Машинное обучение

Власов Кирилл Вячеславович

2020

Формальная постановка задачи

Дана обучающая выборка (объекты независимы):

$X_m = \{ (x_1 , y_1), \dots , (x_m , y_m) \}$

Для задачи регрессии - Целевая переменная задана вещественным числом

$(x_1 , y_1) \in \mathbb{R}^m \times \mathbb{Y},\ \mathbb{Y} = \mathbb{R}$

Для задачи классификации - Целевая переменная задана конечным числом меток

$(x_1 , y_1) \in \mathbb{R}^m \times \mathbb{Y},\ \mathbb{Y} = \{-1; 1\}$

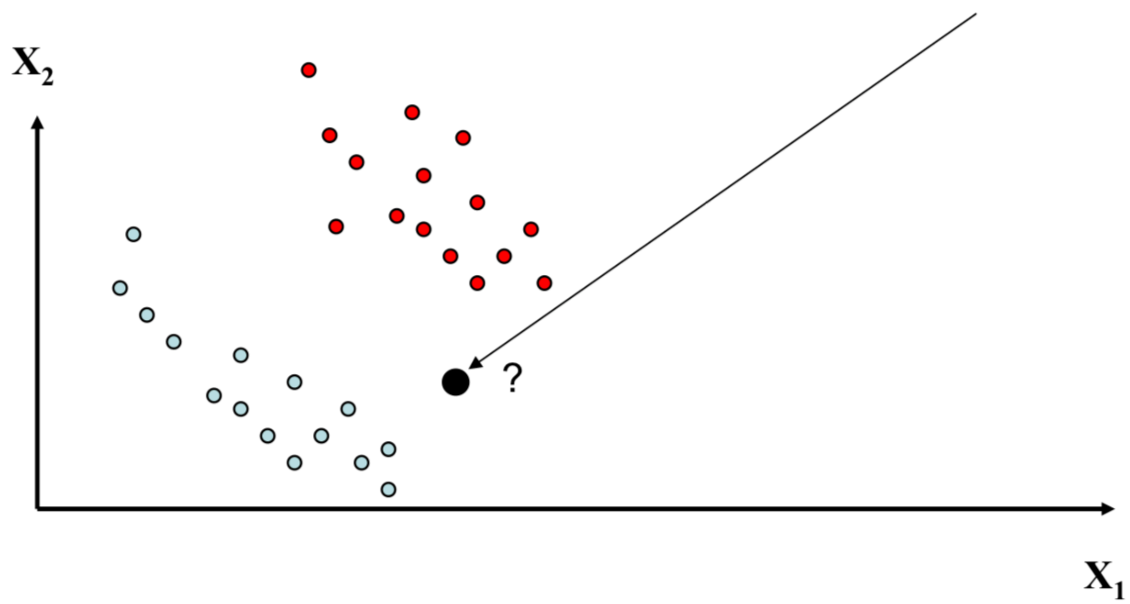
Задать такую функцию f(x) от вектора признаков x, которое выдает ответ для любого возможного наблюдения x

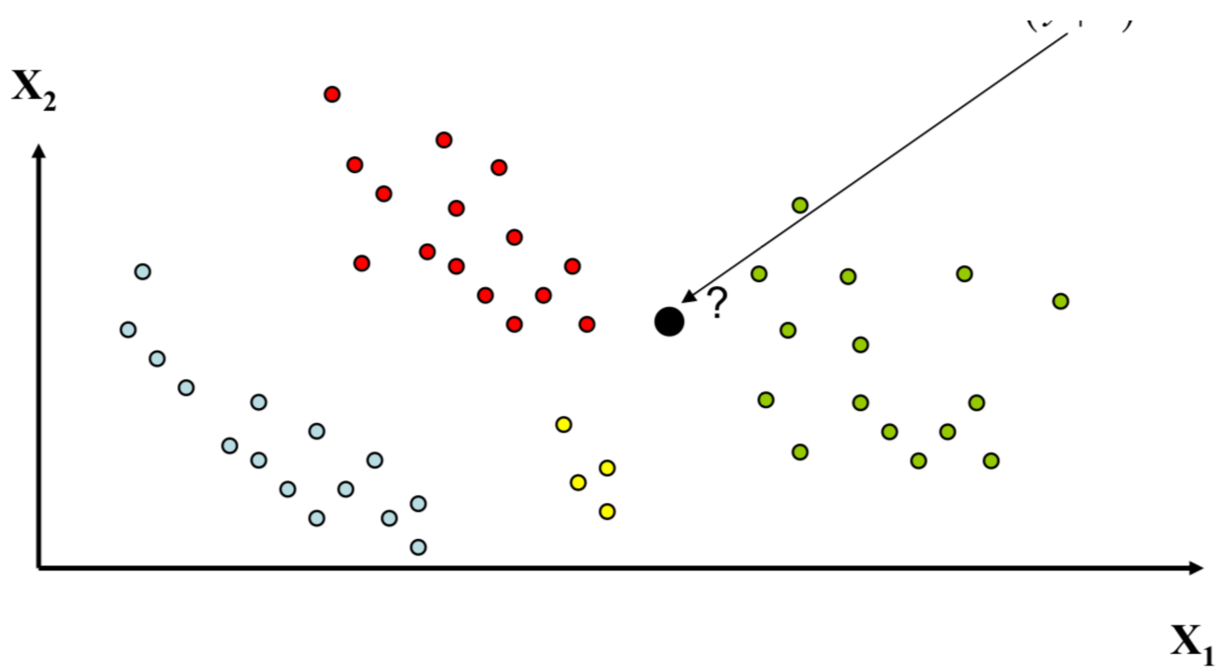
$f(x)\colon \mathbb{X} \to \mathbb{Y}$

Основная гипотеза МО: Схожим объектам соответствуют схожие объекты

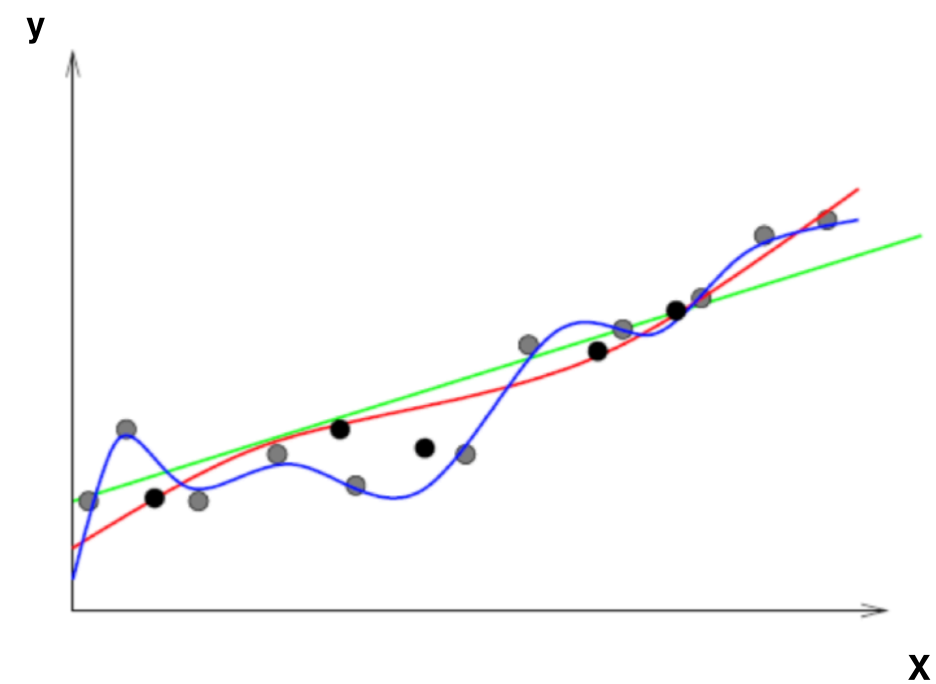
Формальная постановка задачи

Классификация

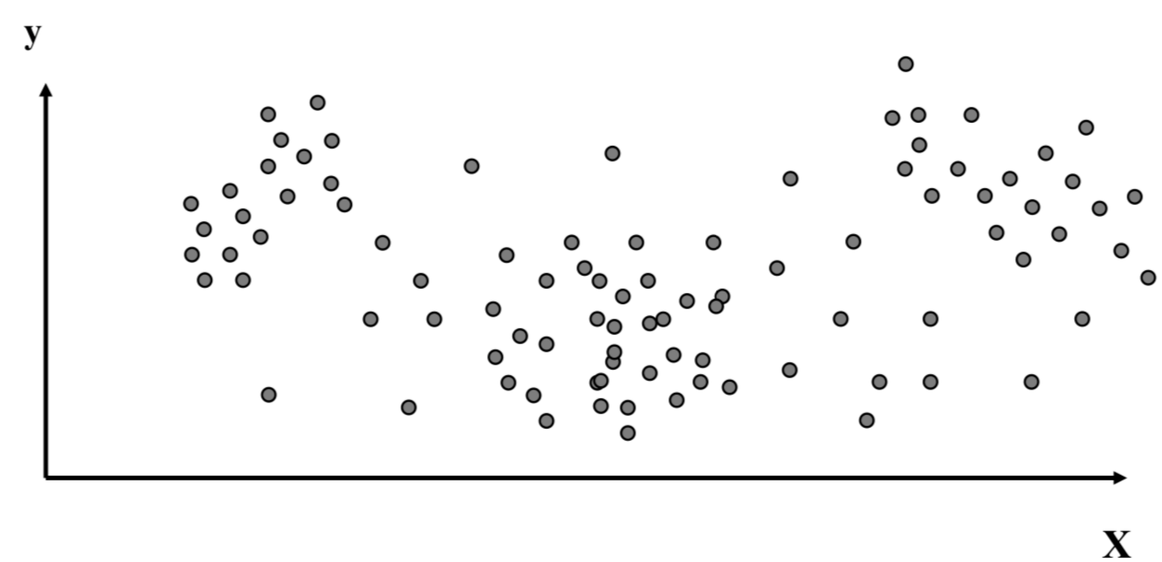




Восстановление регрессии

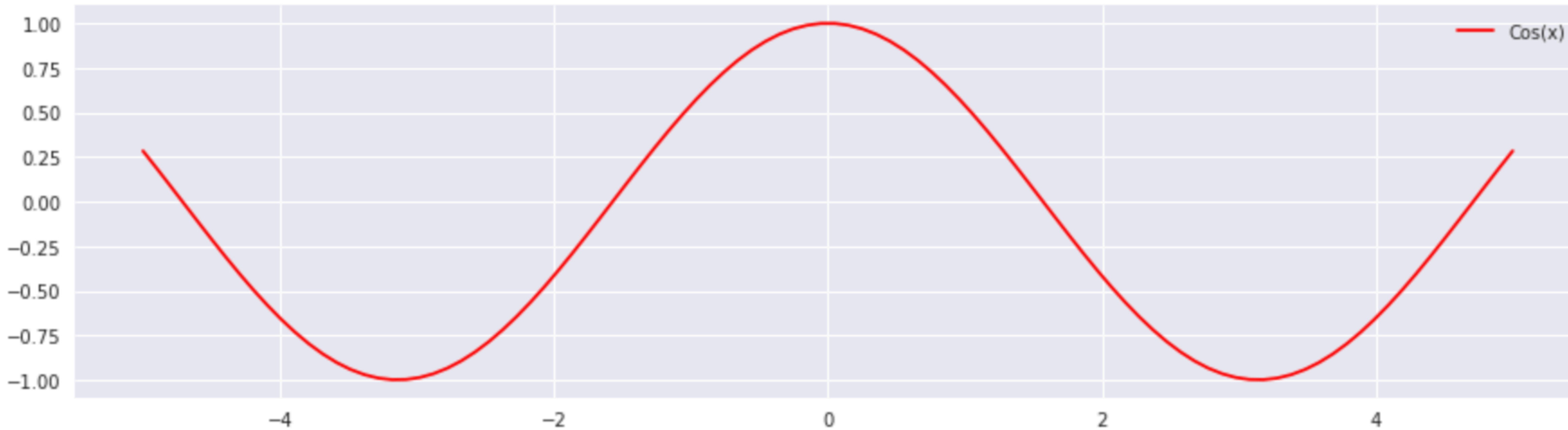


Кластеризация



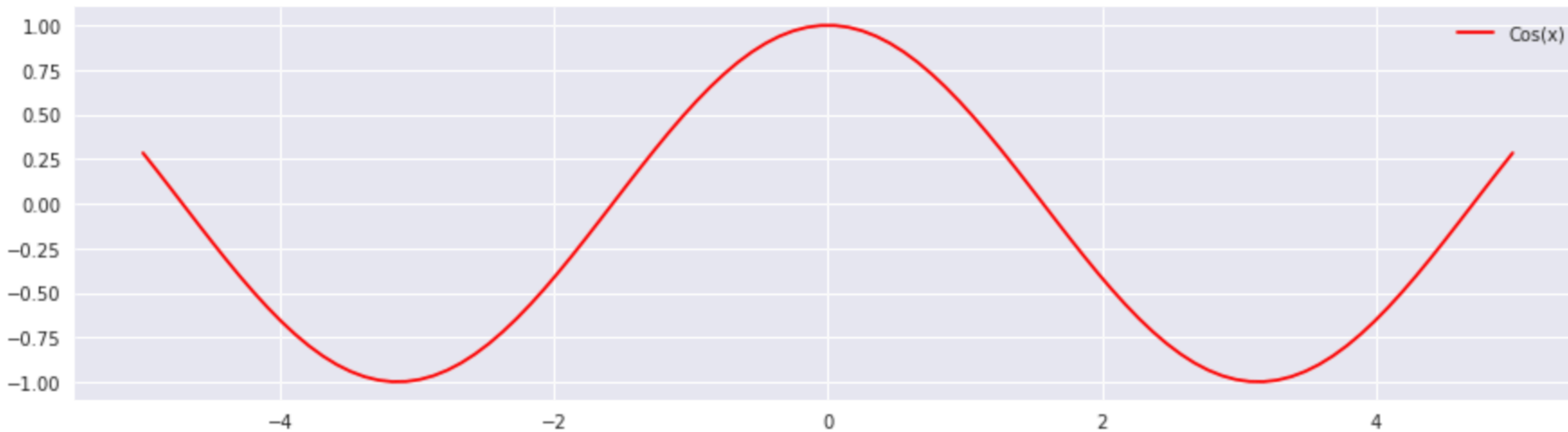
Метрики качества

$y = \cos(x), x \in [-5, 5]$

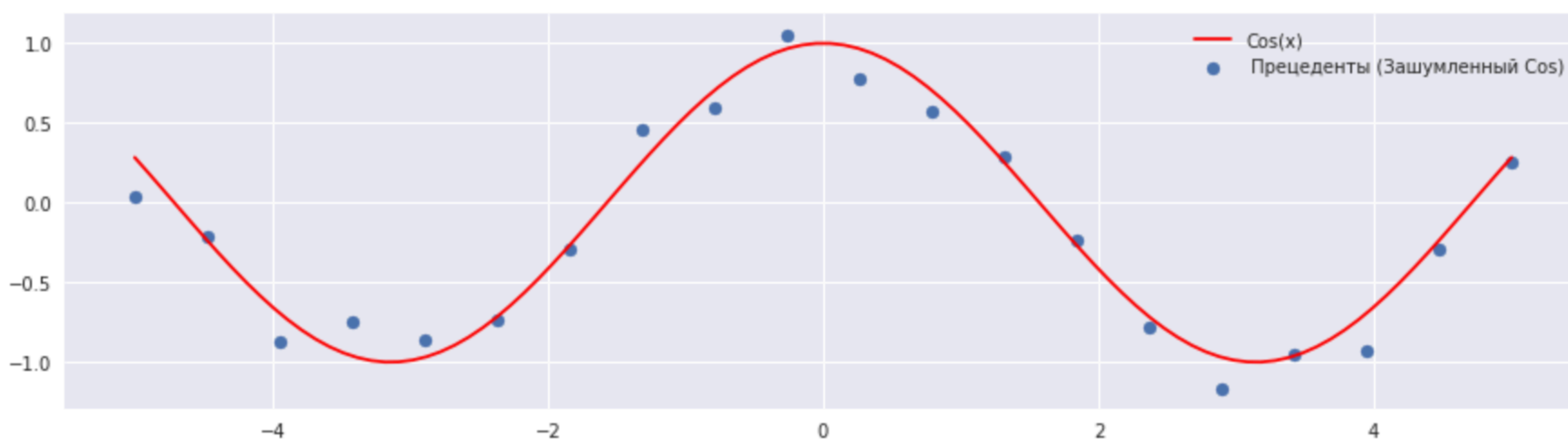


Метрики качества

$y = \cos(x), x \in [-5, 5]$

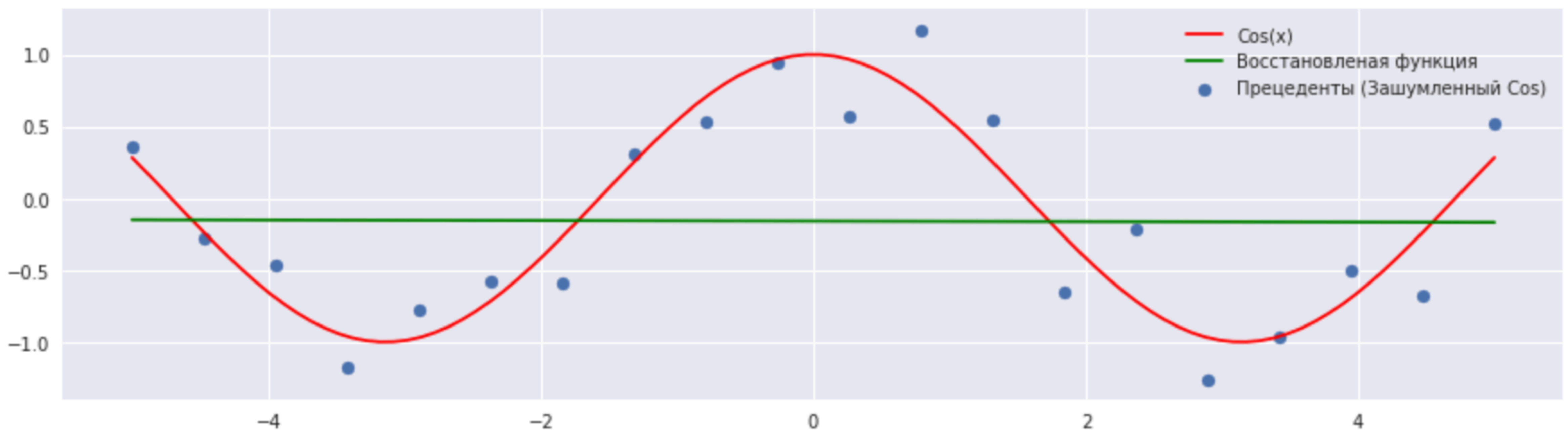


$y = \cos(x) + \varepsilon$, где $\varepsilon = \mathcal{N}\left(0, \frac{1}{2}\right), x \in [-5, 5]$



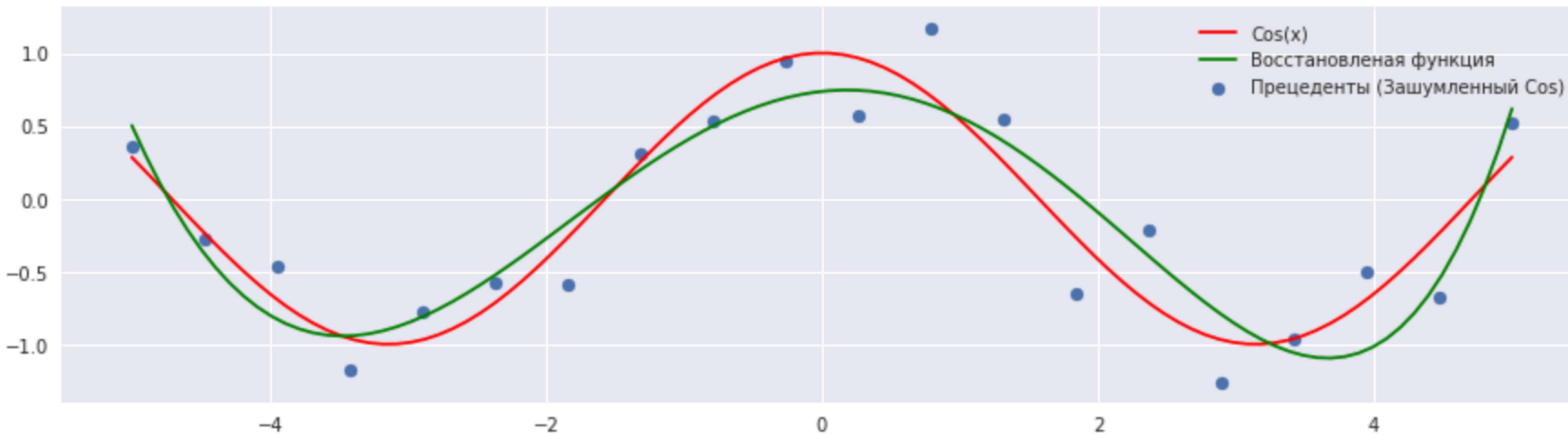
Метрики качества

Восстановим зависимость линейной функцией



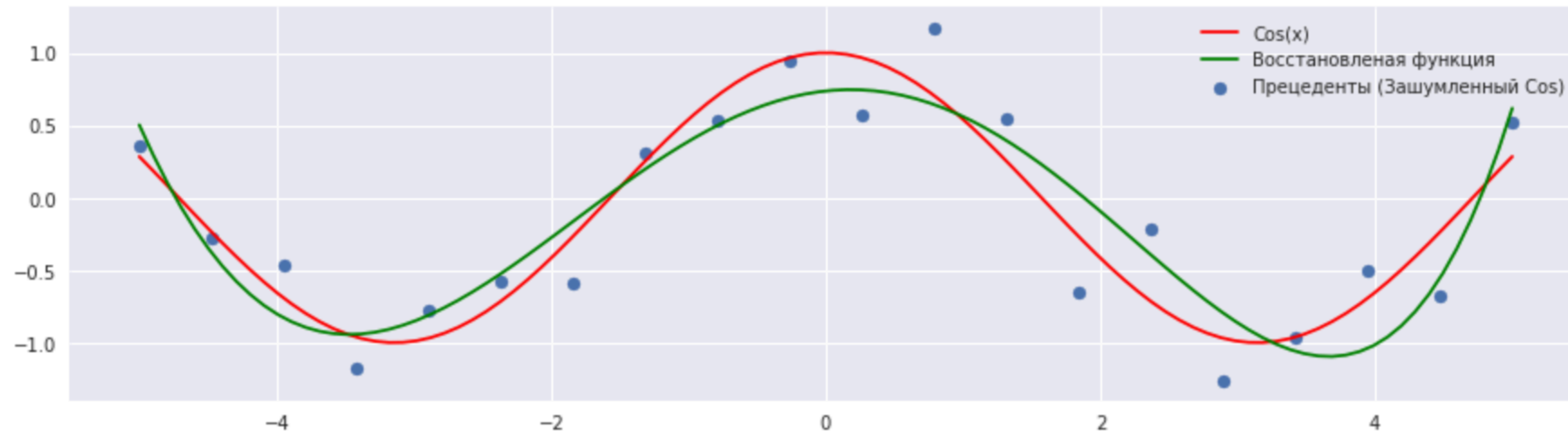
Метрики качества

Восстановим зависимость с помощью полинома 5-ого порядка

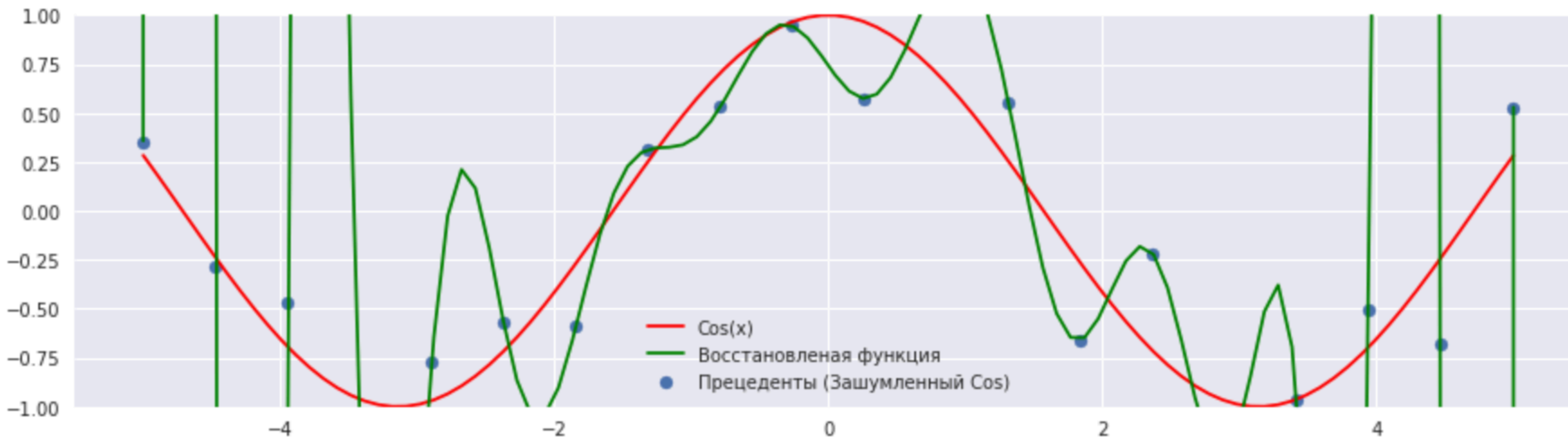


Метрики качества

Восстановим зависимость с помощью полинома 5-ого порядка



Восстановим зависимость с помощью полинома 11-ого порядка



Метрики качества в задачах регрессии

Средняя квадратичная (Mean Squared Error, MSE) ошибка:

$$MSE = \frac{1}{l}\sum_{i=1}^{l}\left(f(x_i) - y_i\right)^2$$

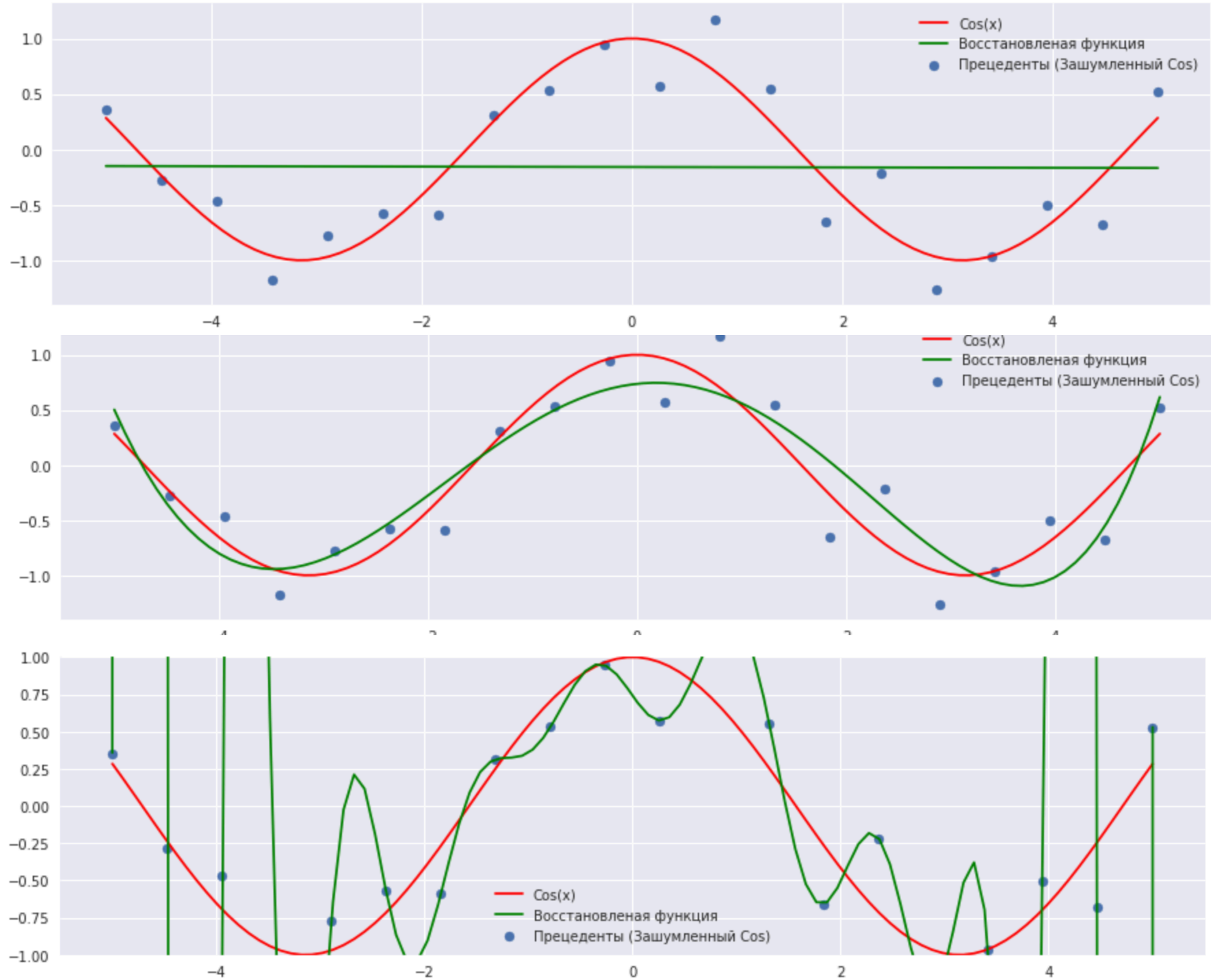
Средняя абсолютная (Mean Absolute Error, MAE) ошибка:

$$MAE = \frac{1}{l}\sum_{i=1}^{l}\left|f(x_i) - y_i\right|$$

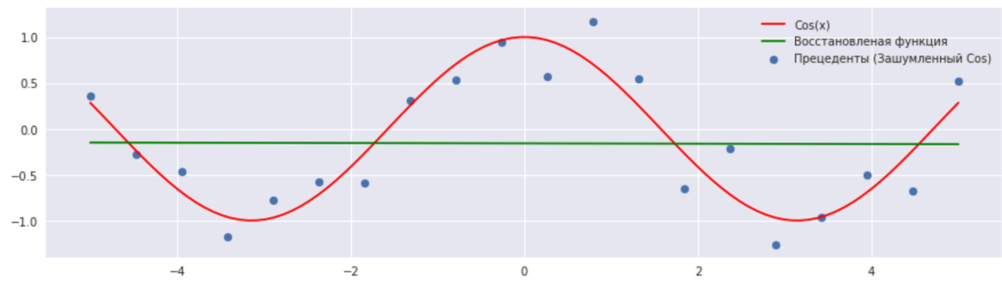
Среднеквадратичный функционал сильнее штрафует за большие отклонения по сравнению со среднеабсолютным, и поэтому более чувствителен к выбросам.

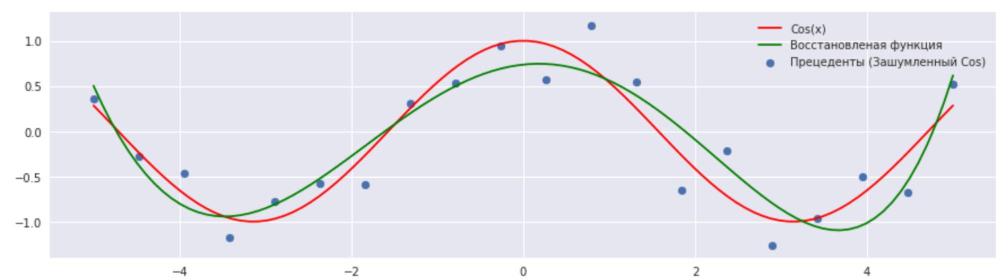
Идеальны для сравнения моделей, но не всегда понятно как их оценивать относительно целевой переменной. Например: MSE - 10 это хорошо, если переменная лежит в пределах интервала (10000, 100000), но плохо, если целевая переменная принимает значения от 0 до 1

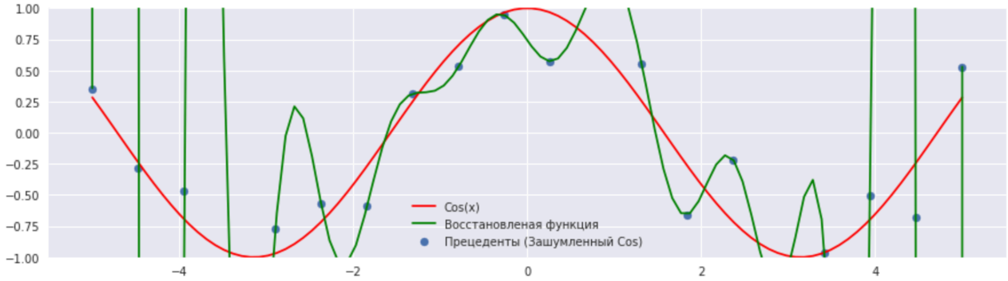
Мотивация валидации



Мотивация валидации

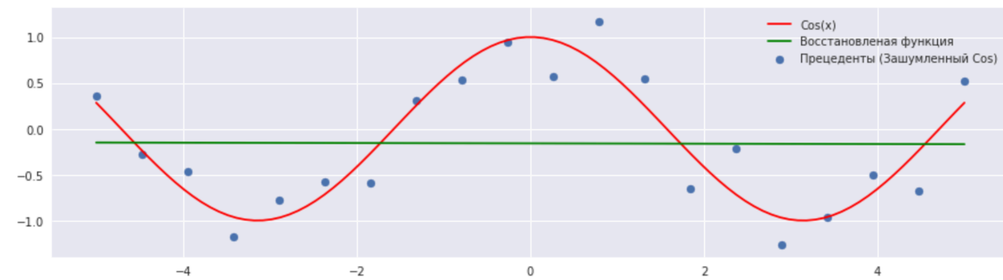


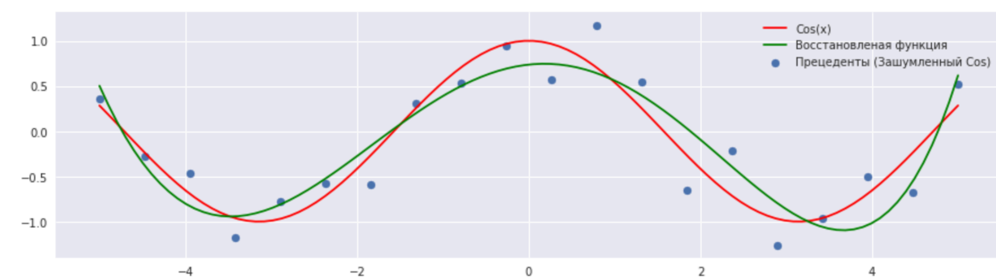


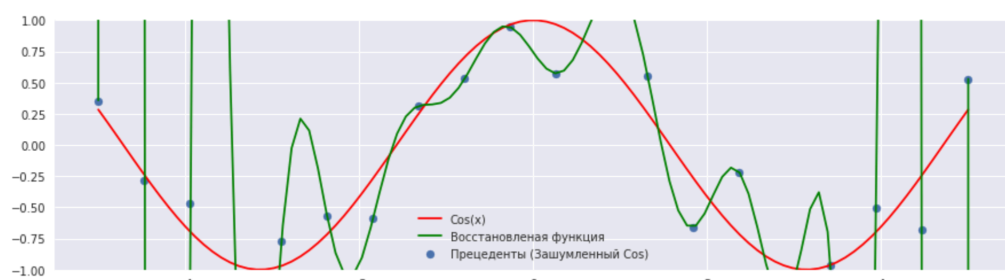


	MSE	MAE	R2
Линейная модель	0.472	0.586	0.0004
Полином 5-ой степени	0.047	0.179	0.9000
Полином 11-ой степени	0.000	0.000	1.0000

Мотивация валидации



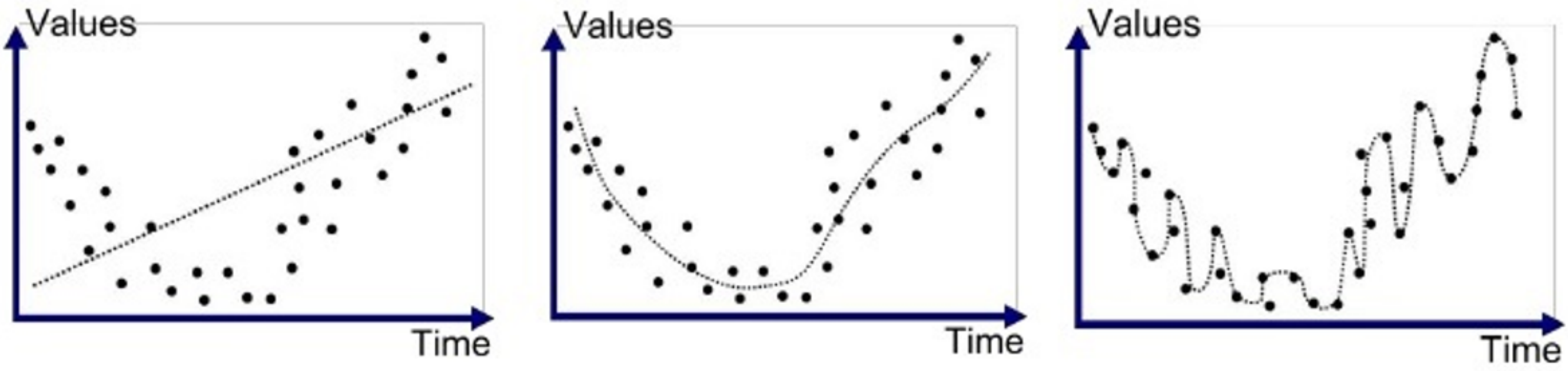


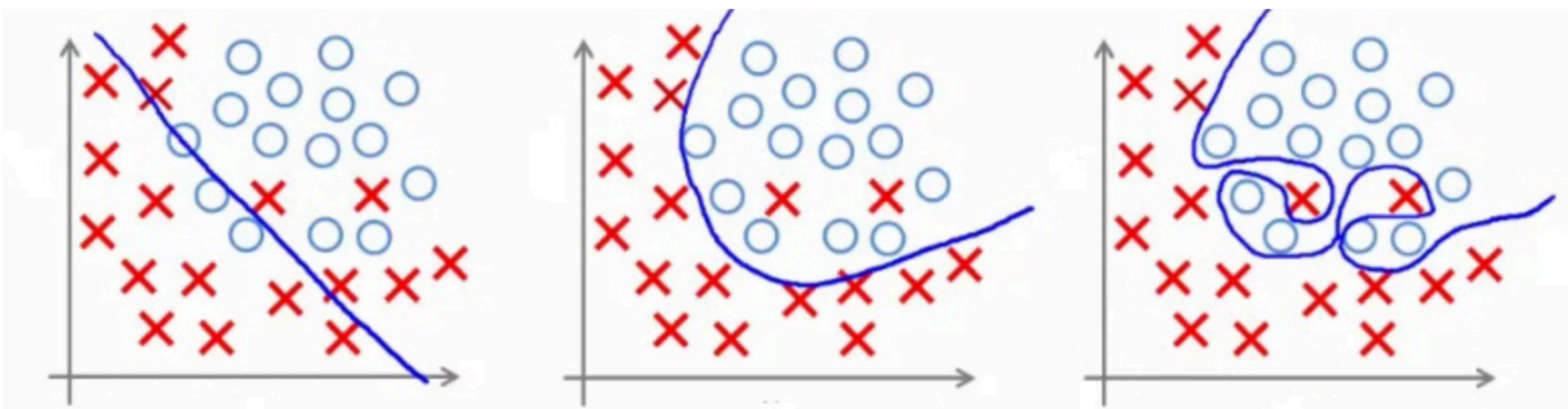


	MSE	MAE	R2
Линейная модель	0.472	0.586	0.0004
Полином 5-ой степени	0.047	0.179	0.9000
Полином 11-ой степени	0.000	0.000	1.0000

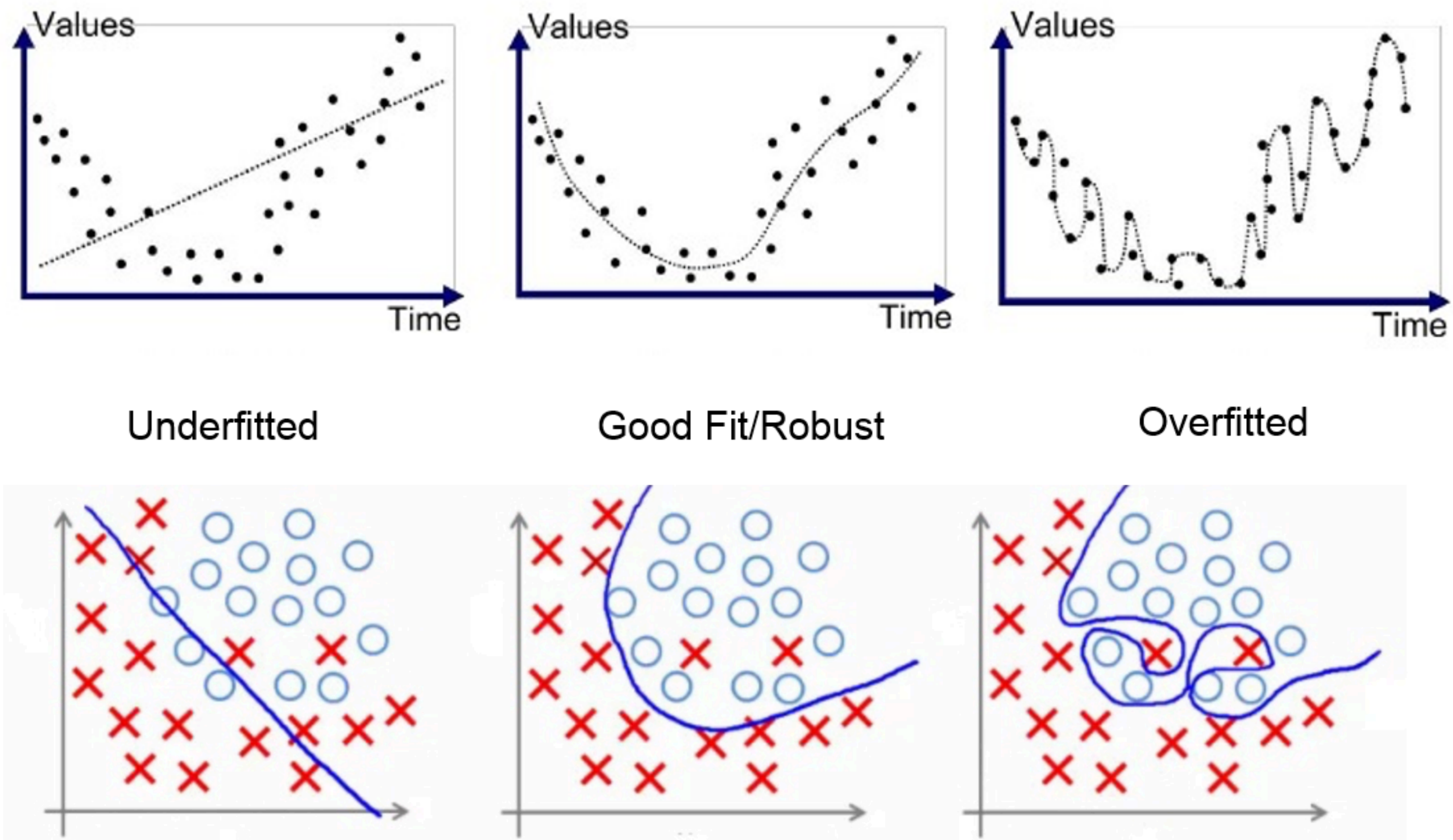
Обобщающая способность Полинома 11-ой степени отсутствует.

Мотивация валидации

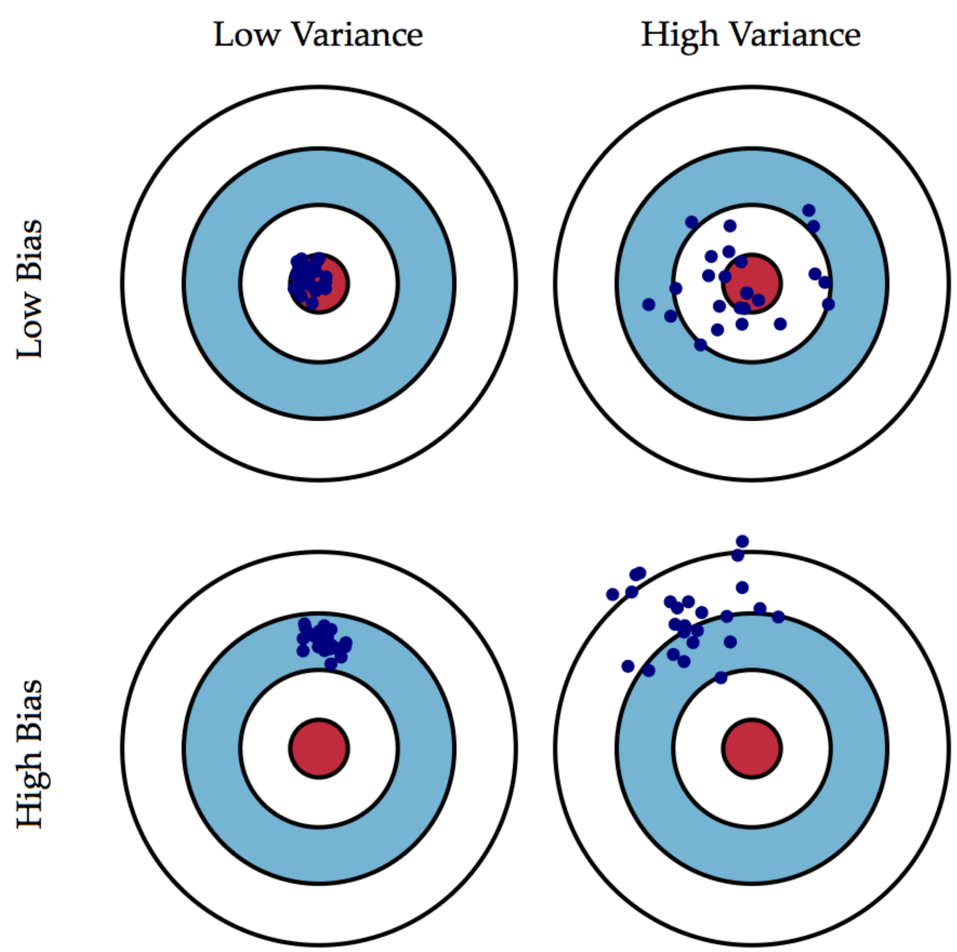


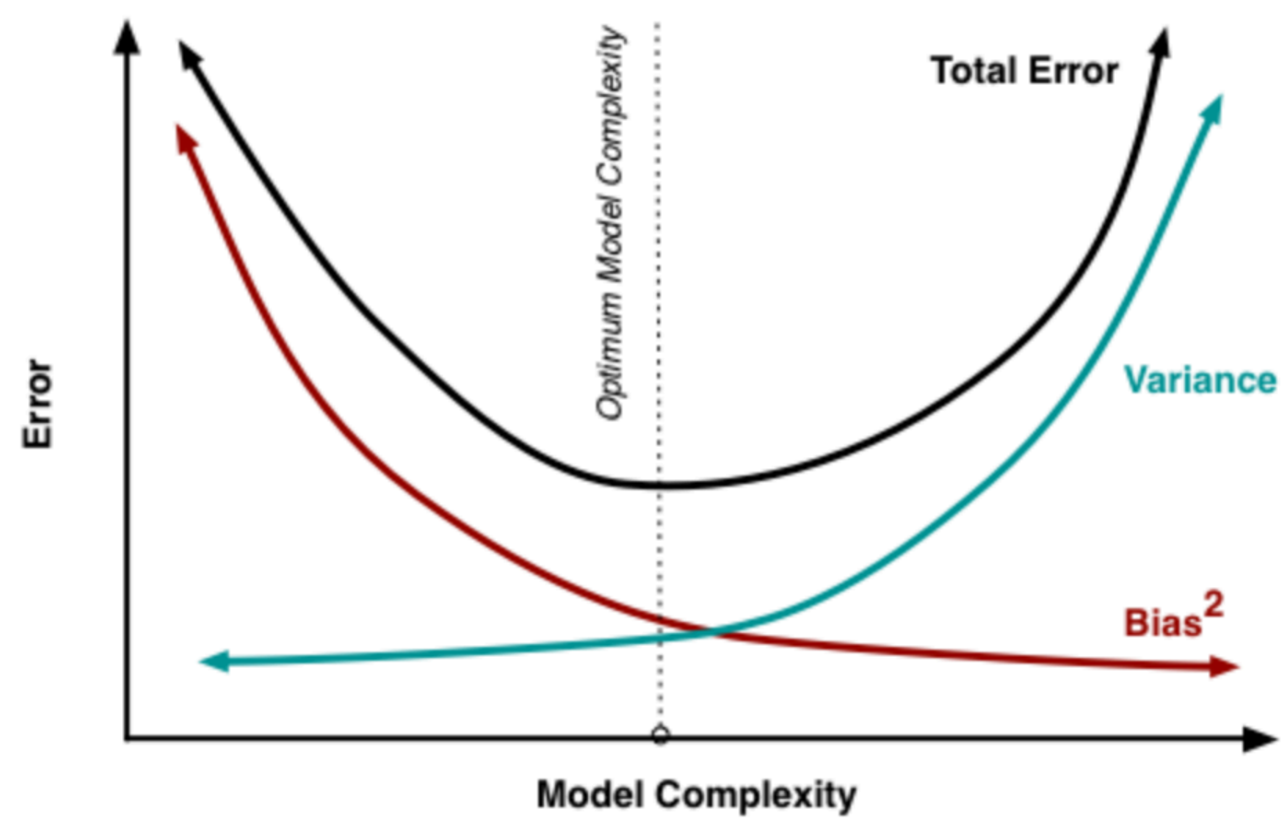


Мотивация валидации



Bias and Variance tradeoff



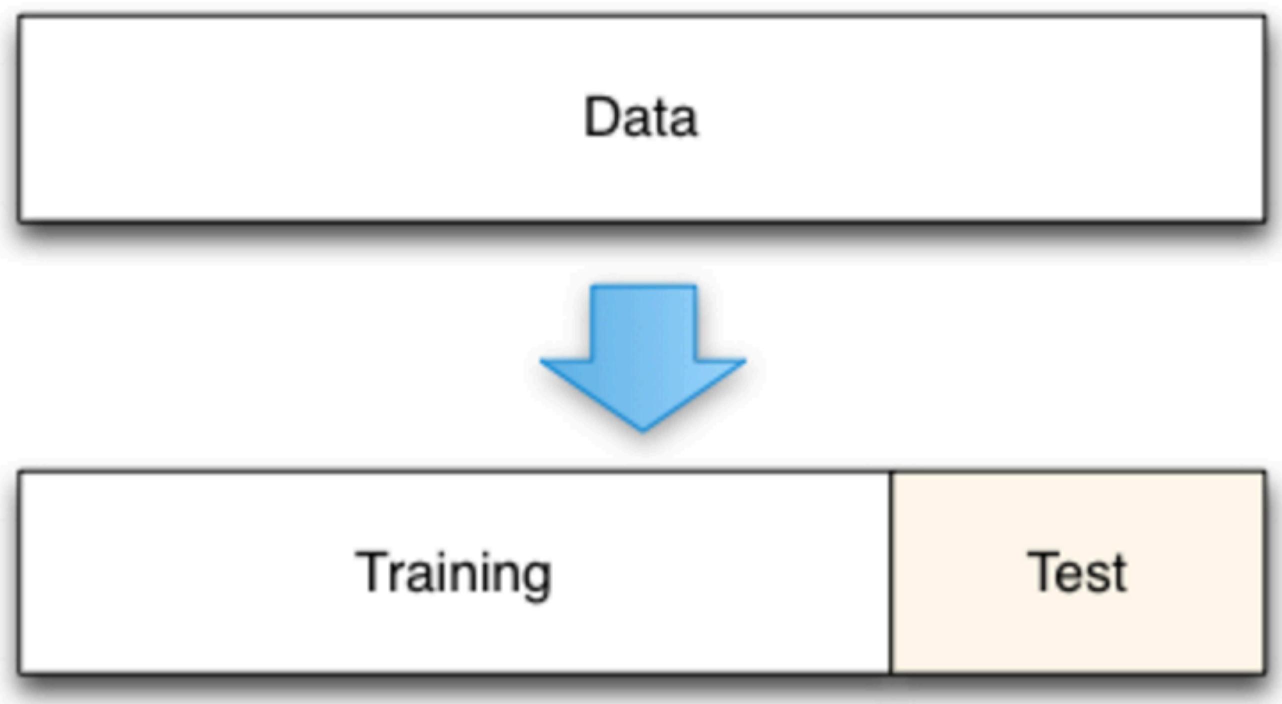


$$Err(x) = E\left[(Y - \hat{f}(x))^2\right]$$

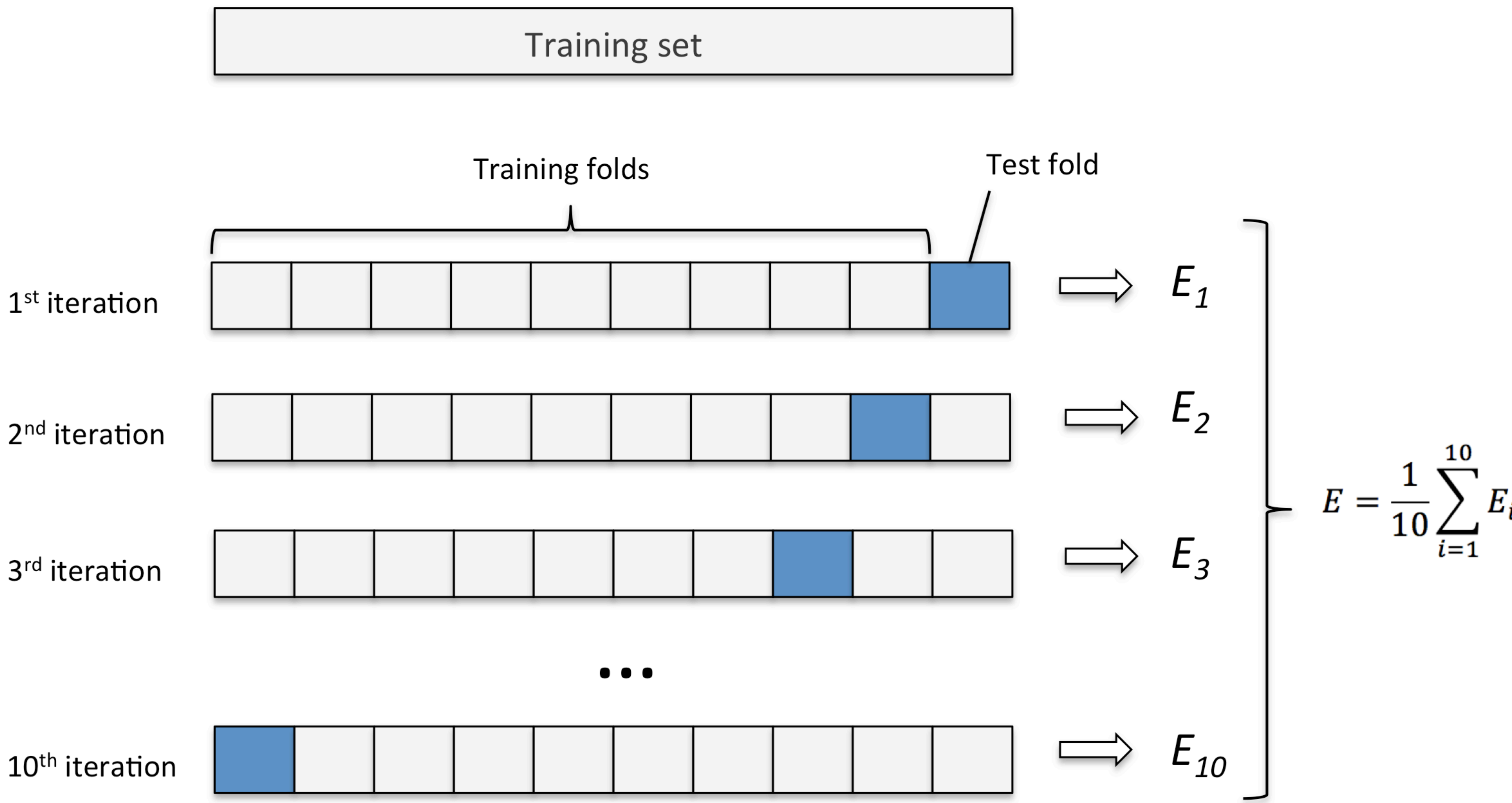
$$Err(x) = Bias^2 + Variance + IrreducibleError$$

http://scott.fortmann-roe.com/docs/BiasVariance.html

Стратегии валидации



Стратегии валидации



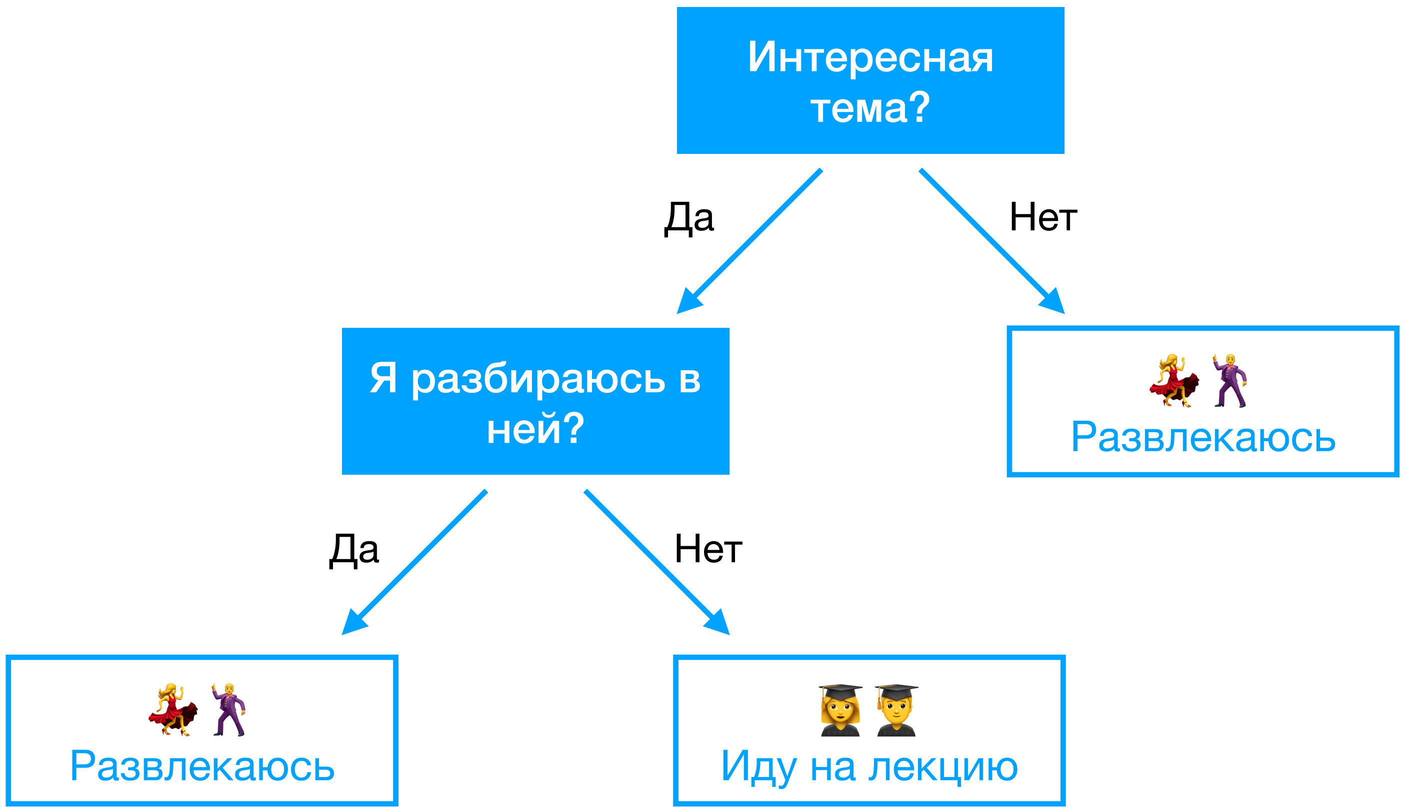
Деревья принятия решений

Логический алгоритм классификации, основанный на поиске конъюнктивных закономерностей.

Деревья принятия решений

Логический алгоритм классификации, основанный на поиске конъюнктивных закономерностей.

Пойду ли я на МО сегодня?

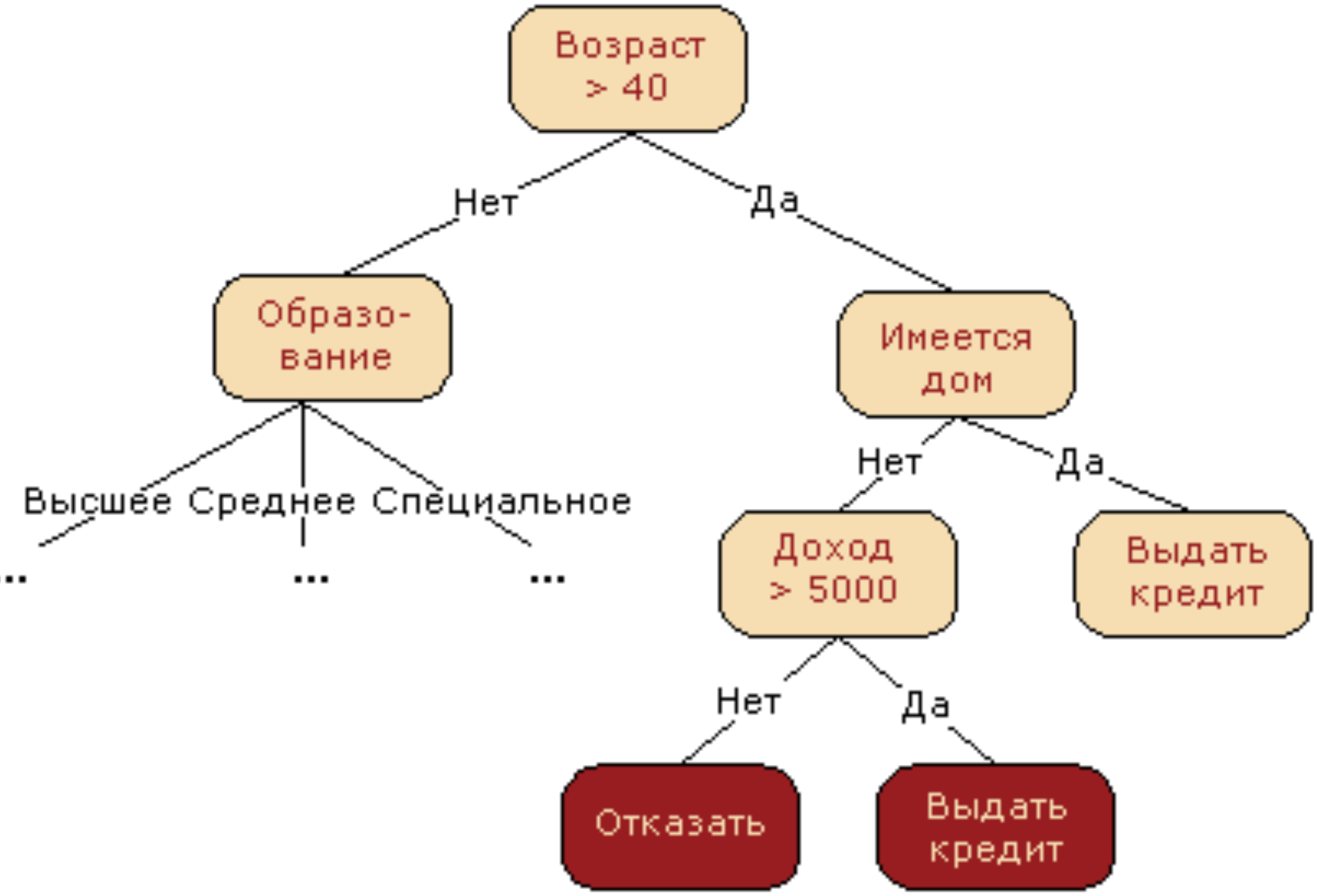


Деревья принятия решений

Дерево решений служит обобщением опыта экспертов, средством передачи знаний будущим сотрудникам или моделью бизнес-процесса компании.

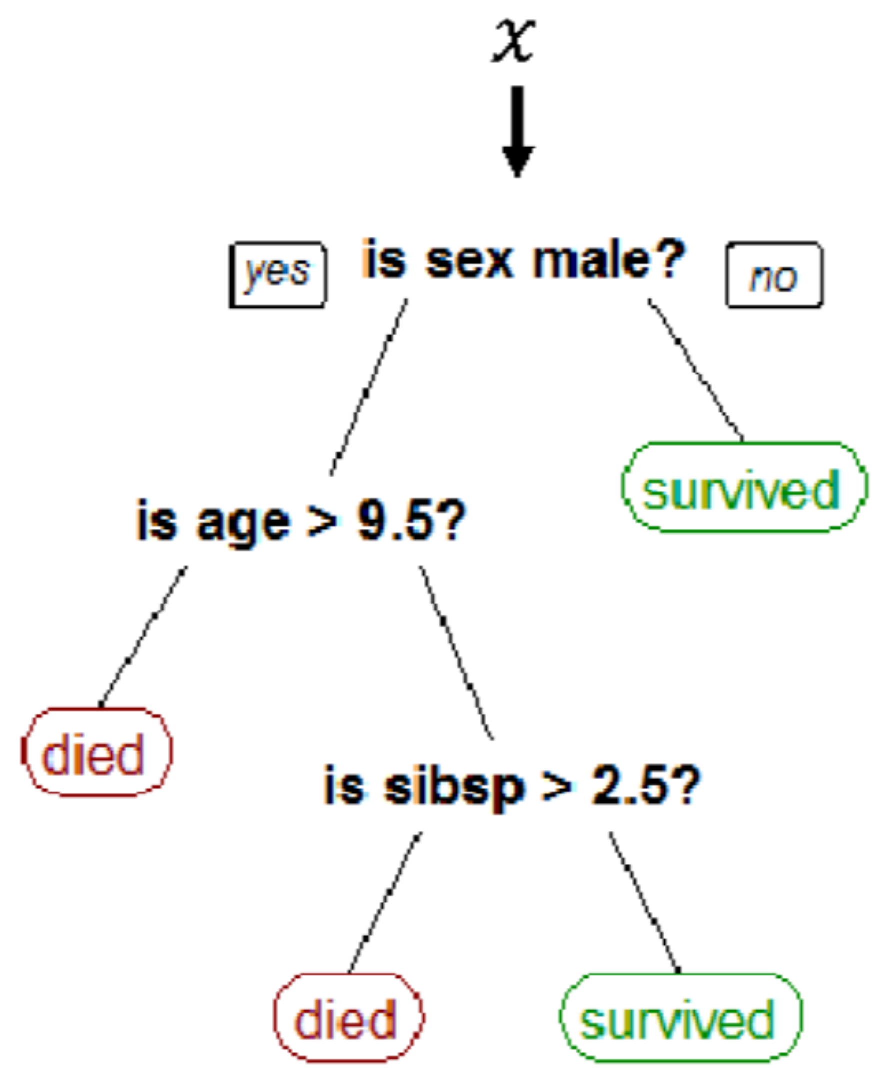
Решение о выдаче кредита заемщику принималось на основе некоторых интуитивно (или по опыту) выведенных правил, которые можно представить в виде дерева решений.

Пример: Кредитный скоринг

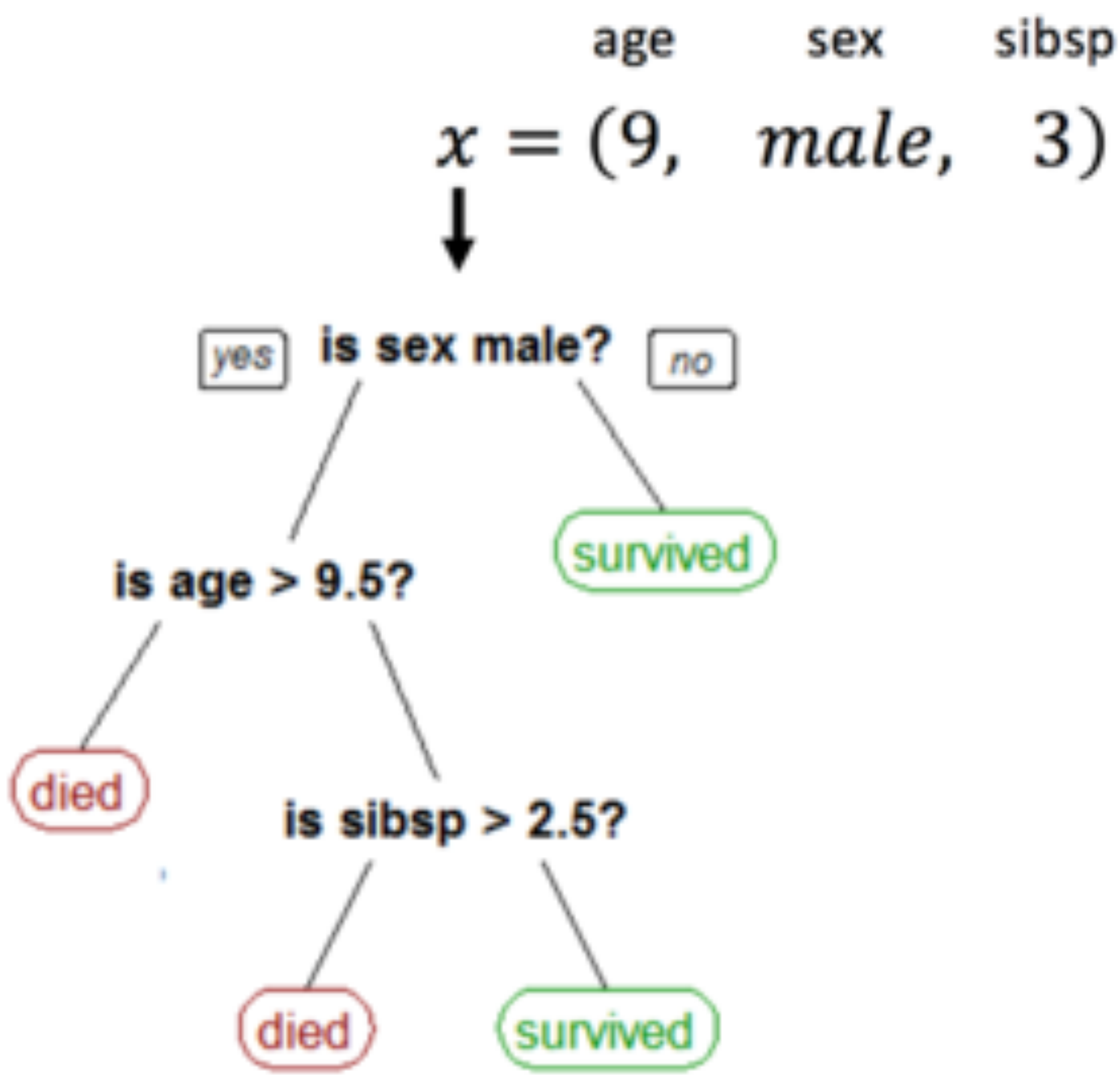


Деревья принятия решений

https://www.kaggle.com/c/titanic

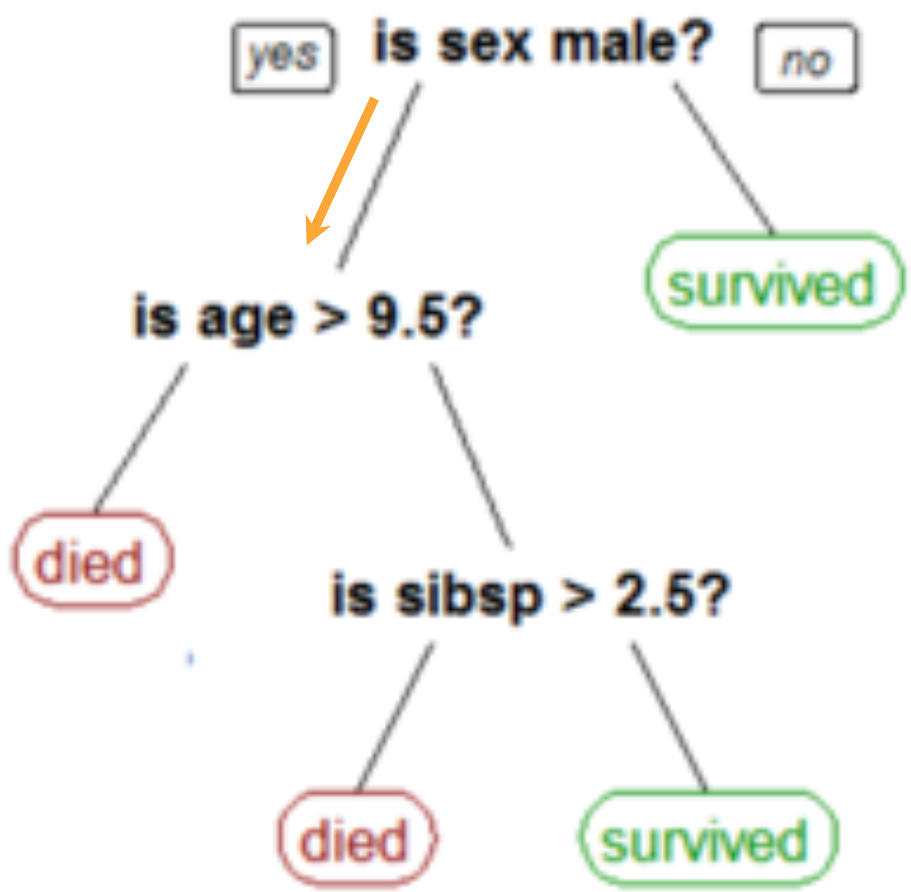


Деревья принятия решений

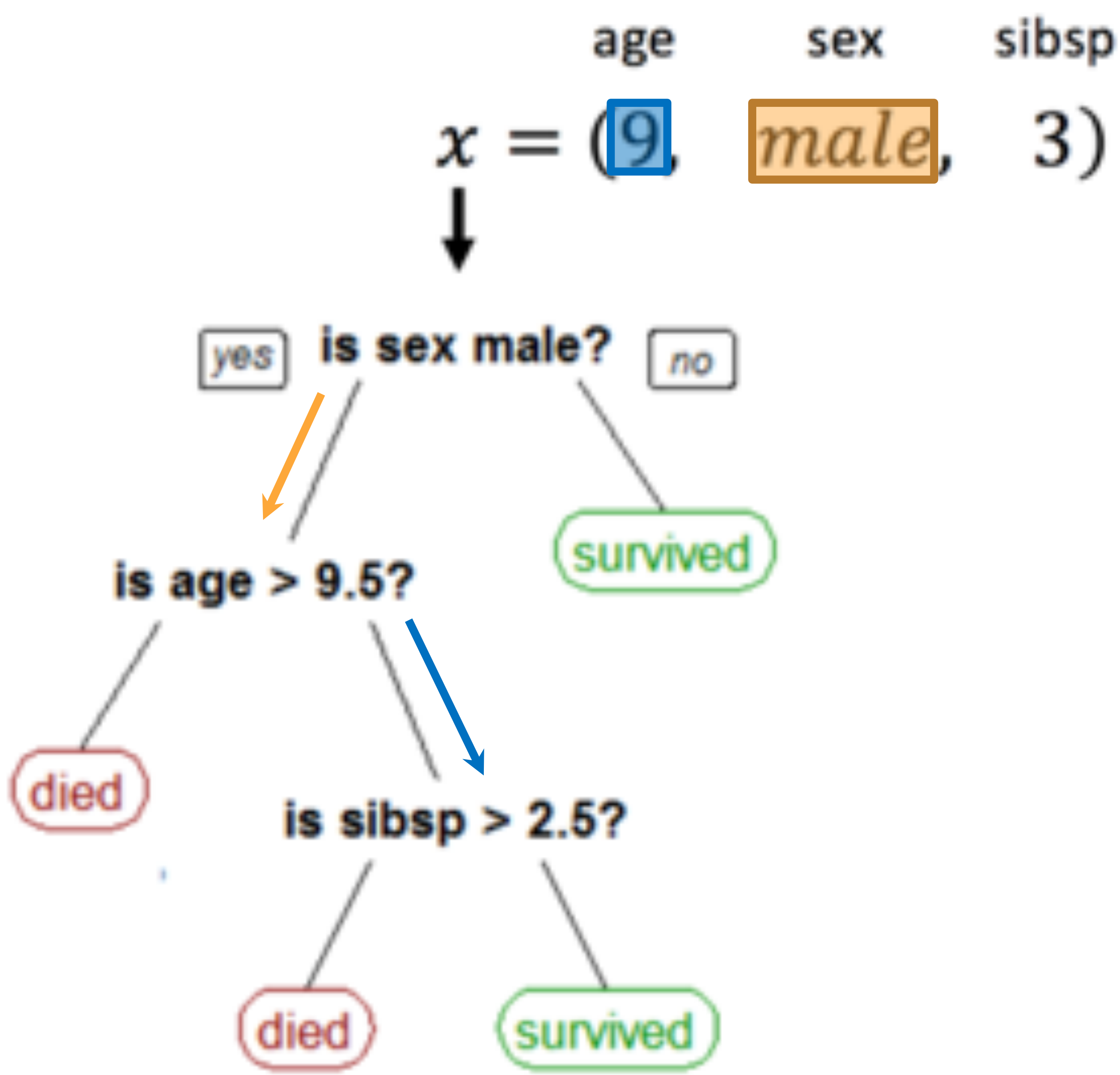


Деревья принятия решений

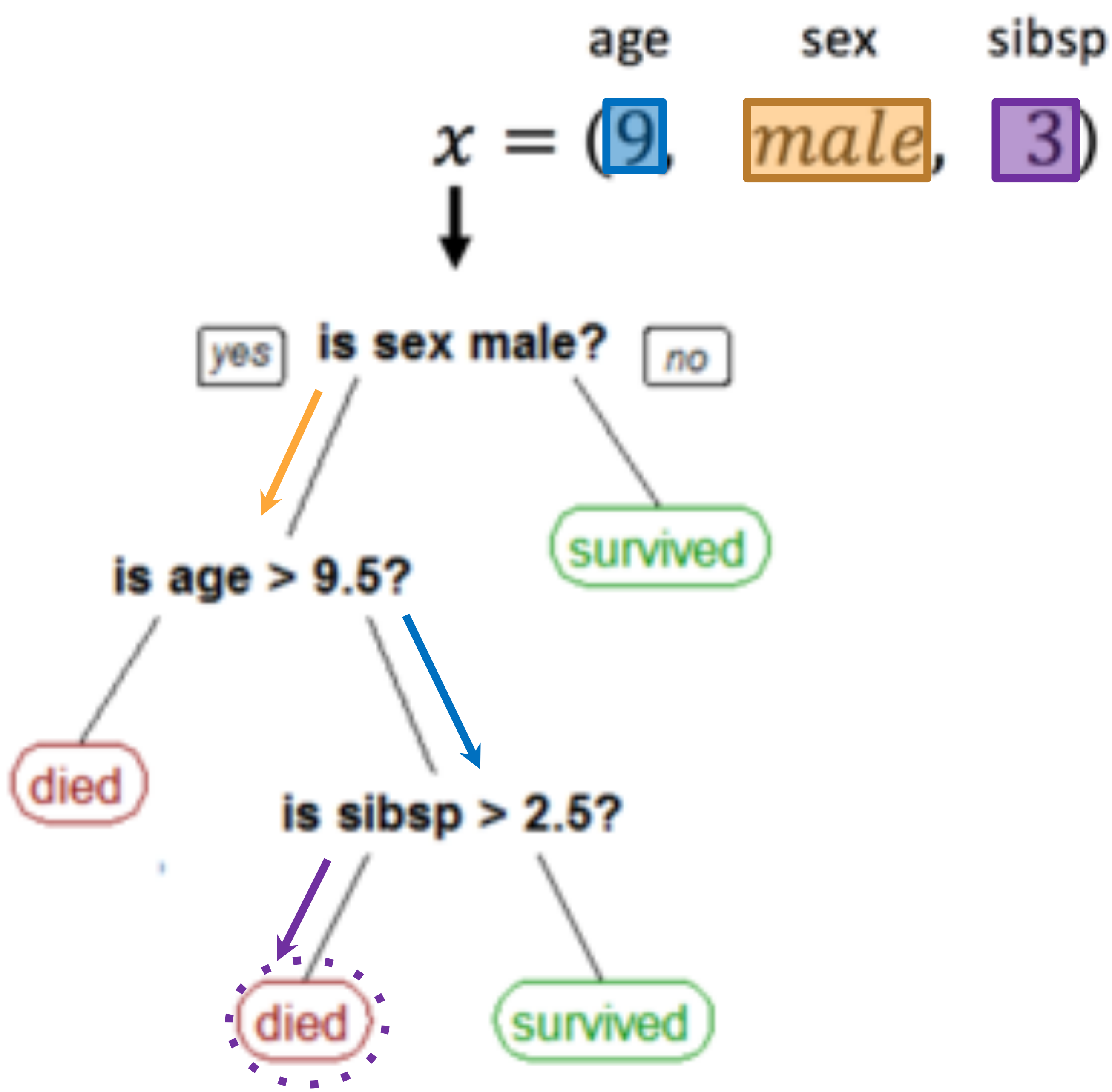
$$\begin{array}{cccc} & \text{age} & \text{sex} & \text{sibsp} \\ x = (& 9, & \boxed{male}, & 3) \end{array}$$



Деревья принятия решений



Деревья принятия решений



Как вырастить собственное дерево?

Игра «20 вопросов»

Построение дерева принятия решений

Энтропия Шеннона

$$S = -\sum_{i}^{N} p_i log_2(p_i)$$

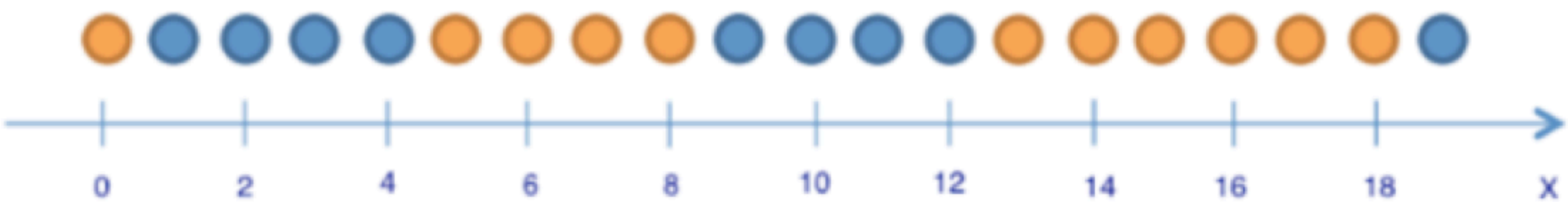
Энтропия *соответствует степени хаоса в системе. Чем выше энтропия, тем менее упорядочена система и наоборот.*

Прирост информации

$$IG(Q) = S_0 - \sum_{i}^{q} \frac{N_1}{N} S_i$$

Выбирается такое разбиение, при котором прирост информации максимален

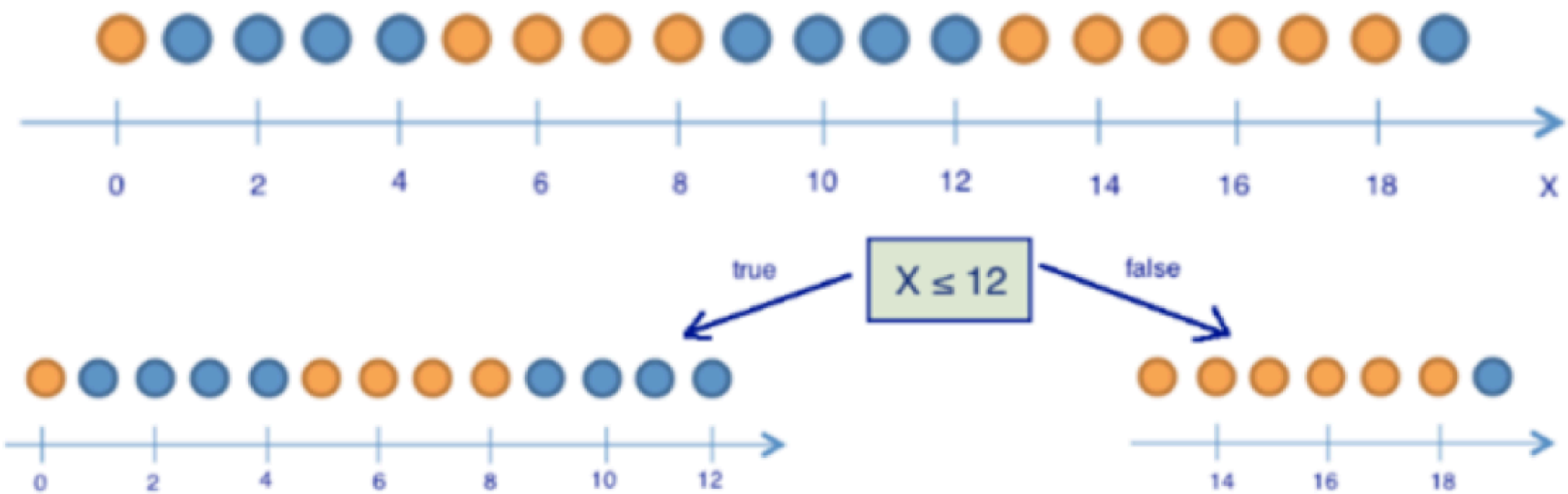
Построение дерева принятия решений



$$S = -\sum_{i}^{N} p_i log_2(p_i)$$

$$IG(Q) = S_0 - \sum_{i}^{q} \frac{N_1}{N} S_i$$

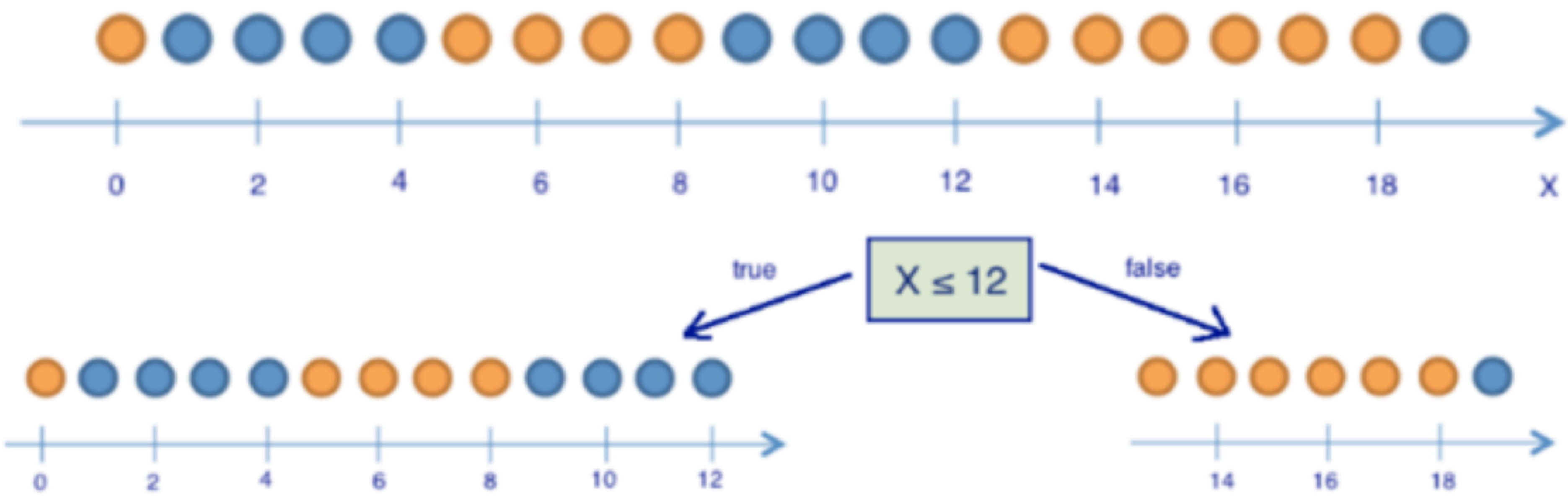
Построение дерева принятия решений



$$S = -\sum_{i}^{N} p_i log_2(p_i)$$

$$IG(Q) = S_0 - \sum_{i}^{q} \frac{N_1}{N} S_i$$

Построение дерева принятия решений



$$S = -\sum_{i}^{N} p_i log_2(p_i)$$

$$IG(Q) = S_0 - \sum_{i}^{q} \frac{N_1}{N} S_i$$

$$S_0 = -\frac{9}{20}\log_2\frac{9}{20} - \frac{11}{20}\log_2\frac{11}{20} \approx 1$$

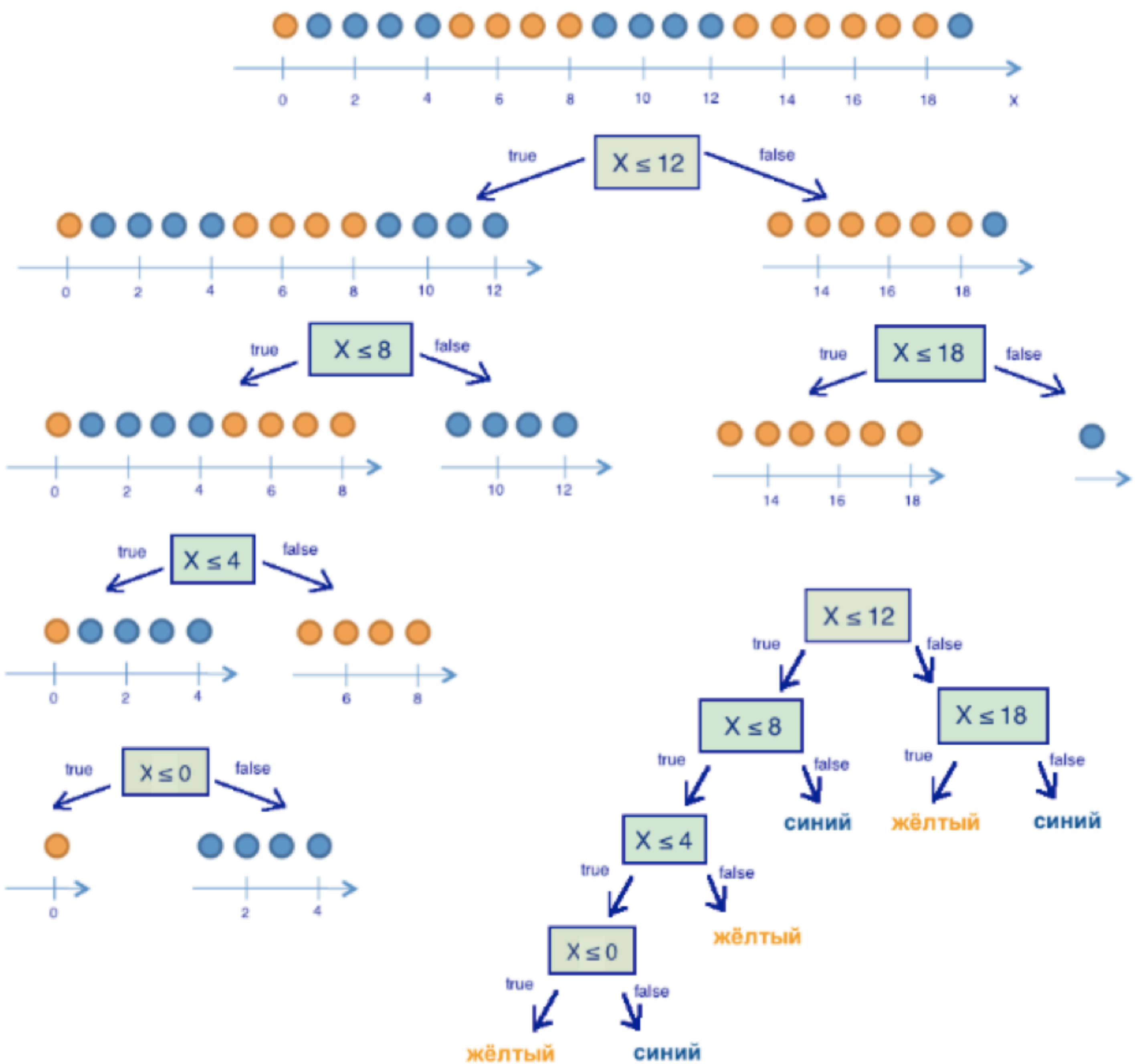
$$S_1 = -\frac{5}{13}\log_2\frac{5}{13} - \frac{8}{13}\log_2\frac{8}{13} \approx 0{,}96$$

$$S_2 = -\frac{6}{7}\log_2\frac{6}{7} - \frac{1}{7}\log_2\frac{1}{7} \approx 0{,}6$$

$$IG(x \leq 12) = S_0 - \frac{13}{20} \times S_i - \frac{7}{20} \times S_2 \approx 0{,}16$$

разделив шарики на две группы по признаку "координата меньше либо равна 12", мы уже получили более упорядоченную систему, чем в начале.

Построение дерева принятия решений



энтропия группы с шариками одного цвета равна 0, что соответствует представлению, что группа шариков одного цвета – упорядоченная.

Построение дерева принятия решений

$$S = -\sum_{i}^{N} p_i log_2(p_i)$$

Энтропийный критерий (Entropy criteria)

$$S = 1 - \sum_{k=1}^{n} (p_k)^2$$

Неопределенность Джини (Gini impurity)

$$S = 1 - \max_{k} p_k$$

Ошибка классификации (misclassification error)

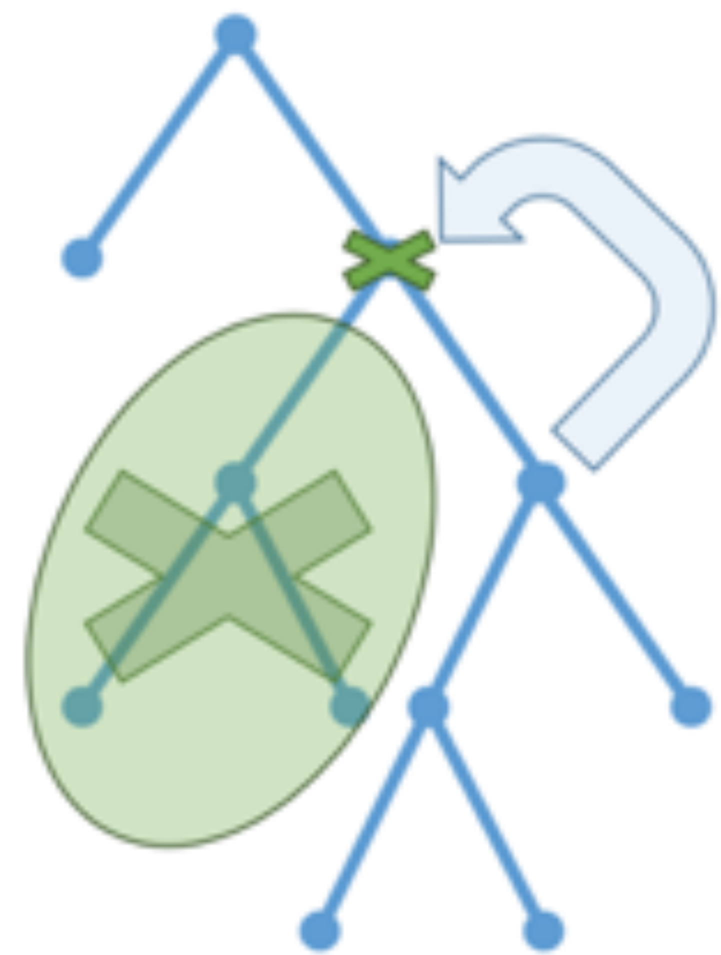
почти не используется

Построение дерева принятия решений

График энтропии очень близок к графику удвоенной неопределенности Джини, поэтому на практике работают почти одинаково.

Борьба с переобучением (Pruning)

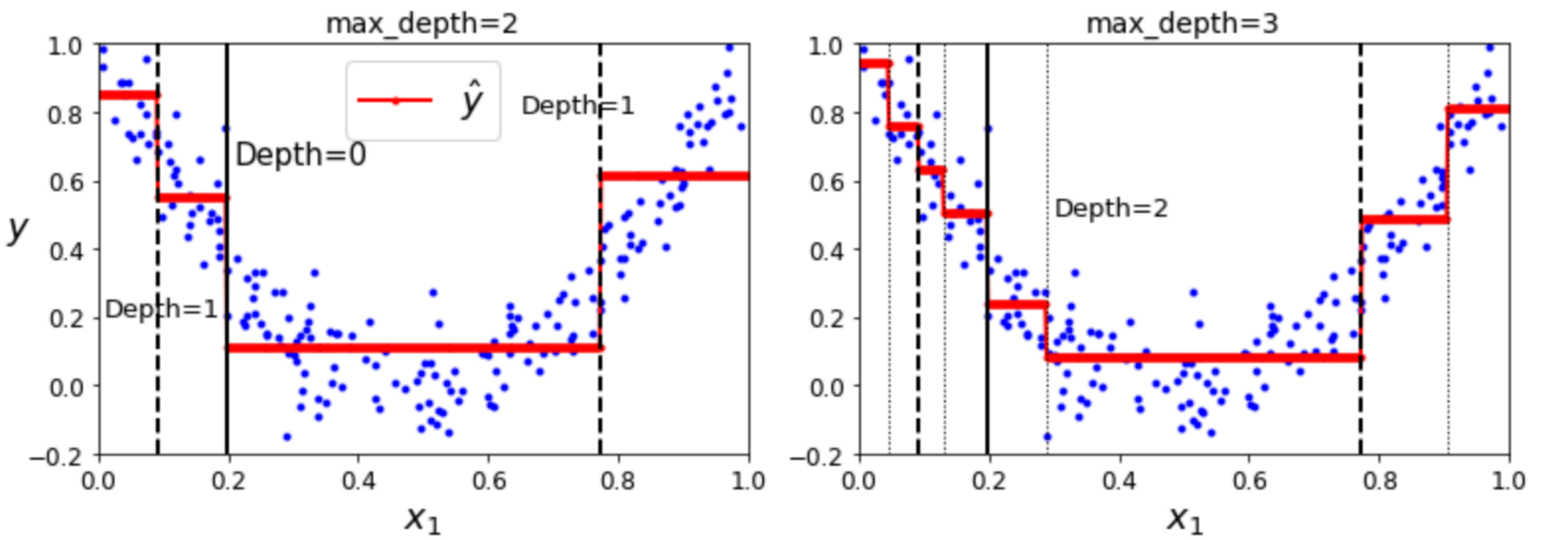
- Pre-pruning (ограничиваем до обучения)
  - Максимальная глубина дерева
  - Минимальное число элементов в узле дерева
  - Минимальное число элементов в для разбиения
  - Минимальный “Information gain”
  - …
- Post-pruning (упрощаем после обучения)
  - Reduced error pruning
  - Cost-complexity pruning
  - …



Деревья решений для задачи регрессии

sklearn.tree.DecisionTreeRegressor

(criterion='mse', splitter='best', max_depth=None, min_samples_split=2, min_samples_leaf=1, min_weight_fraction_leaf=0.0, max_features=None, random_state=None, max_leaf_nodes=None, min_impurity_decrease=0.0, min_impurity_split=None, presort=False)



Какой ответ деревьев в регрессии?

Какая стратегия поведения в листьях регрессионного дерева приводит к меньшему матожиданию ошибки по MSE: отвечать средним значением таргета на объектах обучающей выборки, попавших в лист, или отвечать таргетом для случайного объекта из листа (считая все объекты равновероятными)?

Какой ответ деревьев в регрессии?

Какая стратегия поведения в листьях регрессионного дерева приводит к меньшему матожиданию ошибки по MSE: отвечать средним значением таргета на объектах обучающей выборки, попавших в лист, или отвечать таргетом для случайного объекта из листа (считая все объекты равновероятными)?

- $\hat{y} = \frac{1}{n}\sum\limits_{i=1}^{n} c_i$

$$\mathsf{E}(y - \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} c_i)^2 = \mathsf{E}y^2 + \left(\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} c_i\right)^2 - 2\left(\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} c_i\right)\mathsf{E}y$$

- $\hat{y} = X$, где $X \sim U(c)$

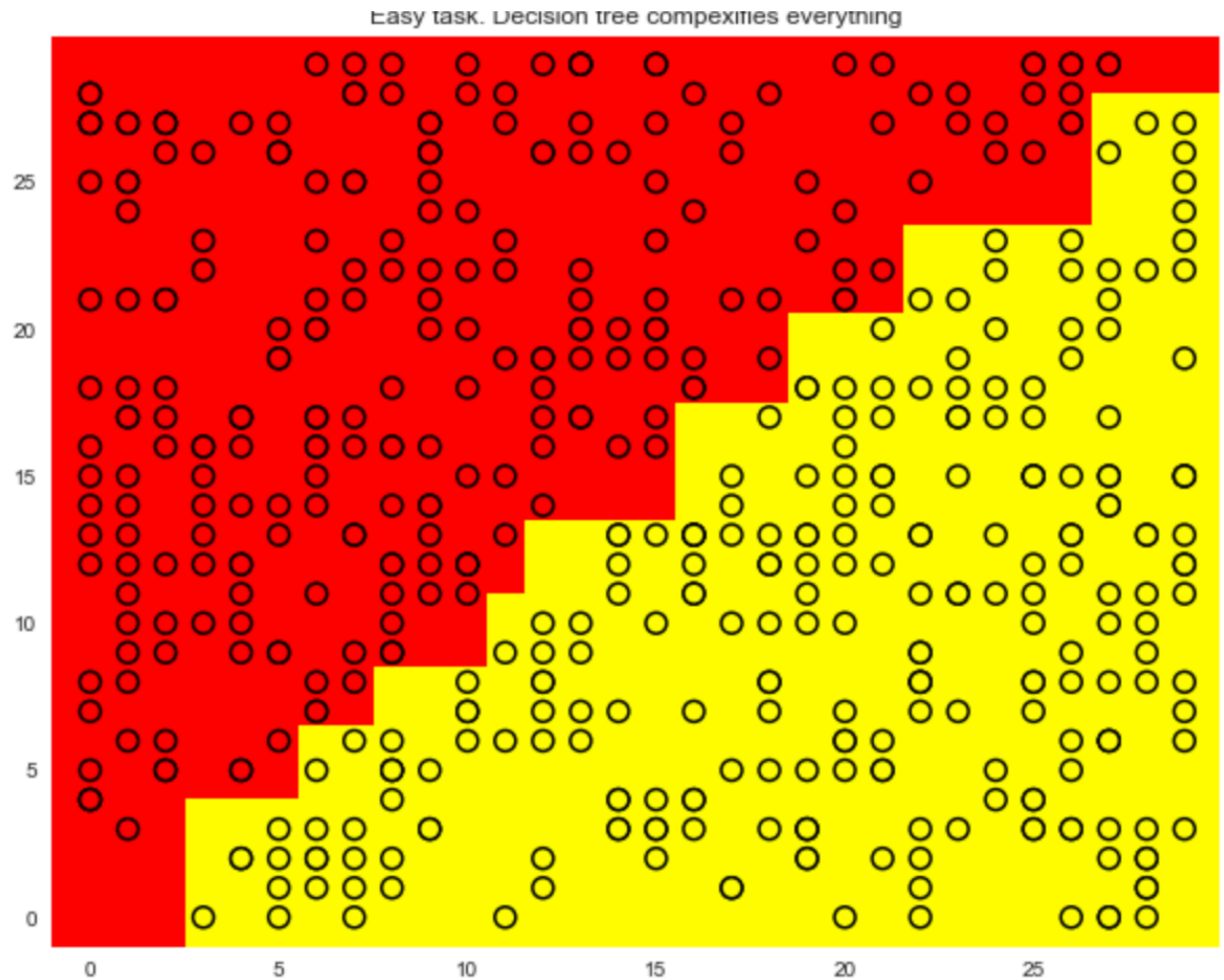
$$\mathsf{E}\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(y - c_i)^2 = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\mathsf{E}(y - c_i)^2 = \mathsf{E}y^2 + \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} c_i^2 - \frac{2}{n}\mathsf{E}y\sum_{i=1}^{n} c_i$$

Тогда выпишем их разность:

$$\mathsf{E}\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(y - c_i)^2 - \mathsf{E}(y - \bar{c})^2 = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} c_i^2 - \left(\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} c_i\right)^2 \geq 0 \text{ (По неравенсту Коши-Буняковского)}$$

Получили, что мат. ожидание ошибки для первого поведения меньше, чем для второго.

Сложные случаи для деревьев



Ссылки

1. Статья на habr: Метрики в задачах машинного обучения
2. Семинар из курса Евгения Соколова
3. Открытый курс машинного обучения: Тема 3
4. Семинар Евгения Соколова