# Машинное обучение в науках о Земле

Михаил Криницкий
krinitsky.ma@phystech.edu

к.т.н., н.с.
Институт океанологии РАН им. П.П. Ширшова

Лаборатория взаимодействия океана и атмосферы и мониторинга климатических изменений (ЛВОАМКИ)

# Общий принцип обучения по прецедентам (оптимизация функции ошибки)

$x \in \mathbb{X}$ — объекты, objects

$y \in \mathbb{Y}$ — ответы, labels

$\mathcal{F}\colon \mathbb{X} \to \mathbb{Y}$ — искомая закономерность

$\mathcal{T}\colon \{x_i; y_i\}$ — «обучающая выборка» (прецеденты), train dataset

Найти: $\hat{\mathcal{F}}\colon \{x_i\} \to \{y_i\}$

<u>один из способов решения:</u>

$\mathcal{L}(\hat{\mathcal{F}}(x))$ — функционал ошибки (эмпирического риска, потерь), Loss function

$\hat{y}_i = \hat{\mathcal{F}}(x_i) = f(\vec{p}, x_i)$ — функционально задаваемая зависимость. **Предположение исследователя о виде закономерности**. Иногда задается параметрически, $\vec{p}$ — вектор параметров.

$\mathcal{L} = L(\vec{p}, \mathcal{T})$ — функция ошибки

$$\hat{p} = \underset{\mathbb{P}}{\operatorname{argmin}}\big(L(\vec{p}, \mathcal{T})\big)$$

$$\hat{\mathcal{F}} = f(\hat{p}, x)$$

# Обучение по прецедентам:

## вероятностная постановка

## принцип максимального правдоподобия maximum likelihood estimation

$\boldsymbol{x_i}$ - признаковое описание объектов

$\boldsymbol{y_i}$ - признаковое описание ответов

$p(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})$ – (искомая, аппроксимируемая) совместная плотность распределения событий на множестве $X{\times}Y$

$\phi(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y},\boldsymbol{\theta})$ - модель плотности распределения, предлагаемая исследователем

$\mathcal{T}$: $\{\boldsymbol{x_i};\boldsymbol{y_i}\}$ — «обучающая выборка» (прецеденты), train dataset

*Предположение!*

$(x_i, y_i)$ – выбираются из $\boldsymbol{p}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})$ независимо и случайно

## MLE

$\phi(\boldsymbol{x_i},\boldsymbol{y_i},\boldsymbol{\theta})$ - правдоподобие для одного экземпляра выборки

$L(\{\boldsymbol{x_i}\},\{\boldsymbol{y_i}\},\boldsymbol{\theta}) = \prod_{i=1}^{N}\phi(\boldsymbol{x_i},\boldsymbol{y_i},\boldsymbol{\theta})$ - правдоподобие выборки

$$\theta^* = \underset{\Theta}{\operatorname{argmax}}\, L(\{\boldsymbol{x_i}\},\{\boldsymbol{y_i}\},\boldsymbol{\theta})$$

**Функция потерь определяется видом модели плотности распределения $\phi(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y},\boldsymbol{\theta})$, предложенной исследователем!**

**Правдоподобие** выборки $L(\boldsymbol{\theta},\mathcal{T})$ – **максимизировать** (в пространстве параметров $\Theta$)

**Функцию потерь** $\mathcal{L}(\boldsymbol{\theta},\mathcal{T})$ – **минимизировать** (в пространстве параметров $\Theta$)

previously on ML4ES

# Обучение по прецедентам. Вероятностная постановка, MLE

## Примеры

## Линейная регрессия

### MSE

$$\phi(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}, \boldsymbol{\theta}) = \theta x + \epsilon,$$

$$p(\epsilon) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{-\frac{\epsilon^2}{2\sigma^2}}$$

=> $$\mathcal{L}(\boldsymbol{\theta}, \mathcal{T}) = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}(\boldsymbol{y_i} - \boldsymbol{\theta x_i})^2$$

### MAE

$$\phi(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}, \boldsymbol{\theta}) = \theta x + \epsilon,$$

$$p(\epsilon) = \frac{1}{2b} e^{-\frac{|\epsilon|}{b}}$$

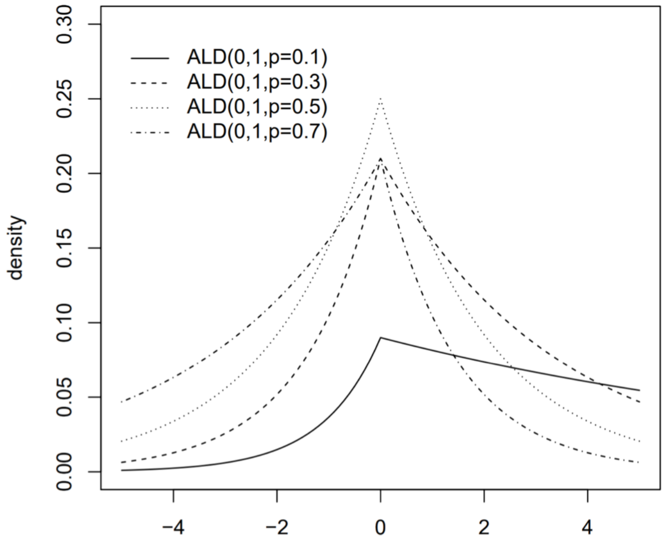
=> $$\mathcal{L}(\boldsymbol{\theta}, \mathcal{T}) = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}|\boldsymbol{y_i} - \boldsymbol{\theta x_i}|$$

~~previously on ML4ES~~

### Квантильная регрессия

Bera, Anil & Galvao, Antonio & Montes-Rojas, Gabriel & Park, Sung Y.. (2015). **Asymmetric Laplace Regression: Maximum Likelihood, Maximum Entropy and Quantile Regression**. Journal of Econometric Methods. 10.1515/jem-2014-0018.

Sánchez, B. L., Lachos, H. V., & Labra, V. F. (2013). **Likelihood based inference for quantile regression using the asymmetric Laplace distribution**. Journal of Statistical Computation and Simulation, 81, 1565-1578.




Asymmetric Laplace density. From Sánchez et al.

previously on ML4ES

# Решение задач типа ОБУЧЕНИЕ С УЧИТЕЛЕМ

Михаил Криницкий

krinitsky.ma@phystech.edu

к.т.н., н.с.
Институт океанологии РАН им. П.П. Ширшова

Лаборатория взаимодействия океана и атмосферы и мониторинга климатических изменений (ЛВОАМКИ)

# ОБЩАЯ СХЕМА РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ <u>ОБУЧЕНИЯ С УЧИТЕЛЕМ</u>

1. формулировка задачи:
   - какой тип (классификация, регрессия, другой)? Или переформулировать в легко решаемый тип!
   - определиться, что есть объекты (события)
   - определиться, что есть целевая переменная
   - определить признаковое описание объектов (событий)
   - определить критерии качества решения задачи (MSE, MAE, pattern correlation, etc.)
2. сформулировать модель:
   - вид модели (линейная регрессия, дерево решений, композиционный алгоритм, нейронная сеть, etc.)
   - определиться с функцией потерь (MSE, MAE, BCE, CCE, etc., комбинации)
   - сложность модели (задается гиперпараметрами – настройками модели)

# ОБЩАЯ СХЕМА РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ ОБУЧЕНИЯ С УЧИТЕЛЕМ

3. подготовить данные или генератор данных:
   - стандартизировать данные (если нужно)
   - обработка пропусков, категориальных значений, кодирование текста, понижение размерности данных
   - оставить часть данных для проверки качества (train-validation-test split)
   - подготовить генератор данных с учетом стратегии скользящего контроля (cross-validation quality estimation)
4. оптимизировать модель на обучающей выборке:
   - $\hat{p} = \underset{\mathbb{P}}{\operatorname{argmin}}\left(L(\vec{p}, \mathcal{T})\right)$
5. оптимизация гиперпараметров модели и отбор моделей. Провизодится по значениям метрик качества на контрольной(контрольных) выборке(выборках)
6. оценка модели:
   - оценить качество по метрикам, определенным на этапе 1. на тестовой выборке
   - оценить неопределенность параметров модели (если возможно)
   - оценить неопределенность оценок целевой переменной

# ОБЩАЯ СХЕМА РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ ОБУЧЕНИЯ С УЧИТЕЛЕМ

6. применение модели на вновь получаемых данных:
   - оценка распределения вновь получаемых данных: генерируются ли они из того же распределения, что и обучающая выборка?
   - предобработка новых данных идентично п.3 с точностью до коэффициентов стандартизации и деталей способов предобработки
   - применение модели к предобработанным новым данным для получения значений целевой переменной
   - построение научных выводов, описание их в виде статей, получение наград в виде Нобелевских премий, etc.