





# Машинное обучение в науках о Земле

Михаил Криницкий

к.т.н., зав. Лабораторией машинного обучения в науках о Земле МФТИ с.н.с. Институт океанологии РАН им. П.П. Ширшова







## Задачи классификации

Михаил Криницкий

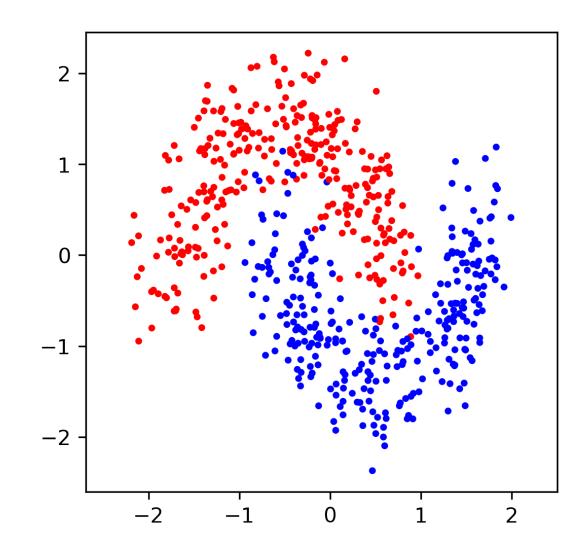
к.т.н., зав. Лабораторией машинного обучения в науках о Земле МФТИ с.н.с. Институт океанологии РАН им. П.П. Ширшова

#### КЛАССИФИКАЦИЯ ЗАДАЧ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ

формулируем задачу (в терминах машинного обучения)

- ○«Обучение с учителем»
  - восстановление регрессии
  - классификация

что я хочу? — метку класса «красный или синий?» (бинарная классификация)



**цель** – метка класса (у – <u>категориальная</u> переменная)

```
«спам / не-спам»
«мезоциклон / не-мезоциклон»
«кот / собака / лошадь»
«0 / 1 / 2 / 3 / 4 / 5 / 6 / 7 / 8 / 9»
«есть дельфин / нет дельфина»
```

- у категориальная, бинарная
- у категориальная, бинарная
- у категориальная, 3 класса
- у категориальная, 10 классов
- у категориальная, бинарная

Простейший пример: объекты описываются действительным признаком  $oldsymbol{x}$ 

целевая переменная y – бинарная, классы: A, B; по 1000 экземпляров каждого класса пусть для класса y = A значения  $x \sim \mathcal{N}(\mu_A, \sigma_A)$ , для класса y = B значения  $x \sim \mathcal{N}(\mu_B, \sigma_B)$ 

Базируясь на этих данных, каково должно быть решение (значение y) при:

$$x = -10$$

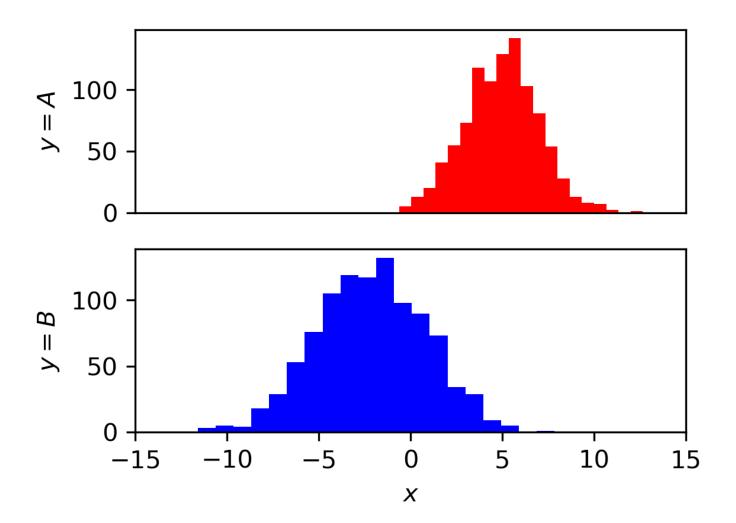
$$x = -5$$

$$x = 2$$

$$x = 5$$

$$x = 10$$

$$x = 15$$

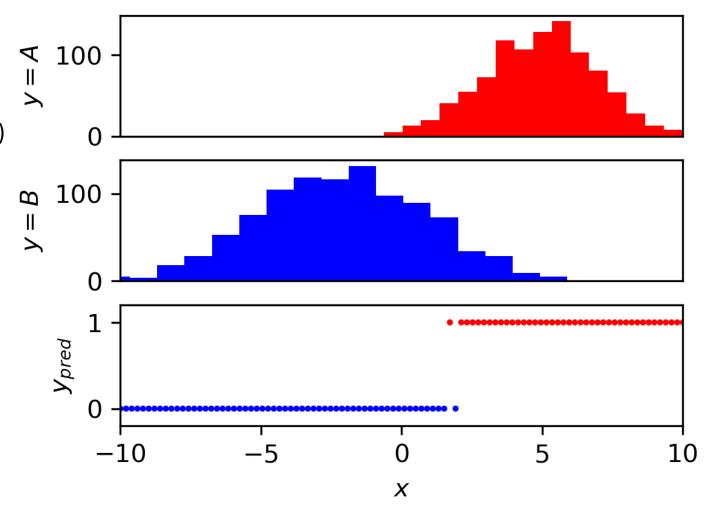


Простейший пример: объекты описываются действительным признаком  $oldsymbol{x}$ 

целевая переменная y – бинарная, классы: A, B; по 1000 экземпляров каждого класса пусть для класса y = A значения  $x \sim \mathcal{N}(\mu_A, \sigma_A)$ , для класса y = B значения  $x \sim \mathcal{N}(\mu_B, \sigma_B)$ 

Подход №1: **KNN** (метод K ближайших соседей)

- 1. выбрать K ближайших соседей для нового объекта (! нужно определить меру близости !)
- осреднить (можно с разными весами)
   целевую переменную по этим объектам
   («простое голосование», «majority vote» или
   «взвешенное голосование», «weighted vote»)
- 3. считать полученный результат значением целевой переменной на новом объекте

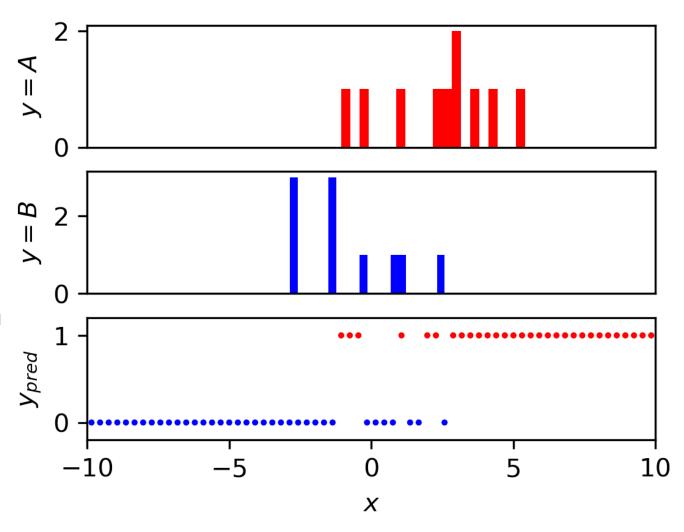


Подход №1: KNN (метод K ближайших соседей)

- простой
- быстрый
- легко настраивается. Гиперпараметр K регулирует «сложность» модели

## А ЧТО ЕСЛИ ДАННЫХ МАЛО?..

- требуется большое количество обучающих данных
- обучающие данные должны быть распределены достаточно плотно в исследуемой области x
- не обобщает закономерности в данных



Подход получше — оценить **вероятность** классов A и B для объекта, описываемого значением x.

$$P(Y = k | X = x)$$

Подход получше — оценить **вероятность** классов A и B для объекта, описываемого значением x.

$$P(Y|X) = \frac{P(X|Y) P(Y)}{P(X)}$$

Кстати, если нужно **принять решение** относительно значения Y при определенном значении  $x_i$ , помни, что  $P(x_i)$  – константа, которую можно не учитывать при сравнении  $P(Y = A | X = x_i)$  и  $P(Y = B | X = x_i)$ 

$$P(X) = \sum_{y_i} P(X|Y = y_i)P(Y = y_i)$$
 формула полной вероятности

Подход получше — оценить **вероятность** классов A и B для объекта, описываемого значением x.

$$P(Y|X) = \frac{P(X|Y) P(Y)}{P(X)}$$

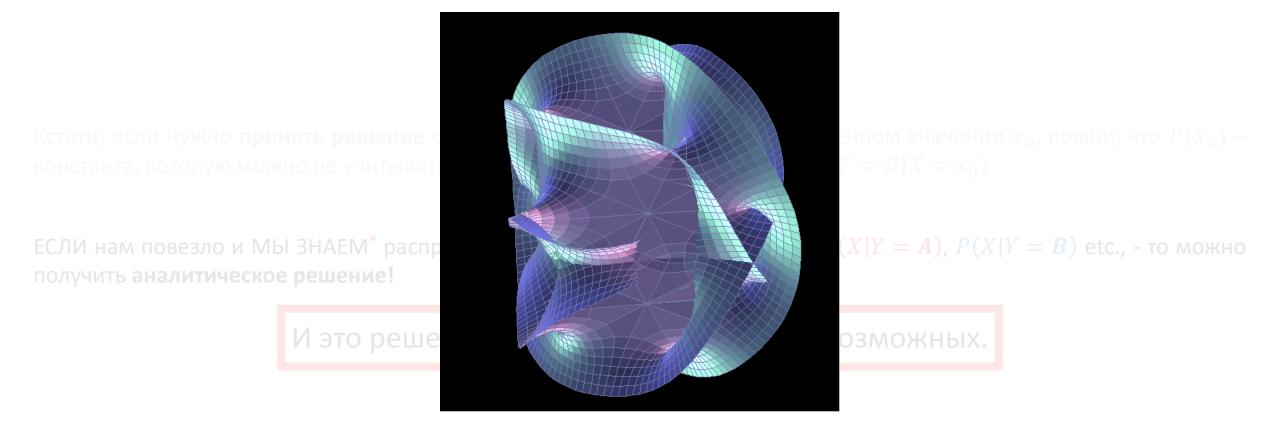
Кстати, если нужно **принять решение** относительно значения Y при определенном значении  $x_0$ , помни, что  $P(x_0)$  – константа, которую можно не учитывать при сравнении  $P(Y=A|X=x_0)$  и  $P(Y=B|X=x_0)$ 

ЕСЛИ нам повезло и МЫ ЗНАЕМ\* распределения X для каждого из классов P(X|Y=A), P(X|Y=B) etc., - то можно получить аналитическое решение!

И это решение будет ЛУЧШИМ из всех возможных.

\*что значит «мы знаем распределения P(X|Y=A), P(X|Y=B)»?

Подход получше — оценить **вероятность** классов A и B для объекта, описываемого значением x



<sup>\*</sup>что значит «мы знаем распределения P(X|Y=A), P(X|Y=B)»?

$$P(Y|X) = \frac{P(X|Y) \ P(Y)}{P(X)}$$

ЕСЛИ нам повезло и МЫ ЗНАЕМ (или полагаем как допущение в процессе решения) распределения X для каждого из классов P(X|Y=A), P(X|Y=B) etc., - то можно получить **аналитическое решение!** 

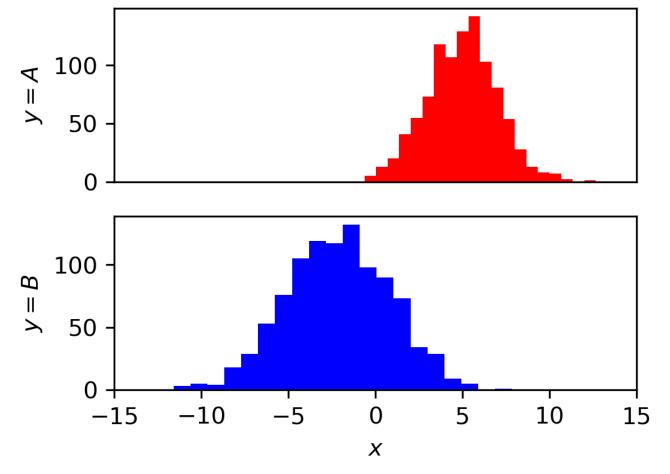
объекты описываются действительным признаком x целевая переменная y — бинарная пусть для класса y = A значения  $x \sim \mathcal{N}(\mu_A, \sigma_A)$ , для класса y = B значения  $x \sim \mathcal{N}(\mu_B, \sigma_B)$ 

$$\mu_A = 5$$

$$\mu_B = -2$$

$$\sigma_A = 2$$

$$\sigma_B = 3$$



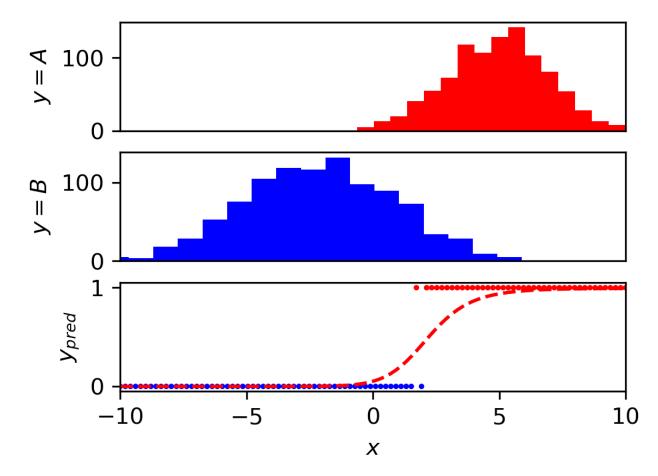
$$P(Y|X) = \frac{P(X|Y) P(Y)}{P(X)}$$

ЕСЛИ нам повезло и МЫ ЗНАЕМ (или полагаем как допущение в процессе решения) распределения X для каждого из классов P(X|Y=A), P(X|Y=B) etc., - то можно получить **аналитическое решение!** 

$$P(Y = \mathbf{B}|X = x) = \frac{e^{-\frac{(x+2)^2}{2*9}} * \frac{1}{2}}{e^{-\frac{(x-5)^2}{2*4}} * \frac{1}{2} + e^{-\frac{(x+2)^2}{2*9}} * \frac{1}{2}}$$

«Байесовский классификатор»

(не путать с «naïve bayes»)



Подход получше — оценить **вероятность** классов A и B для объекта, описываемого значением x.

$$P(Y|X) = \frac{P(X|Y) P(Y)}{P(X)}$$

**ЕСЛИ нам повезло** и мы знаем распределения X для каждого из классов P(X|Y=A), P(X|Y=B) etc., то можно получить **аналитическое решение!** 

И это решение будет ЛУЧШИМ из всех возможных.

А ЧТО ЕСЛИ НАМ НЕ ПОВЕЗЛО? \*

\* чаще всего так и бывает

Подход получше — оценить **вероятность** классов A и B для объекта, описываемого значением x.

$$P(Y|X) = \frac{P(X|Y) P(Y)}{P(X)}$$

**ЕСЛИ нам повезло** и мы знаем распределения X для каждого из классов P(X|Y = A), P(X|Y = B) etc., то можно получить **аналитическое решение!** 

И это решение будет ЛУЧШИМ из всех возможных.

#### А ЧТО ЕСЛИ НАМ НЕ ПОВЕЗЛО???

Надо как-то оценить распределения P(X|Y=A), P(X|Y=B) руководствуясь данными, которые у нас на руках

Naïve bayes classifier, «наивный байесовский классификатор»

$$P(Y|X) \propto P(X|Y) P(Y)$$

можно забыть про P(X = x)

$$P(X|Y) = P(x_1, x_2, x_3 ... x_p | Y)$$

Naïve bayes classifier, «наивный байесовский классификатор»

$$P(Y|X) \propto P(X|Y) P(Y)$$

можно забыть про P(X = x)

$$P(X|Y) = P(x_1, x_2, x_3 \dots x_p | Y) = P(x_2, x_3 \dots x_p | Y, x_1) * P(x_1 | Y)$$

$$P(x_1, \dots) = P(\dots | x_1) * P(x_1)$$

Naïve bayes classifier, «наивный байесовский классификатор»

$$P(Y|X) \propto P(X|Y) P(Y)$$

можно забыть про P(X = x)

$$P(X|Y) = P(x_1, x_2, x_3 \dots x_p | Y) = P(x_2, x_3 \dots x_p | Y, x_1) * P(x_1 | Y) = \dots$$

$$= P(x_1 | Y) * P(x_2 | Y, x_1) * P(x_3 | Y, x_1, x_2) * \dots * P(x_p | Y, x_1, \dots, x_{p-1}) = \dots$$

Naïve bayes classifier, «наивный байесовский классификатор»

$$P(Y|X) \propto P(X|Y) P(Y)$$

можно забыть про P(X = x)

$$P(X|Y) = P\big(x_1, x_2, x_3 \dots x_p \big| Y\big) = P\big(x_2, x_3 \dots x_p \big| Y, x_1\big) * P(x_1|Y) = \cdots$$

$$= P(x_1|Y) * P(x_2|Y,x_1) * P(x_3|Y,x_1,x_2) * \cdots * P(x_p|Y,x_1,\dots,x_{p-1}) = \cdots$$

наивное предположение: переменные  $x_i$  условно независимы:

$$P(x_k|Y, x_1, x_2, ..., x_{k-1}) = P(x_k|Y)$$

... = 
$$P(x_1|Y) * P(x_2|Y) * P(x_3|Y) * \cdots * P(x_p|Y)$$

Naïve bayes classifier, «наивный байесовский классификатор»

$$P(Y|X) \propto P(X|Y) P(Y)$$

можно забыть про P(X = x)

$$P(X|Y) = P(x_1, x_2, x_3 \dots x_p | Y) = P(x_2, x_3 \dots x_p | Y, x_1) * P(x_1 | Y) = \cdots$$

$$= P(x_1|Y) * P(x_2|Y,x_1) * P(x_3|Y,x_1,x_2) * \cdots * P(x_p|Y,x_1,\dots,x_{p-1})$$

наивное предположение: переменные  $x_i$  условно независимы:

$$P(x_k|Y, x_1, x_2, ..., x_{k-1}) = P(x_k|Y)$$

Остается оценить распределения  $P(x_k|Y)$  для всех k независимо друг от друга – и можно подставлять в оценку вероятности P(Y|X).

Naïve bayes classifier, «наивный байесовский классификатор»

$$P(Y|X) \propto P(X|Y) P(Y)$$

можно забыть про P(X = x)

$$P(X|Y) = P(x_1, x_2, x_3 \dots x_p | Y) = P(x_2, x_3 \dots x_p | Y, x_1) * P(x_1 | Y) = \cdots$$

$$= P(x_1|Y) * P(x_2|Y,x_1) * P(x_3|Y,x_1,x_2) * \cdots * P(x_p|Y,x_1,\dots,x_{p-1})$$

наивное предположение: переменные  $x_i$  условно независимы:

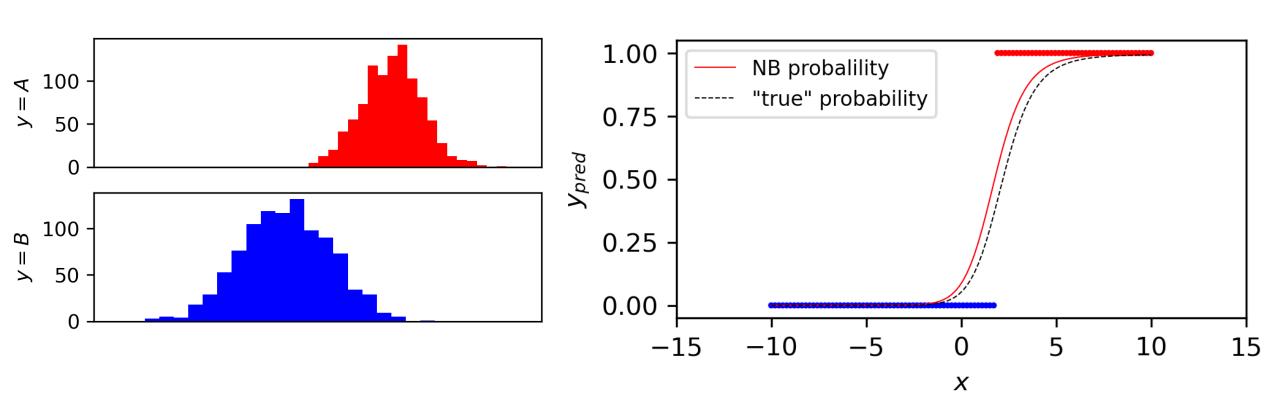
$$P(x_k|Y, x_1, x_2, ..., x_{k-1}) = P(x_k|Y)$$

Остается оценить распределения  $P(x_k|Y)$  для всех k независимо друг от друга – и можно подставлять в оценку вероятности P(Y|X).

Оценка распределений  $P(x_k|Y)$  может базироваться на предположении об их нормальности, - тогда нужно оценить:

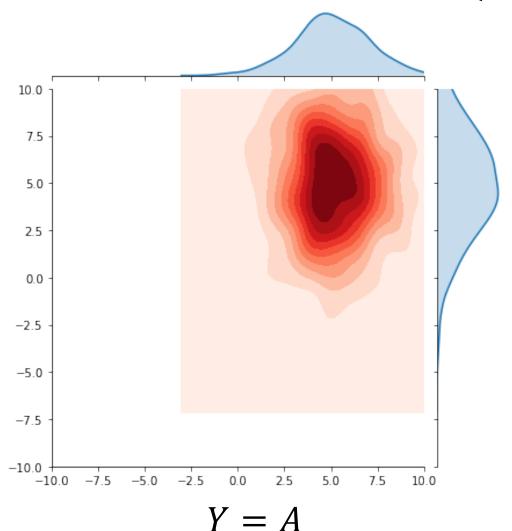
- выборочное среднее (оценка параметра  $\mu$ )
- $\,$  выборочную дисперсию (оценка параметра  $\sigma^2$ ).

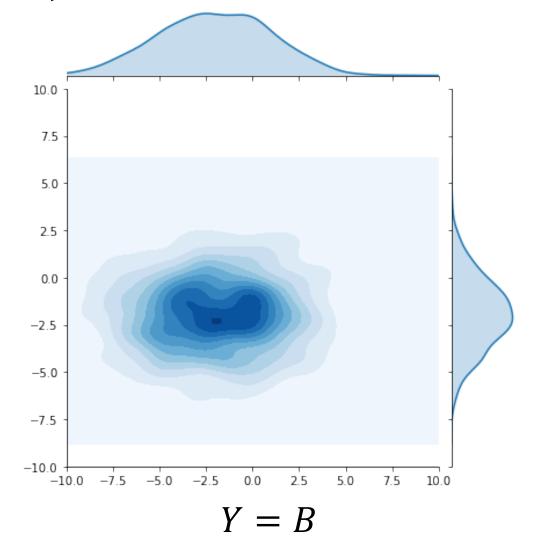
Naïve bayes classifier, «наивный байесовский классификатор»



Цель: оценить **вероятность** классов A (класс "1") и B (класс "0") для объекта, описываемого значением x.

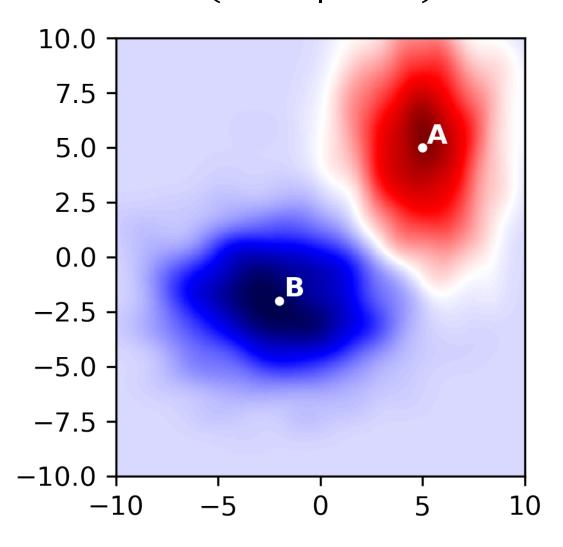
$$P(Y = k | X = x)$$





Цель: оценить **вероятность** классов A (класс "1") и B (класс "0") для объекта, описываемого значением x.

$$P(Y = k | X = x)$$



#### Naïve bayes classifier, «наивный байесовский классификатор»

$$P(Y|X) \propto P(X|Y) P(Y)$$

можно забыть про P(X = x)

$$P(X|Y) = P\big(x_1, x_2, x_3 \dots x_p \big| Y\big) = P\big(x_2, x_3 \dots x_p \big| Y, x_1\big) * P(x_1|Y) = \cdots$$

$$= P(x_1|Y) * P(x_2|Y,x_1) * P(x_3|Y,x_1,x_2) * \cdots * P(x_p|Y,x_1,\dots,x_{p-1})$$

наивное предположение: переменные  $x_i$  условно независимы:

$$P(x_p|Y, x_1, x_2, ..., x_{p-1}) = P(x_p|Y)$$

Остается оценить распределения  $P(x_k|Y)$  для всех k независимо друг от друга – и можно подставлять в оценку вероятности P(Y|X). Оценка распределения может базироваться на предположении об их нормальности, - тогда нужно оценить выборочное среднее (оценка параметра  $\mu$ ) и выборочную дисперсию (оценка параметра  $\sigma^2$ ).

#### NOTE!

**LDA** (Linear Discriminant Analysis, метод линейного дискриминантного анализа) — то же самое, но в предположении, что (а) распределение  $P(x_p|Y)$  - **нормальное**; (б) для всех классов **дисперсия одинакова**.

#### Naïve bayes classifier, «наивный байесовский классификатор»

$$P(Y|X) \propto P(X|Y) P(Y)$$

можно забыть про P(X = x)

$$P(X|Y) = P(x_1, x_2, x_3 \dots x_p | Y) = P(x_2, x_3 \dots x_p | Y, x_1) * P(x_1 | Y) = \cdots$$

$$= P(x_1|Y) * P(x_2|Y,x_1) * P(x_3|Y,x_1,x_2) * \cdots * P(x_p|Y,x_1,\dots,x_{p-1})$$

наивное предположение: переменные  $x_i$  условно независимы:

$$P(x_p|Y, x_1, x_2, ..., x_{p-1}) = P(x_p|Y)$$

Остается оценить распределения  $P(x_k|Y)$  для всех k независимо друг от друга – и можно подставлять в оценку вероятности P(Y|X). Оценка распределения может базироваться на предположении об их нормальности, - тогда нужно оценить выборочное среднее (оценка параметра  $\mu$ ) и выборочную дисперсию (оценка параметра  $\sigma^2$ ).

#### NOTE!

QDA (Quadratic Discriminant Analysis, метод квадратичного дискриминантного анализа) — то же самое, но в предположениях, что (а) распределение  $P(x_p|Y)$  - <u>нормальное</u>; (б) для всех компонент  $x_i$  <u>дисперсии разные</u> (и здесь  $\sigma^2$  становится матрицей ковариаций  $\Sigma^2$ ). NB с нормальным распределением  $P(x_p|Y)$  - это QDA с диагональной  $\Sigma^2$ 

```
In [ ]: from sklearn.discriminant_analysis import LinearDiscriminantAnalysis
In [ ]: from sklearn.discriminant_analysis import QuadraticDiscriminantAnalysis
In [ ]: from sklearn.naive_bayes import GaussianNB
```

Naïve bayes classifier, «наивный байесовский классификатор»

$$P(Y|X) \propto P(X|Y) P(Y)$$

Наивное предположение об условной независимости предикторов

$$P(x_p|Y = k, x_1, x_2, ..., x_{p-1}) = P(x_p|Y = k)$$

Оценка параметров распределений (отдельно для каждого класса, для каждой компоненты признакового описания), подстановка в ф-лу Байеса

$$P(Y = k | X = x) \propto P(Y) * \prod_{j=1}^{p} P(x_j | Y = k)$$

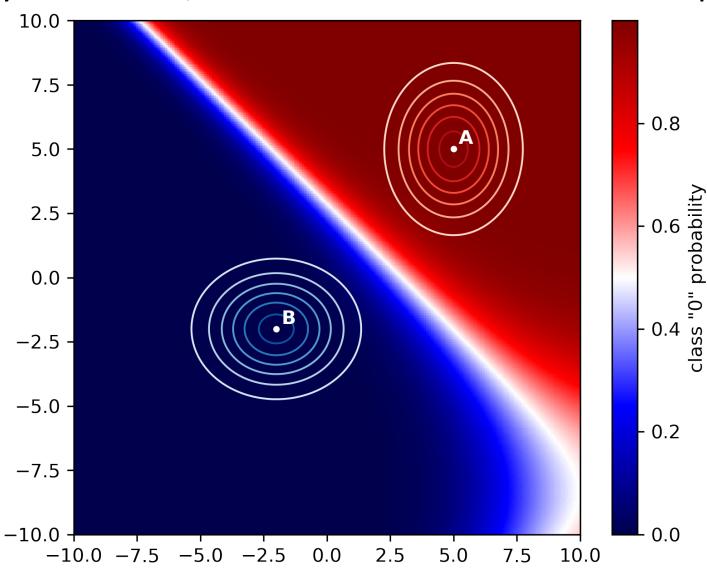
Вычисление вывода модели

$$\hat{y}(x) = \operatorname{argmax}(P_k(x))$$

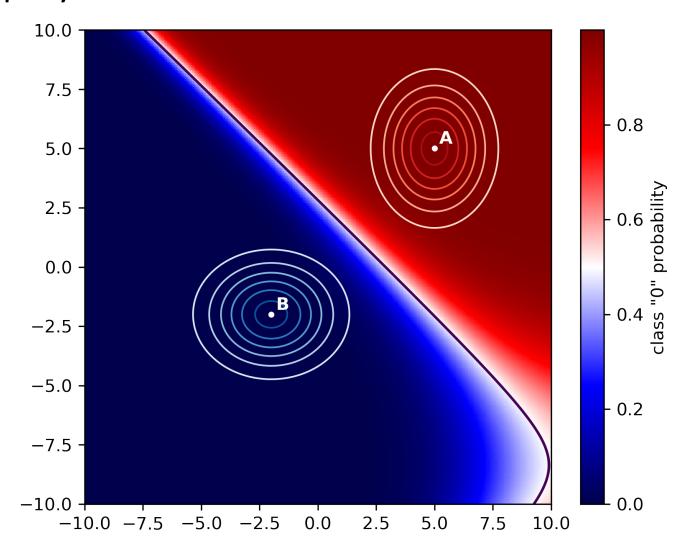
Нормировка вероятностей (если нужны оценки вероятностей)

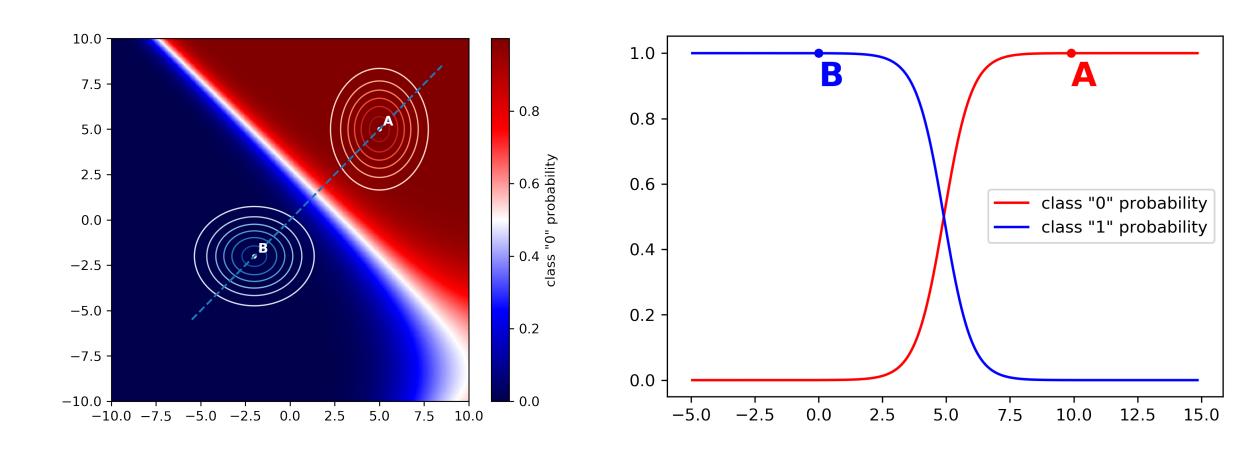
$$P_k(x) = \frac{P(Y = k|X = x)}{\sum_k P(Y = k|X = x)}$$

Naïve bayes classifier, «наивный байесовский классификатор»



Разделяющая поверхность (на примере результатов наивного байесовского классификатора)





Может быть, можно аппроксимировать P(y=0|x) на основании данных обучающей выборки? Разве не для этого придуман весь подход машинного обучения?

#### Логистическая регрессия («logistic regression»)

Линейная регрессия: набор предположений "LINE"

$$y_i \sim \mathcal{N}(\theta \cdot x_i, \sigma^2)$$
 
$$L(\mathcal{T}) = P(\{y_i, x_i\}) = \prod_{i=1}^{N} \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{-\frac{(y_i - \theta \cdot x_i)^2}{2\sigma^2}}$$

$$\ell(\mathcal{T}, \theta) = \log L(\mathcal{T}, \theta) = \sum_{i=1}^{N} \log \left( \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \right) - \sum_{i=1}^{N} \frac{(y_i - \theta \cdot x_i)^2}{2\sigma^2}$$

$$\theta^* = \underset{\Theta}{\operatorname{argmax}} (\ell(\mathcal{T}, \theta)) = \underset{\Theta}{\operatorname{argmin}} \sum_{i=1}^{N} \frac{(y_i - \theta \cdot x_i)^2}{2\sigma^2}$$

#### Логистическая регрессия:

- (1) Предполагаем, что переменная Y распределена согласно распр-ю Бернулли с параметром p (зависящий от  $x_i$ );
- (2) Предполагаем, что отношение log-вероятностей классов «1» и «0» соотносятся как линейная функция:

$$f(\theta, x) = \theta \cdot x$$

$$Y \sim \mathcal{B}(p(\theta, x)), \qquad \log \frac{p(\theta, x)}{1 - p(\theta, x)} = \theta \cdot x$$
$$p(\theta, x) = \frac{1}{1 + e^{-\theta \cdot x}}$$
$$L(\mathcal{T}) = \prod_{i=1}^{N} \left( p(x_i)^{y_i} * \left( 1 - p(x_i) \right)^{(1 - y_i)} \right)$$

#### Логистическая регрессия («logistic regression»)

$$\log \frac{p(\theta, x)}{1 - p(\theta, x)} = \theta \cdot x, \qquad p(\theta, x) = \frac{1}{1 + e^{-\theta \cdot x}}$$

Новое обозначение (для краткости):  $p_i \equiv p(\theta, x_i)$ 

$$L(\mathcal{T}) = \prod_{i=1}^{N} (p_i^{y_i} * (1 - p_i)^{(1 - y_i)})$$

Бинарная перекрестная энтропия (отрицательная)
Negative binary cross-entropy

$$\ell(\mathcal{T}, \theta) = \log(L(\mathcal{T}, \theta)) = \sum_{i} \log(p_i^{y_i}) + \sum_{i} \log((1 - p_i)^{(1 - y_i)}) = \int_{\mathcal{T}} \log(L(\mathcal{T}, \theta)) = \int_{\mathcal{T}} \log($$

$$= \sum_{i} (y_i * \log p_i + (1 - y_i) * \log(1 - p_i)) = \sum_{i} \log(1 - p_i) + \sum_{i} y_i * \log \frac{p_i}{1 - p_i} = (*)$$

$$\left\{ p_i = \frac{1}{1 + e^{-\theta \cdot x_i}} : (1 - p_i) = \frac{1}{1 + e^{\theta \cdot x_i}} \right\}$$

$$\left\{\log\frac{p_i}{1-p_i} = \theta \cdot x_i\right\}$$

$$(*) = -\sum_{i} \log(1 + e^{\theta \cdot x_i}) + \sum_{i} y_i * \theta \cdot x_i$$

$$\frac{\partial \ell(\mathcal{T}, \theta)}{\partial \theta} = \sum_{i} (y_i - p(\theta, x_i)) x_i$$

#### Логистическая регрессия («logistic regression»)

Линейная регрессия:

набор предположений "LINE"

$$y_i \sim \mathcal{N}(\theta \cdot x_i, \sigma^2)$$

$$L(\mathcal{T}) = P(\{y_i, x_i\}) = \prod_{i=1}^{N} \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{-\frac{(y_i - \theta \cdot x_i)^2}{2\sigma^2}}$$

$$\ell(\mathcal{T}, \theta) = \log L(\mathcal{T}, \theta) = \sum_{i=1}^{N} \log\left(\frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}}\right) - \sum_{i=1}^{N} \frac{(y_i - \theta \cdot x_i)^2}{2\sigma^2}$$

 $\theta^* = \underset{\Theta}{\operatorname{argmax}} (\ell(\mathcal{T}, \theta)) = \underset{\Theta}{\operatorname{argmin}} \sum_{i=1}^{N} \frac{(y_i - \theta \cdot x_i)^2}{2\sigma^2}$ 

#### Логистическая регрессия:

- (1) Предполагаем, что переменная Y распределена согласно распределению Бернулли с параметром p;
- (2) Предполагаем, что отношение log-вероятностей классов «1» и «0» соотносятся как линейная функция  $f(\theta, x) = \theta \cdot x$

$$Y \sim \mathcal{B}(p(\theta, x)), \qquad \log \frac{p(\theta, x)}{1 - p(\theta, x)} = \theta \cdot x, \quad p(\theta, x) = \frac{1}{1 + e^{-\theta \cdot x}}$$

$$L(\mathcal{T}) = \prod_{i=1}^{N} \left( p(x_i)^{y_i} * \left( 1 - p(x_i) \right)^{(1 - y_i)} \right)$$

$$\ell(\mathcal{T}, \theta) = -\sum_{i} \log \left( 1 + e^{\theta \cdot x_i} \right) + \sum_{i} y_i * \theta \cdot x_i$$

$$\begin{split} \theta^* &= \operatorname*{argmax}_{\Theta} \Big( \ell(\mathcal{T}, \theta) \Big) = \operatorname*{argmin}_{\Theta} \Bigg( \sum_{i} \Big( \log \big( 1 + e^{\theta \cdot x_i} \big) - y_i * \theta \cdot x_i \Big) \Bigg) \\ &\operatorname*{argmax}_{\Theta} \sum_{i} (y_i * \log p_i + (1 - y_i) * \log (1 - p_i)) \end{split}$$

Логистическая регрессия («logistic regression»)

code demonstration

Разделяющая поверхность (на примере результатов логистической регрессии)

