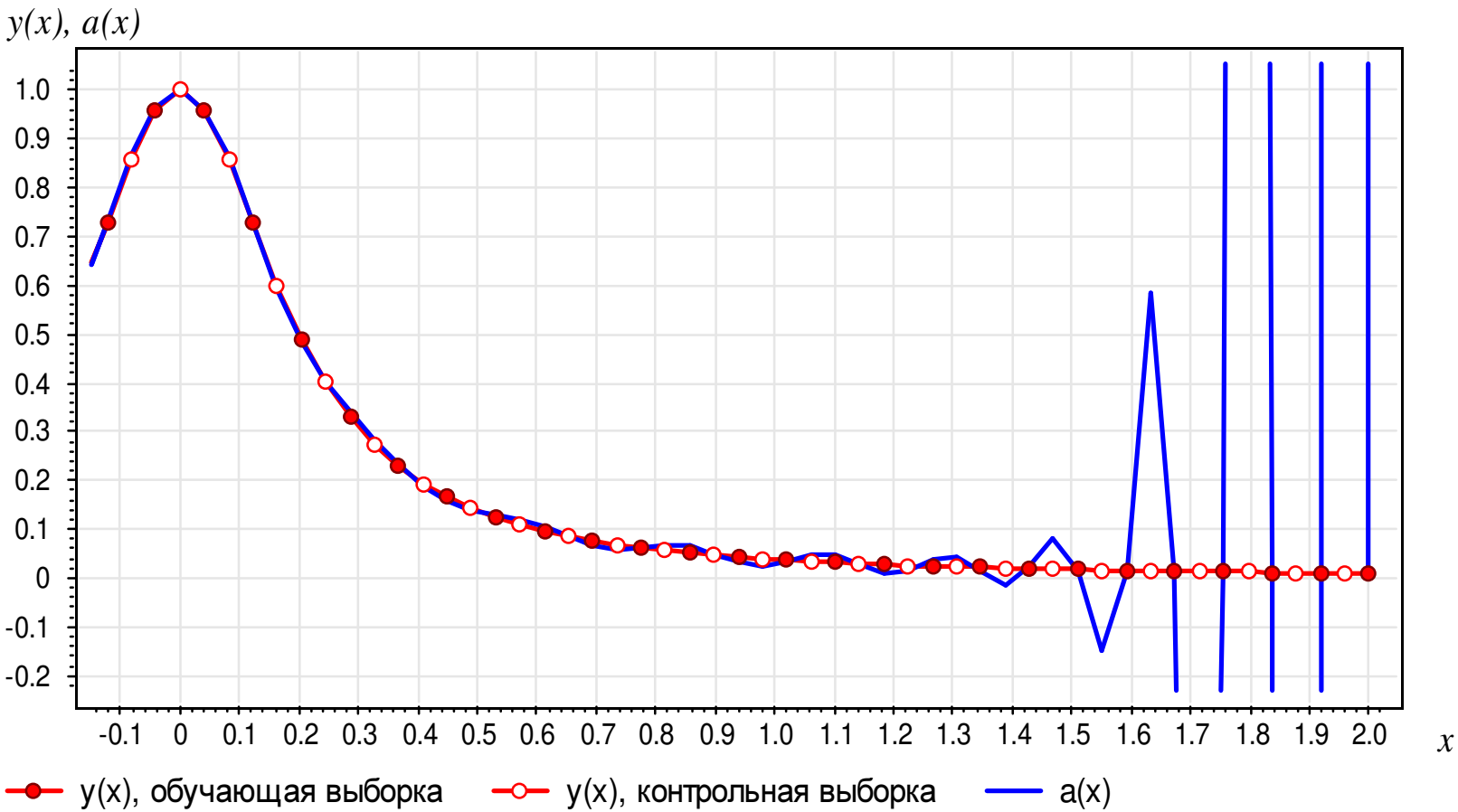
Обучающая выборка: $X^\ell = \left\{ x_i = 4\frac{i-1}{\ell-1} - 2 \;\middle|\; i = 1, \ldots, \ell \right\}$

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

Что происходит с $Q\left(w, X^\ell\right)$ и $Q\left(w, X^k\right)$ при увеличении n?

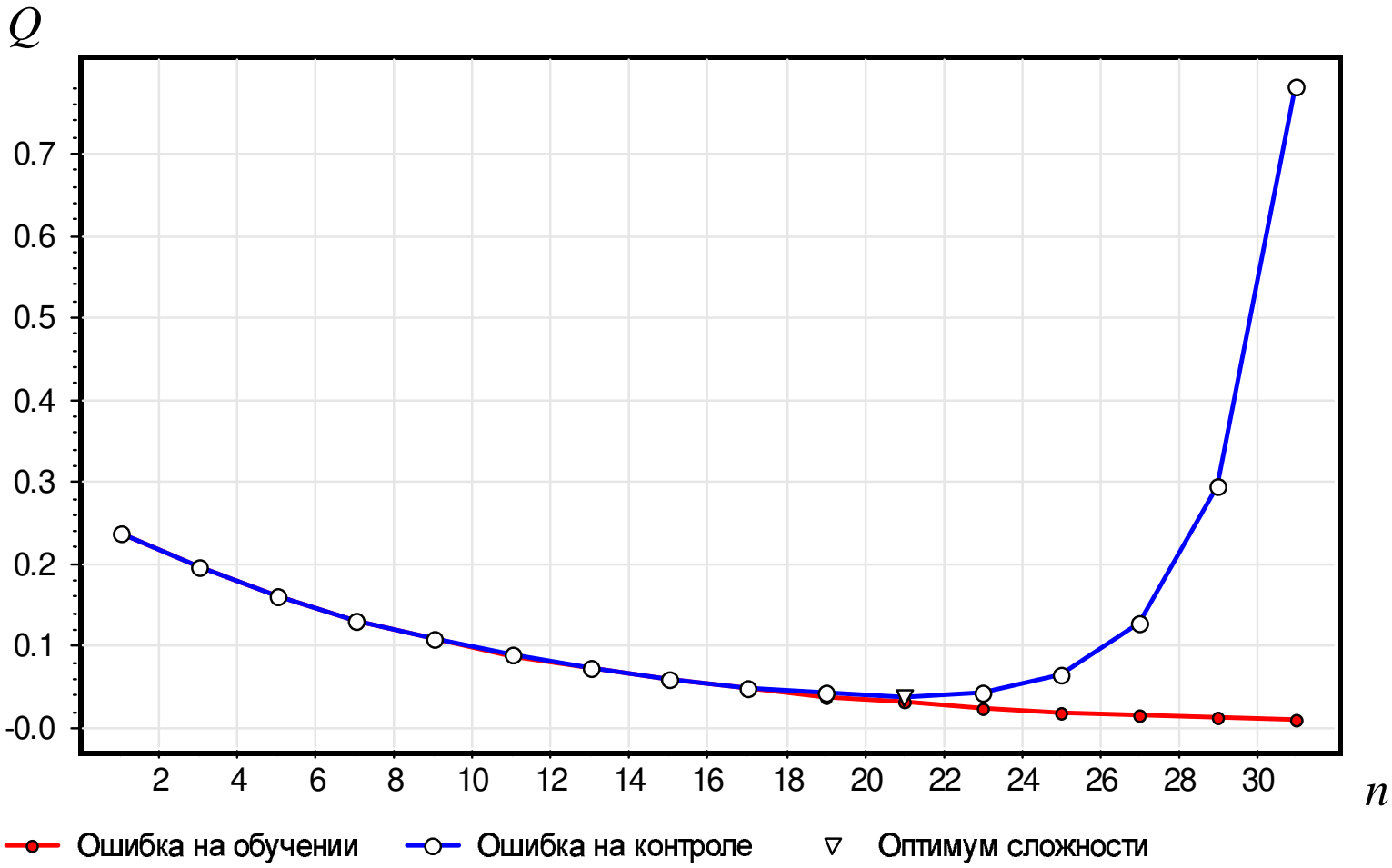
Пример Рунге. Переобучение при $n = 38$, $\ell = 50$

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

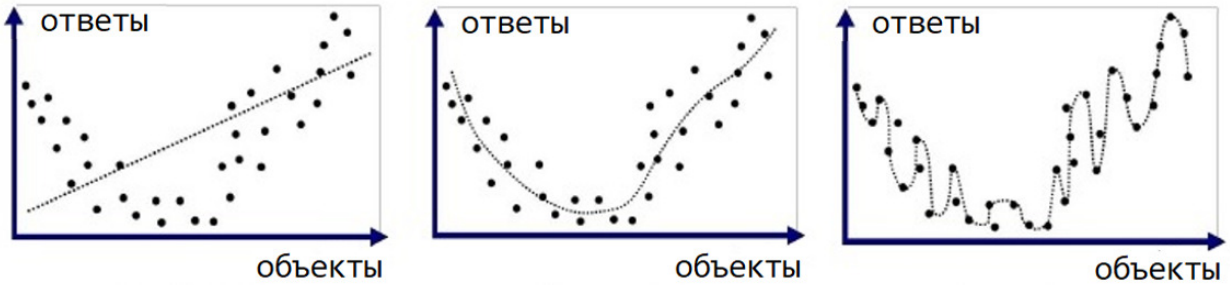


Пример Рунге. Зависимость Q от степени полинома n

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

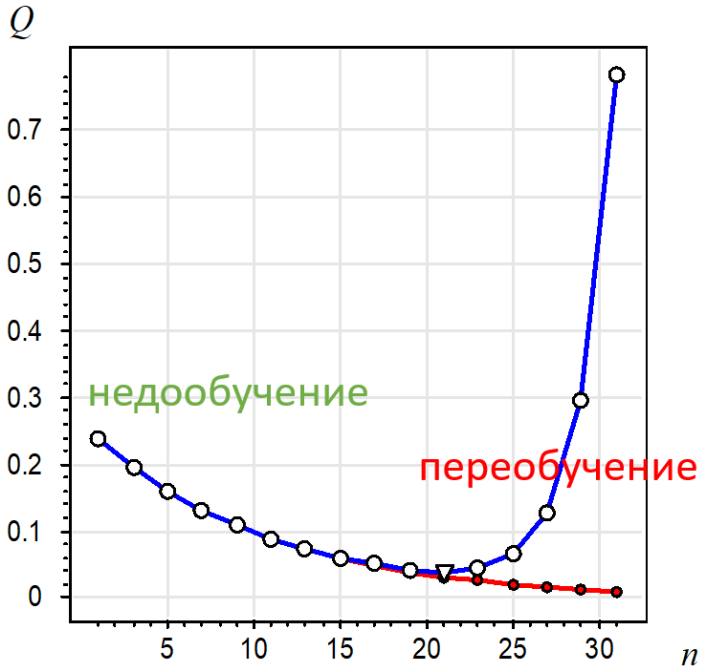


Проблемы недообучения и переобучения



недообучение переобучение

- Недообучение (underfitting): данных много, параметров недостаточно, модель простая, негибкая
- Переобучение (overfitting): данных мало, параметров слишком много, модель сложная, избыточно гибкая



Переобучение — ключевая проблема в машинном обучении

1. **Из-за чего возникает переобучение?**
   — избыточные параметры в модели $a(x, w)$ «расходуются» на чрезмерно точную подгонку под обучающую выборку
   — выбор a из A производится по неполной информации X^ℓ
2. **Как обнаружить переобучение?**
   — эмпирически, путём разбиения выборки на train и test (на test должны быть известны правильные ответы)
3. **Избавиться от него нельзя. Как его минимизировать?**
   — увеличивать объём обучающих данных (big data)
   — накладывать ограничения на w (регуляризация)
   — минимизировать одну из теоретических оценок
   — выбирать модель (model selection) по оценкам обобщающей способности (generalization performance)

Эмпирические оценки обобщающей способности

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

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

где P — множество разбиений $X^L = X_p^\ell \sqcup X_p^k$

Задачи медицинской диагностики

Объект — пациент в определённый момент времени.

Классы: диагноз или способ лечения или исход заболевания.

Примеры признаков:

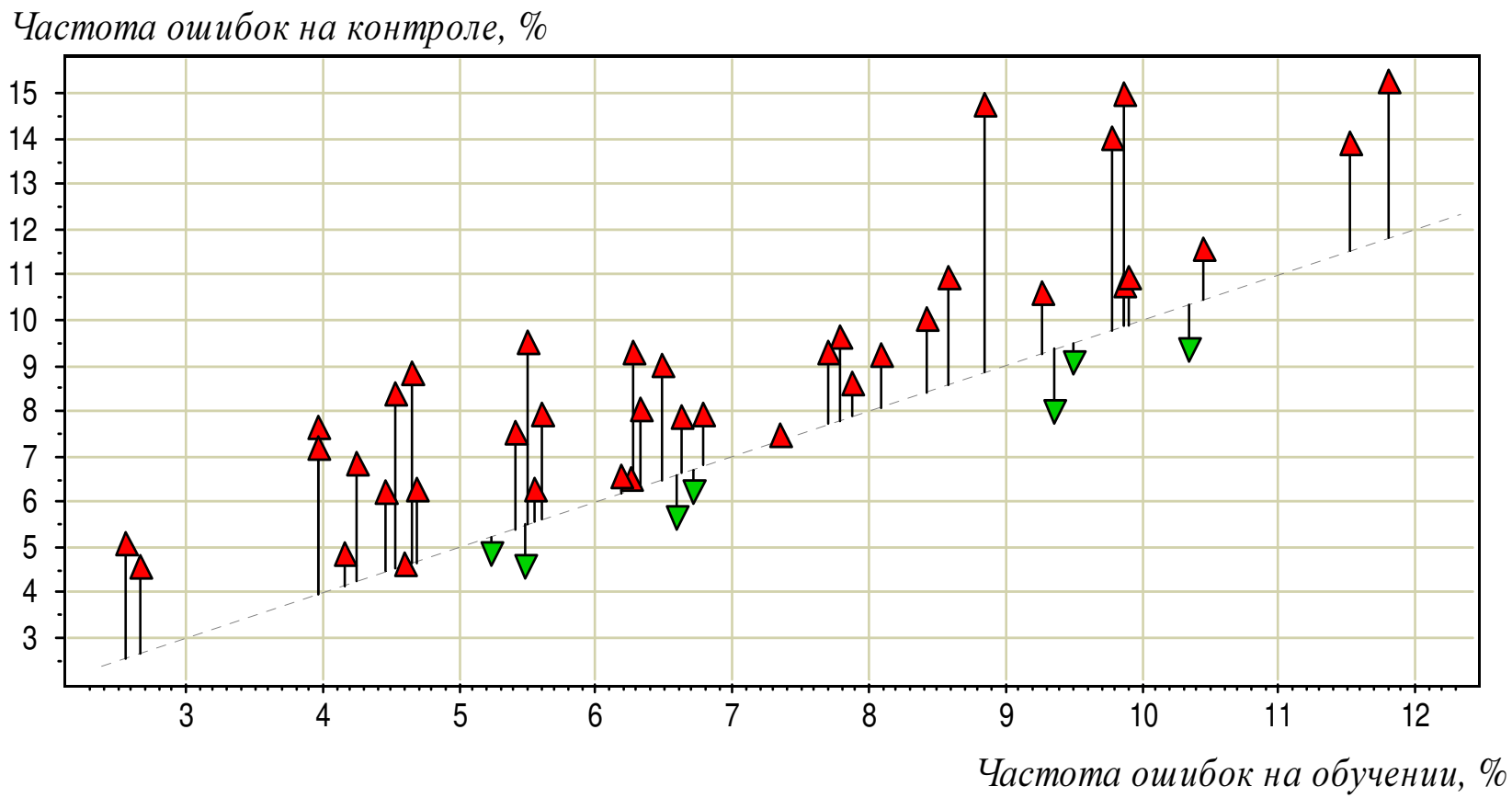
- **бинарные:** пол, головная боль, слабость, тошнота, и т. д.
- **порядковые:** тяжесть состояния, желтушность, и т. д.
- **количественные:** возраст, пульс, артериальное давление, содержание гемоглобина в крови, доза препарата, и т. д.

Особенности задачи:

- обычно много «пропусков» в данных;
- нужна интерпретируемая модель классификации;
- нужно выделять *синдромы* — сочетания *симптомов*;
- нужна оценка вероятности отрицательного исхода.

Задача медицинской диагностики. Пример переобучения

Задача предсказания отдалённого результата хирургического лечения атеросклероза; точки — различные решающие правила



Задачи распознавания месторождений

Объект — геологический район (рудное поле).

Классы — есть или нет полезное ископаемое.

Примеры признаков:

- **бинарные:** присутствие крупных зон смятия и рассланцевания, и т. д.
- **порядковые:** минеральное разнообразие; мнения экспертов о наличии полезного ископаемого, и т. д.
- **количественные:** содержания сурьмы, присутствие в рудах антимонита, и т. д.

Особенности задачи:

- проблема «малых данных» — для редких типов месторождений объектов много меньше, чем признаков.

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 $P\big(y(x) = \text{bad}\big)$.

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;
- признаки приходится 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.

Задачи биометрической идентификации личности

Идентификация личности по отпечаткам пальцев

Идентификация личности по радужной оболочке глаза

Особенности задач:

- нетривиальная предобработка для извлечения признаков;
- высочайшие требования к точности.

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 объёмов продаж

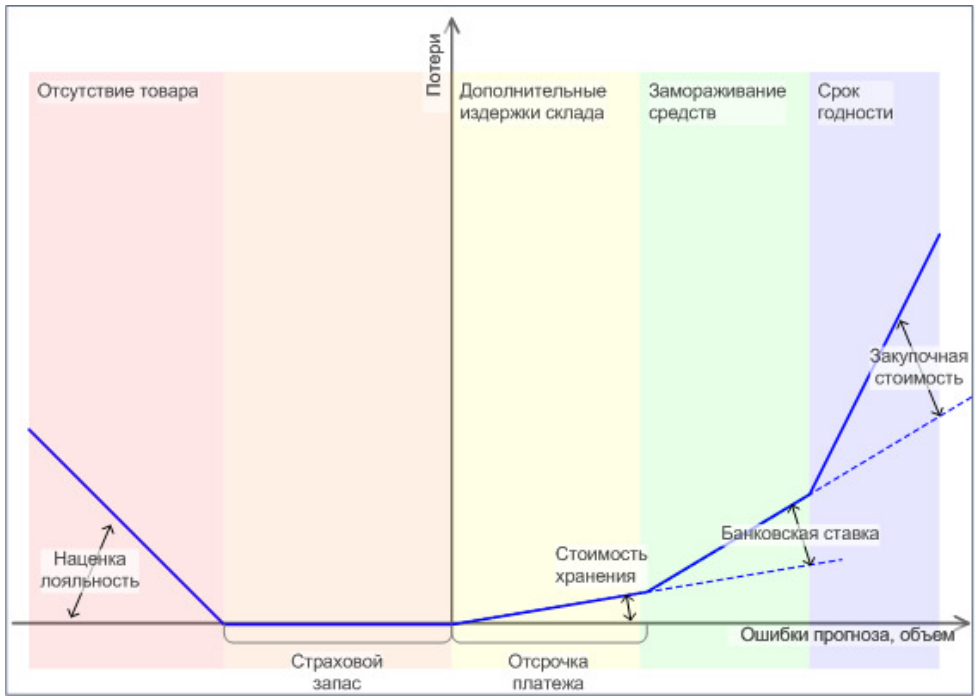
Объект — тройка $\langle$товар, магазин, день$\rangle$.

Примеры признаков:

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

Особенности задачи:

- функция потерь не квадратична и даже не симметрична;
- разреженные данные.



Конкурс kaggle.com: TFI Restaurant Revenue Prediction

Объект — место для открытия нового ресторана.

Предсказать — прибыль от ресторана через год.

Примеры признаков:

- демографические данные: возраст, достаток и т.д.,
- цены на недвижимость поблизости,
- маркетинговые данные: наличие школ, офисов и т.д.

Особенности задачи:

- мало объектов, много признаков;
- разнотипные признаки;
- есть выбросы;
- разнородные объекты (возможно, имеет смысл строить разные модели для мелких и крупных городов).

Задача ранжирования поисковой выдачи

Объект — пара $\langle$короткий текстовый запрос, документ$\rangle$.

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

Примеры количественных признаков:

- частота слов запроса в документе,
- число ссылок на документ,
- число кликов на документ: всего, по данному запросу.

Особенности задачи:

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

Машинное обучение на данных сложной структуры

- **Статистический машинный перевод:**
  объект — предложение на естественном языке
  ответ — его перевод на другой язык
- **Перевод речи в текст:**
  объект — аудиозапись речи человека
  ответ — текстовая запись речи
- **Управление беспилотным аппаратом:**
  объект — поток данных с видеокамер, датчиков
  ответ — решение об управляющем воздействии

Предпосылки прорыва ИИ в задачах со сложными данными:

- большие и *чистые* данные (Big Data)
- методы оптимизации для задач большой размерности и обучаемая векторизация данных (Deep Learning)
- рост вычислительных мощностей (закон Мура, GPU)

Особенности данных и постановок прикладных задач

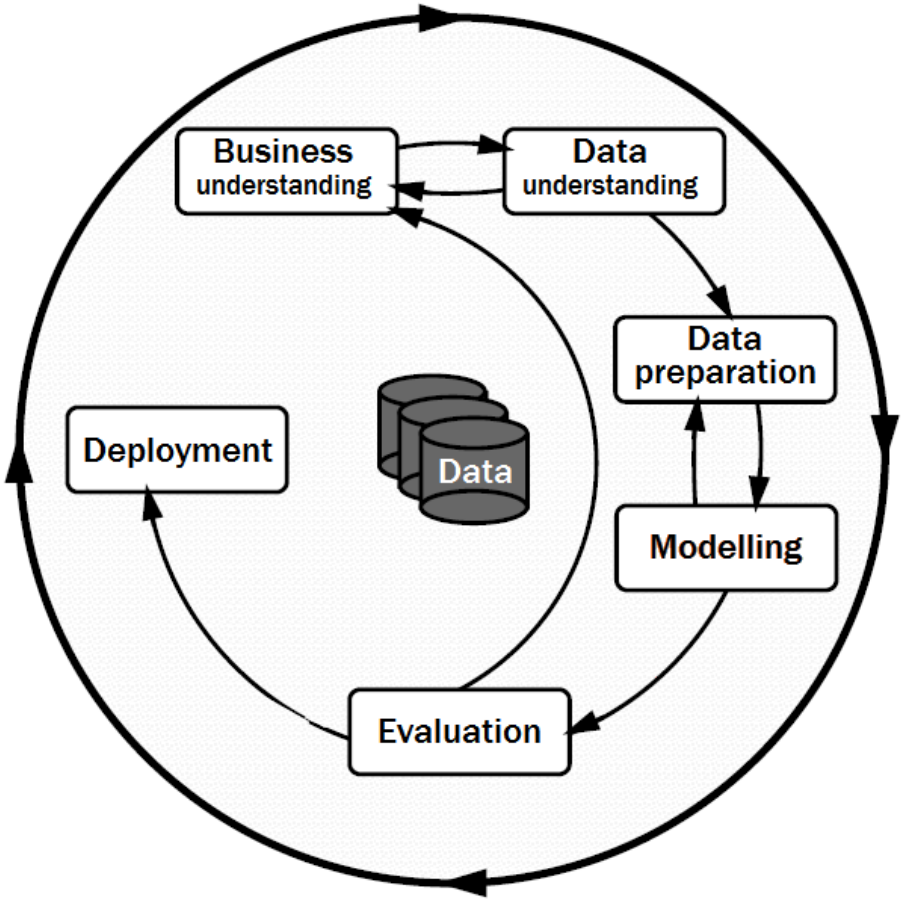
- разнородные (признаки измерены в разных шкалах)
- неполные (измерены не все, имеются пропуски)
- неточные (измерены с погрешностями)
- противоречивые (объекты одинаковые, ответы разные)
- избыточные (сверхбольшие, не помещаются в память)
- недостаточные (объектов меньше, чем признаков)
- сложно структурированные (нет признаковых описаний)

Риски, связанные с постановкой задачи:

- «грязные» данные
  (заказчик не обеспечивает качество данных)
- неясные критерии качества модели
  (заказчик не определился с целями или критериями)

Межотраслевой стандарт интеллектуального анализа данных

CRISP-DM: CRoss Industry Standard Process for Data Mining (1999)



Компании-инициаторы:

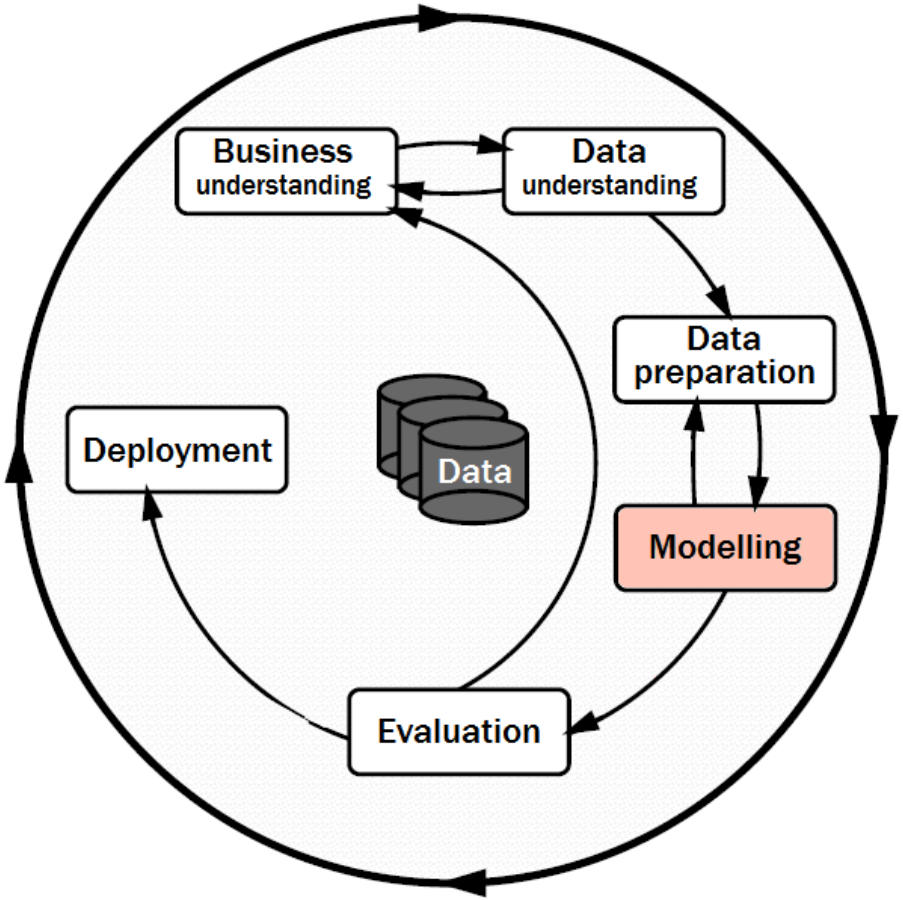
- SPSS
- Teradata
- Daimler AG
- NCR Corp.
- OHRA

Шаги процесса:

- понимание бизнеса
- понимание данных
- предобработка данных и инженерия признаков
- разработка моделей и настройка параметров
- оценивание качества
- внедрение

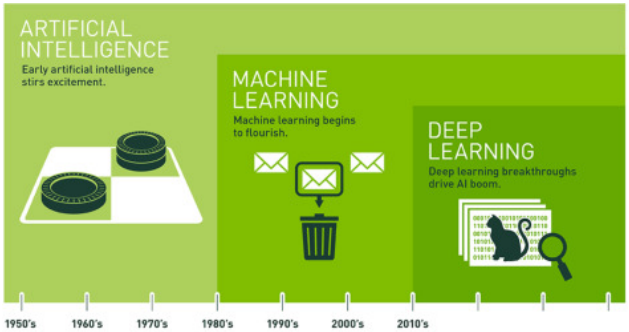
Понимание эволюции ИИ как автоматизации шагов CRISP-DM

CRISP-DM: CRoss Industry Standard Process for Data Mining (1999)



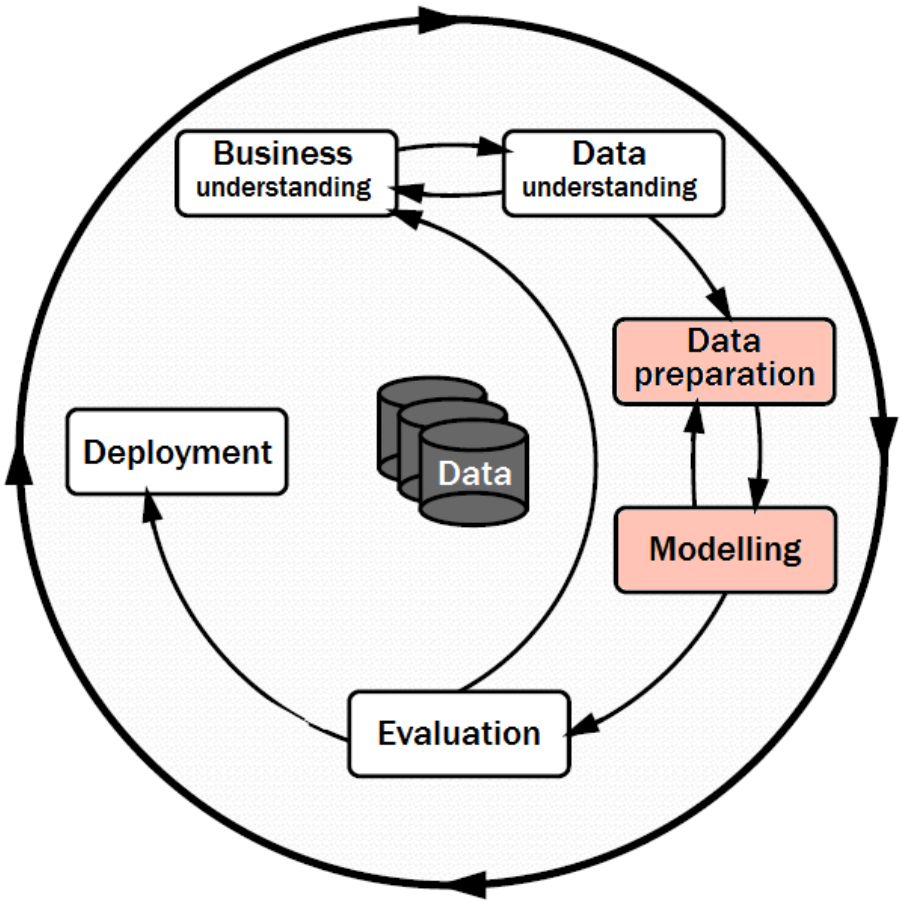
Эволюция ИИ:

- *Expert Systems:* жёсткие модели, основанные на правилах
- *Machine Learning:* параметрические модели, обучаемые по данным



Понимание эволюции ИИ как автоматизации шагов CRISP-DM

CRISP-DM: CRoss Industry Standard Process for Data Mining (1999)

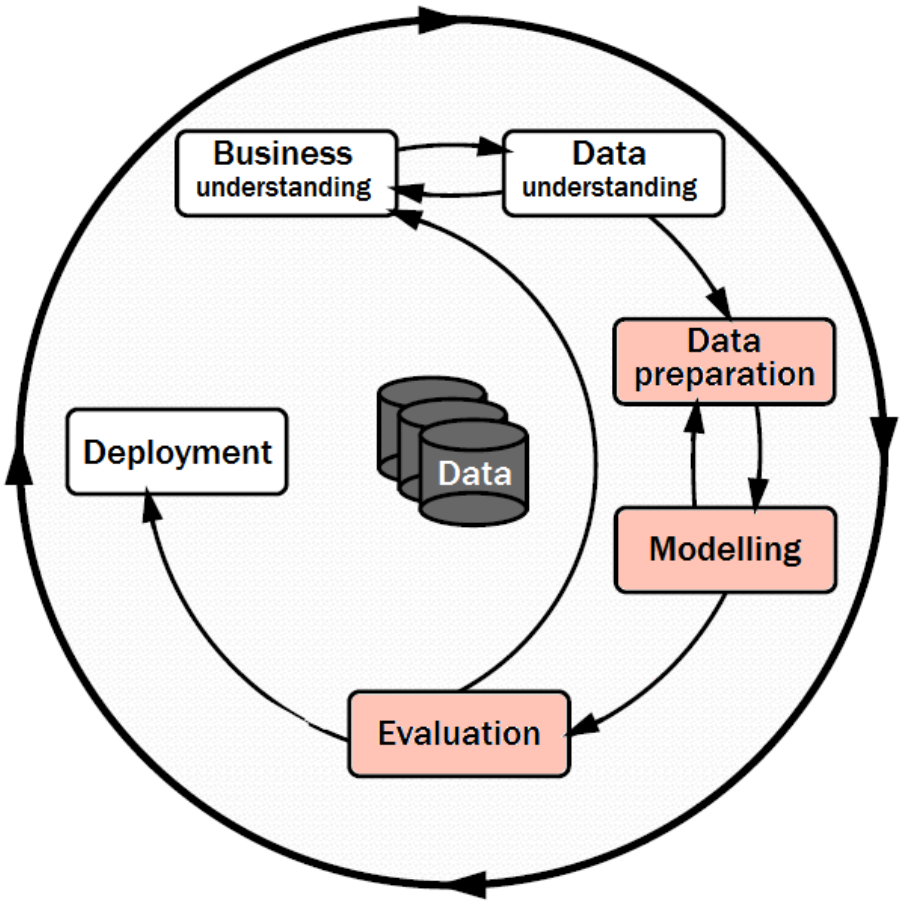


Эволюция ИИ:

- *Expert Systems:* жёсткие модели, основанные на правилах
- *Machine Learning:* параметрические модели, обучаемые по данным
- *Deep Learning:* модели с обучаемой векторизацией данных

Понимание эволюции ИИ как автоматизации шагов CRISP-DM

CRISP-DM: CRoss Industry Standard Process for Data Mining (1999)

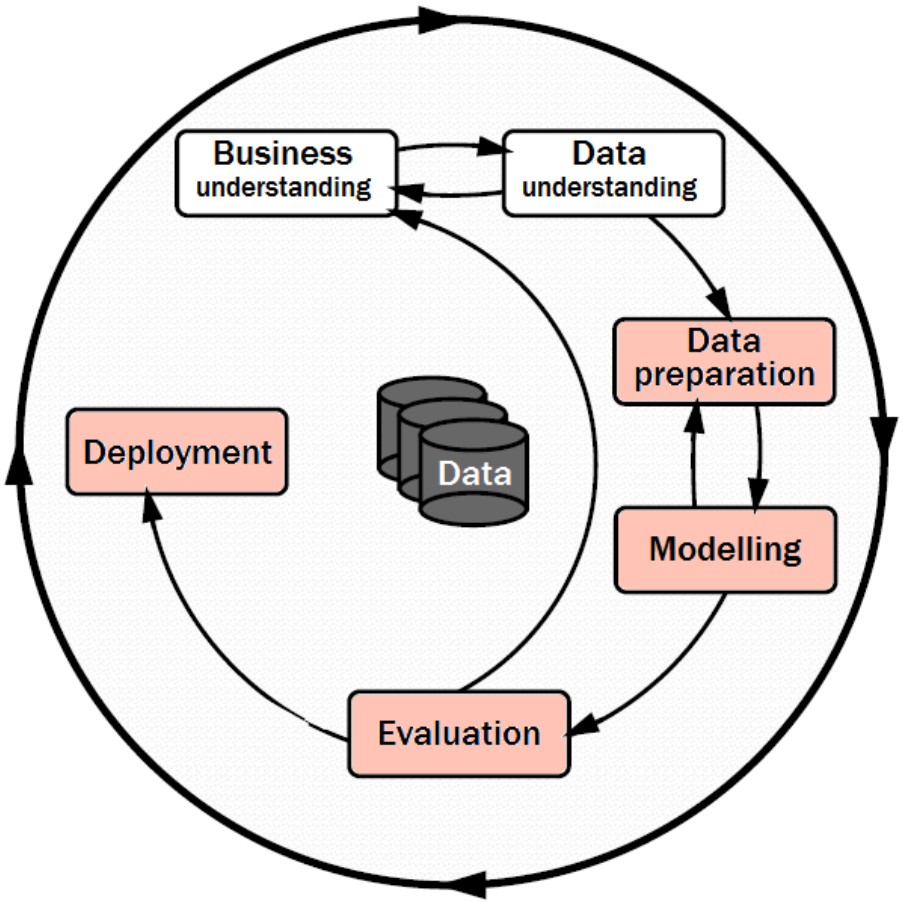


Эволюция ИИ:

- *Expert Systems:* жёсткие модели, основанные на правилах
- *Machine Learning:* параметрические модели, обучаемые по данным
- *Deep Learning:* модели с обучаемой векторизацией данных
- *AutoML:* автоматический выбор моделей и архитектур

Понимание эволюции ИИ как автоматизации шагов CRISP-DM

CRISP-DM: CRoss Industry Standard Process for Data Mining (1999)



Эволюция ИИ:

- *Expert Systems:* жёсткие модели, основанные на правилах
- *Machine Learning:* параметрические модели, обучаемые по данным
- *Deep Learning:* модели с обучаемой векторизацией данных
- *AutoML:* автоматический выбор моделей и архитектур
- *Lifelong Learning:* бесшовная интеграция обучения и выбора моделей в бизнес-процесс

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 (668 задачи, 2024-09-01)

Эксперименты на синтетических данных

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

Эксперименты на синтетических 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 полу-синтетических данных:

- цель — протестировать помехоустойчивость модели
- объекты x_i из реальной задачи (признаки + шум)
- ответы $y_i = y(x_i)$ для придуманной функции $y(x)$ (+ шум)

Резюме в конце лекции

- **Основные понятия машинного обучения:**
  объект, ответ, признак, функция потерь, модель,
  метод обучения, эмпирический риск, переобучение

- **Постановка задачи** — её ДНК (Дано, Найти, Критерий)

- **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
  — внедрение и эксплуатация

- **Прикладные задачи машинного обучения:**
  очень много, очень разных,
  во всех областях бизнеса, науки, производства