Машинное обучение в науках о Земле

Михаил Криницкий
krinitsky.ma@phystech.edu
к.т.н., с.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

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

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

previously on ML4ES

Общий принцип обучения по прецедентам (оптимизация функции ошибки)

$x \in \mathbb{X}$ — объекты, objects

$y \in \mathbb{Y}$ — ответы, labels

$\mathcal{F}: \mathbb{X} \rightarrow \mathbb{Y}$ — искомая закономерность

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

Найти: $\hat{\mathcal{F}}: \{x_i\} \rightarrow \{y_i\}$

один из способов решения:

$\mathcal{L}(\hat{\mathcal{F}}(x))$ — 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.

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

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

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

Чем руководствоваться при выборе функции ошибки?

КАКИЕ бывают функции ошибки?!

previously on ML4ES

Обучение по прецедентам:
вероятностная постановка
принцип максимального правдоподобия maximum likelihood estimation

$\overrightarrow{\boldsymbol{x}_i}$ - признаковое описание объектов
$\overrightarrow{\boldsymbol{y}_i}$ - признаковое описание ответов
$p(\vec{\boldsymbol{x}}, \vec{\boldsymbol{y}})$ – (искомая, аппроксимируемая) **совместная плотность распределения событий** на множестве $X \times Y$

$\mathcal{T}:\ \{\overrightarrow{\boldsymbol{x}_i}; \overrightarrow{\boldsymbol{y}_i}\}$ — «обучающая выборка» (прецеденты), train dataset

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

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

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 Θ)

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

Обучение по прецедентам. Вероятностная постановка, MLE

Примеры

Линейная регрессия

MSE

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

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

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

MAE

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

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

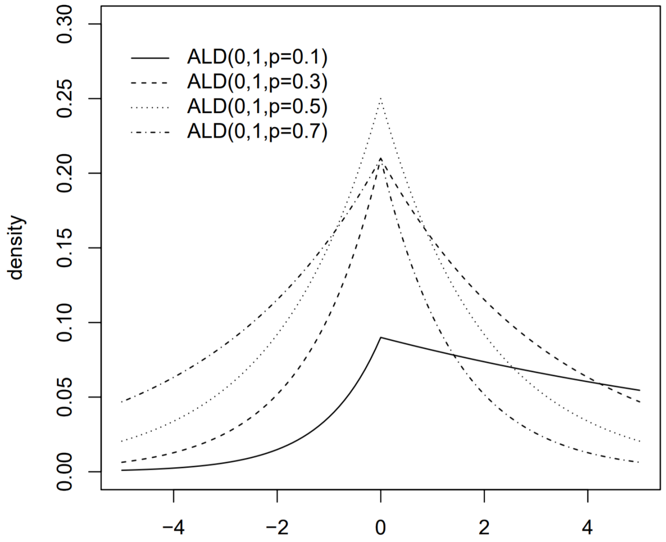
=> $$\mathcal{L}(\boldsymbol{\theta}, \mathcal{T}) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} |\boldsymbol{y}_i - \boldsymbol{\theta} \boldsymbol{x}_i|$$

~~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.

Обучение по прецедентам. Вероятностная постановка, MLE
Примеры

Логистическая регрессия (logistic regression)

Coming soon!
(its for classification problem)

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 ОБУЧЕНИЯ С УЧИТЕЛЕМ

обучаем (тренируем) модель **на имеющихся данных**

«Обучение»

Объекты

признаки

объекты

	1	2	3	4	5	6	7
1	-0.0685	-0.0676	-0.0643	-0.0617	-0.0550	-0.0488	-0.0365
2	-0.0706	-0.0726	-0.0633	-0.0579	-0.0490	-0.0390	-0.0267
3	-0.0691	-0.0766	-0.0676	-0.0589	-0.0484	-0.0350	-0.0172
4	-0.0631	-0.0719	-0.0662	-0.0557	-0.0441	-0.0317	-0.0144
5	-0.0500	-0.0634	-0.0603	-0.0502	-0.0384	-0.0263	-0.0115
6	-0.0377	-0.0491	-0.0449	-0.0352	-0.0214	-0.0062	0.0056
7	-0.0375	-0.0319	-0.0235	-0.0133	0.0012	0.0169	0.0282
8	-0.0540	-0.0310	-0.0169	6.9177e-...	0.0181	0.0339	0.0445
9	-0.0725	-0.0550	-0.0158	0.0145	0.0323	0.0501	0.0641
10	-0.0789	-0.0844	-0.0512	-0.0010	0.0387	0.0612	0.0810
11	-0.0803	-0.0965	-0.0789	-0.0543	-0.0036	0.0405	0.0685
12	-0.0995	-0.1248	-0.1134	-0.0950	-0.0699	-0.0281	0.0261
13	-0.1026	-0.1306	-0.1283	-0.1171	-0.0982	-0.0806	-0.0412
14	-0.0977	-0.1284	-0.1301	-0.1188	-0.1054	-0.0932	-0.0677
15	-0.0840	-0.1133	-0.1138	-0.1040	-0.0895	-0.0750	-0.0511
16	-0.0820	-0.1089	-0.1072	-0.0967	-0.0814	-0.0669	-0.0464
17	-0.0655	-0.0685	-0.0617	-0.0595	-0.0549	-0.0499	-0.0396

Целевая переменная

	1
1	-0.0685
2	-0.0706
3	-0.0691
4	-0.0631
5	-0.0500
6	-0.0377
7	-0.0375
8	-0.0540
9	-0.0725
10	-0.0789
11	-0.0803
12	-0.0995
13	-0.1026
14	-0.0977
15	-0.0840
16	-0.0820
17	-0.0655

Модель - метод, структура, значения параметров

$$\hat{y}_i = f(\vec{p}, x_i)$$

Настройка параметров модели

НАСТРОЕННАЯ МОДЕЛЬ

Режим использования

новые объекты

	1	2	3	4	5	6	7	8	9
1	-0.0685	-0.0676	-0.0643	-0.0617	-0.0550	-0.0488	-0.0365	-0.0235	-0.0133
2	-0.0706	-0.0726	-0.0633	-0.0579	-0.0490	-0.0390	-0.0267	-0.0136	-0.0044
3	-0.0691	-0.0766	-0.0676	-0.0589	-0.0484	-0.0350	-0.0172	-0.0038	0.0054
4	-0.0631	-0.0719	-0.0662	-0.0557	-0.0441	-0.0317	-0.0144	-0.0022	0.0084
5	-0.0500	-0.0634	-0.0603	-0.0502	-0.0384	-0.0263	-0.0115	0.0020	0.0152
6	-0.0377	-0.0491	-0.0449	-0.0352	-0.0214	-0.0062	0.0056	0.0145	0.0238
7	-0.0375	-0.0319	-0.0235	-0.0133	0.0012	0.0169	0.0282	0.0355	0.0403

НАСТРОЕННАЯ МОДЕЛЬ

**Результат:
значения целевой
переменной**

…
Вечор, ты помнишь, вьюга злилась,
На мутном небе мгла носилась;
Луна, как бледное пятно,
Сквозь тучи мрачные желтела,
И ты печальная сидела —
А нынче... погляди в окно:

Под голубыми небесами
Великолепными коврами,
Блестя на солнце, снег лежит;
Прозрачный лес один чернеет,
И ель сквозь иней зеленеет,
И речка подо льдом блестит.
…

А.С. Пушкин, «Зимнее утро»

…
Буря мглою небо кроет,
Вихри снежные крутя;
То, как зверь, она завоет,
То заплачет, как дитя.
Выпьем, добрая подружка
Бедной юности моей,
Выпьем с горя; где же кружка?
Сердцу будет веселей.

А.С. Пушкин, «Зимний вечер»

…
Было так: Нева, как зверь, стонала,
Серые ломая гребешки,
Колыхались барки у причала,
И царапал стынущие щеки
Острый дождь, ложась, как плащ широкий,
Над гранитным логовом реки.
…

В. Рождественский, «Октябрьская погода»

О признаковом описании событий (объектов) в геофизике

…
Вечор, ты помнишь, вьюга злилась,
На мутном небе мгла носилась;
Луна, как бледное пятно,
Сквозь тучи мрачные желтела,
И ты печальная сидела —
А нынче... погляди в окно:

Под голубыми небесами
Великолепными коврами,
Блестя на солнце, снег лежит;
Прозрачный лес один чернеет,
И ель сквозь иней зеленеет,
И речка подо льдом блестит.
…

А.С. Пушкин, «Зимнее утро»

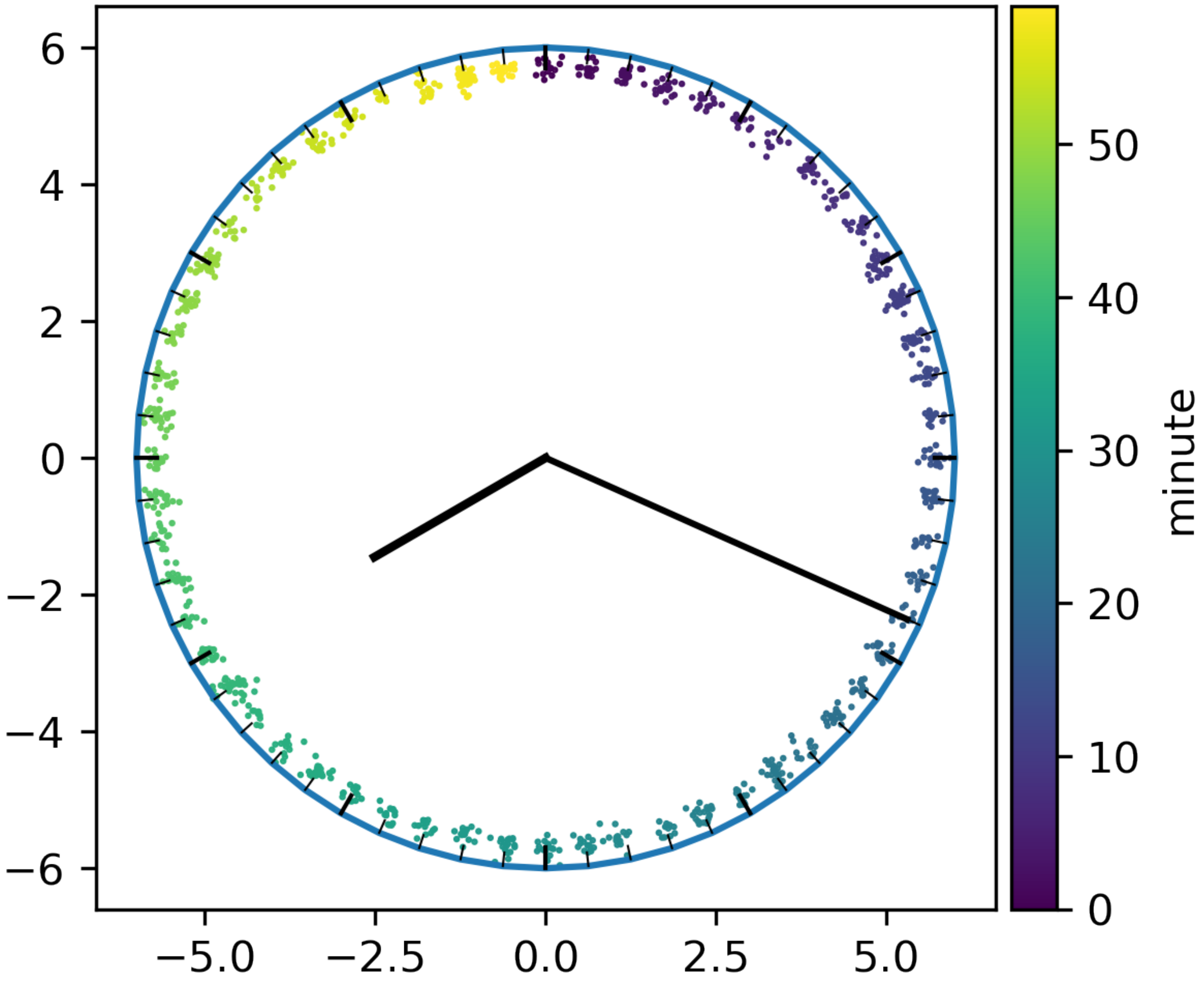
…
Буря мглою небо кроет,
Вихри снежные крутя;
То, как зверь, она завоет,
То заплачет, как дитя.
Выпьем, добрая подружка
Бедной юности моей,
Выпьем с горя; где же кружка?
Сердцу будет веселей.

А.С. Пушкин, «Зимний вечер»

…
Было так: Нева, как зверь, стонала,
Серые ломая гребешки,
Колыхались барки у причала,
И царапал стынущие щеки
Острый дождь, ложась, как плащ широкий,
Над гранитным логовом реки.
…

В. Рождественский, «Октябрьская погода»

Решение задачи восстановления регрессии: ПРИМЕР

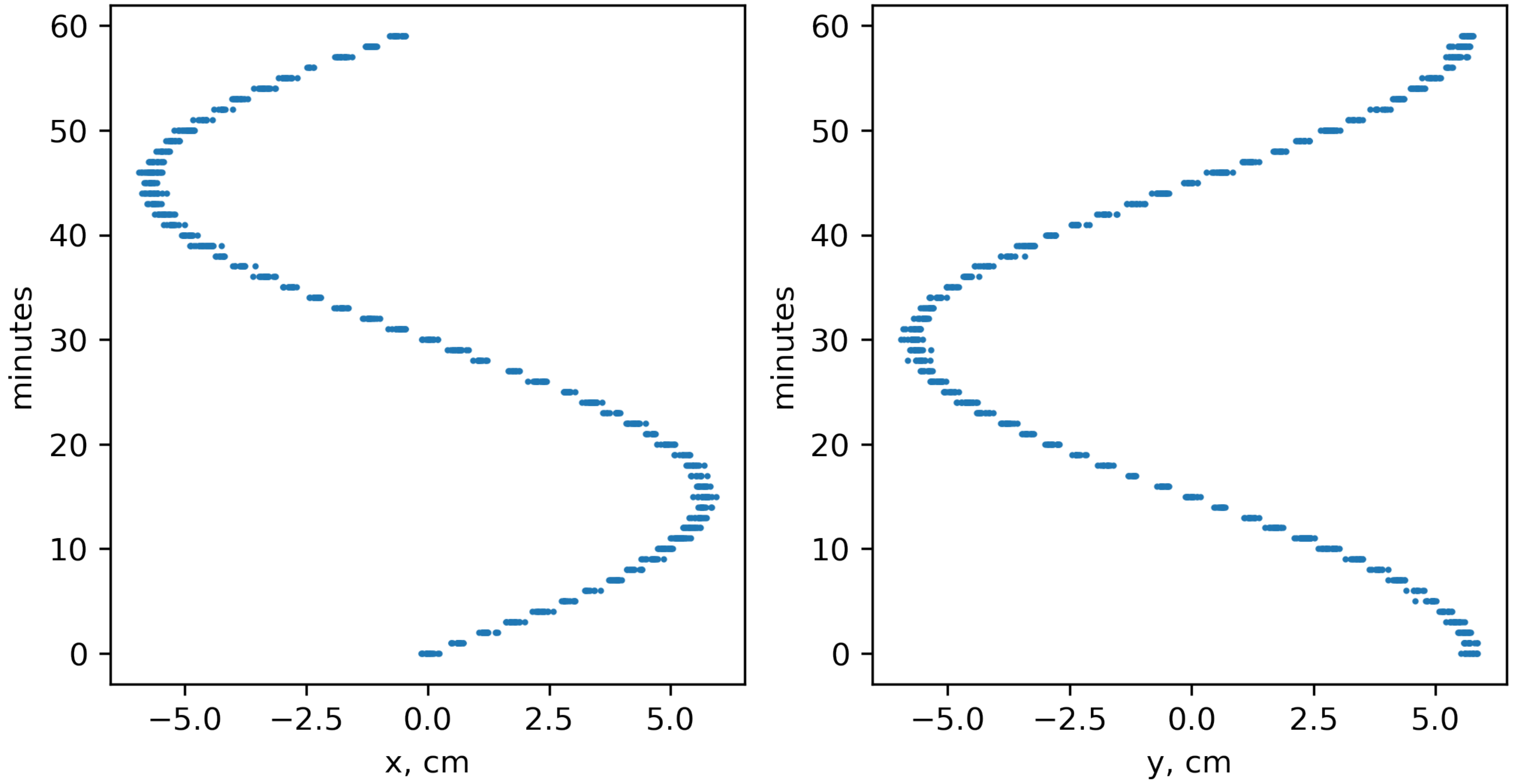


Синтетическая задача, “toy problem”

События $\boldsymbol{x_i}$: наблюдения циферблата часов
Признаковое описание событий $\overrightarrow{\boldsymbol{x_i}}$: координаты конца минутной стрелки
Целевая переменная $\boldsymbol{m_i}$: минутная компонента времени

Решение задачи восстановления регрессии: ПРИМЕР

Исследование данных: визуализация, поиск структуры



Решение задачи восстановления регрессии: ПРИМЕР

Построение и настройка модели

Возьмем очень слабую модель

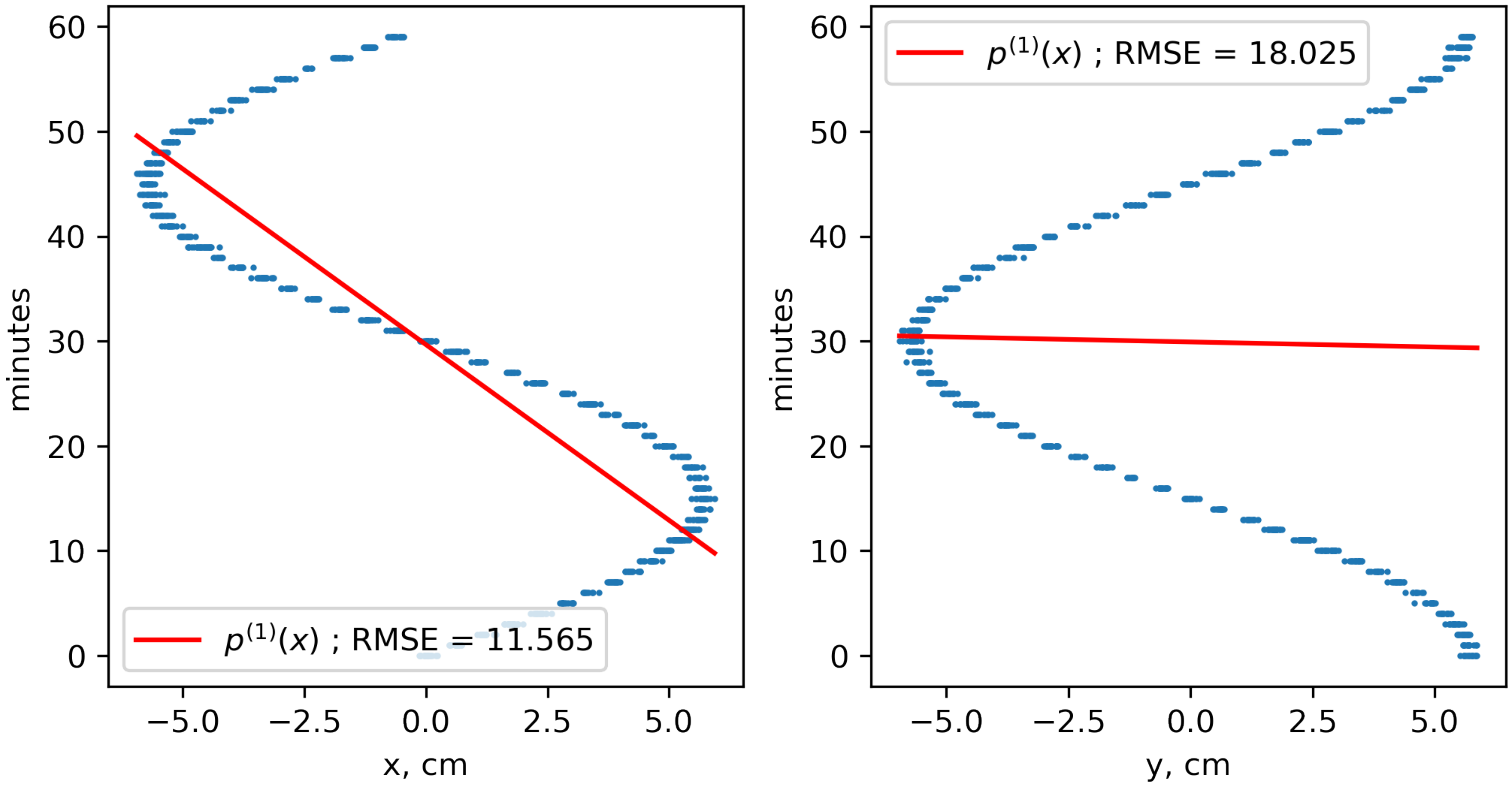
Модель в <u>задаче восстановления регрессии</u>: $\boldsymbol{\hat{m}_i} = \boldsymbol{f}(\vec{\boldsymbol{p}}, \boldsymbol{x_i}) = \boldsymbol{k}\boldsymbol{x_i} + \boldsymbol{b}$

Функция потерь: $\mathcal{L}(\vec{\boldsymbol{p}}, \{\boldsymbol{x_i}\}, \{\boldsymbol{m_i}\}) = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(\boldsymbol{f}(\vec{\boldsymbol{p}}, \boldsymbol{x_i}) - \boldsymbol{m_i})^2$

Решение (оценка параметров $\vec{\boldsymbol{p}}$): $\overrightarrow{p^*} = \underset{\mathbb{P}}{\operatorname{argmin}}(\mathcal{L}(\vec{\boldsymbol{p}}, \{\boldsymbol{x_i}\}, \{\boldsymbol{m_i}\}))$

Решение задачи восстановления регрессии: ПРИМЕР

Результаты модели



Решение задачи восстановления регрессии: ПРИМЕР

Построение и настройка модели

Возьмем модель посильнее

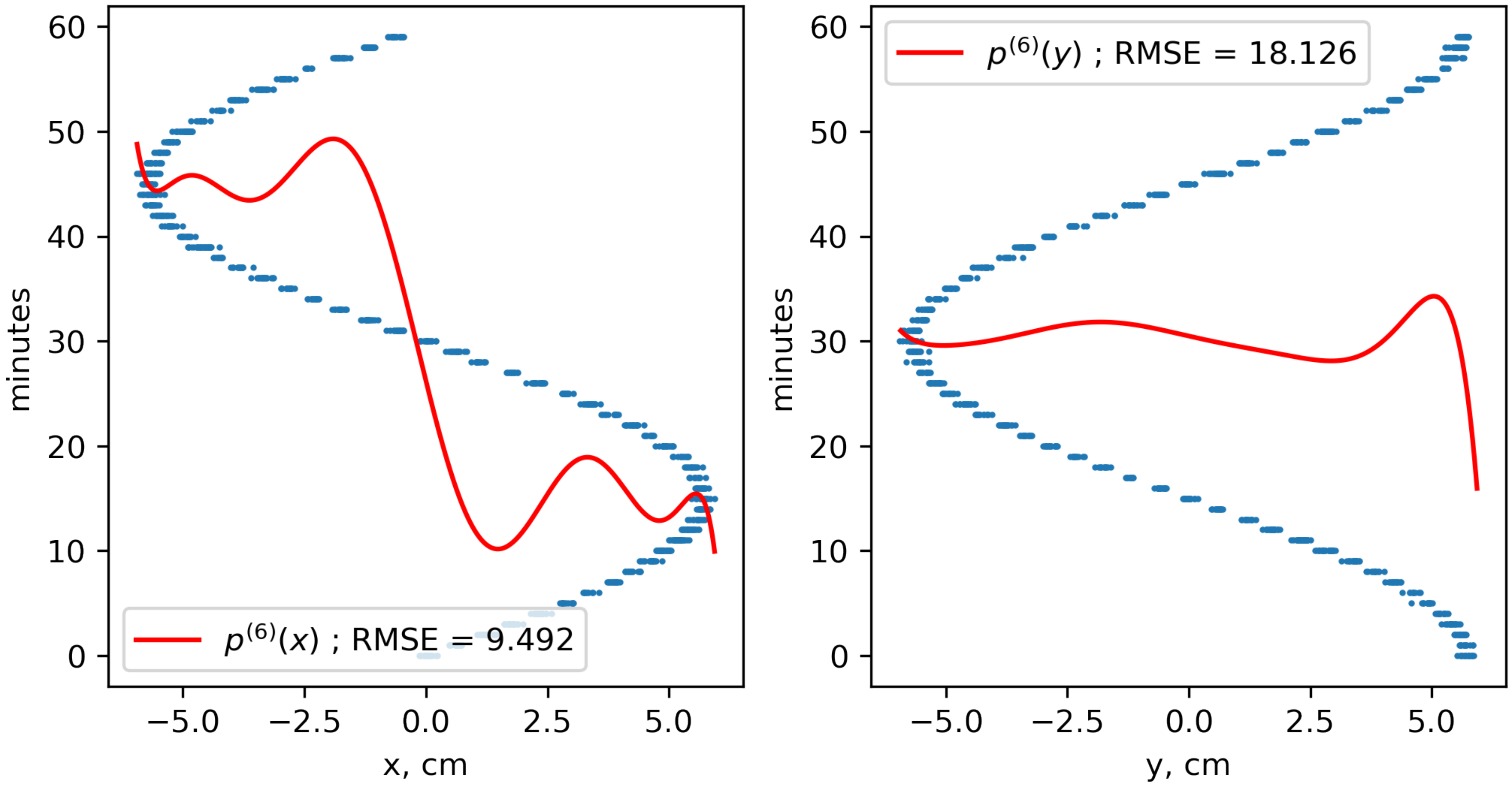
Модель в <u>задаче восстановления регрессии</u>: $\boldsymbol{\hat{m}_i} = \boldsymbol{f}(\boldsymbol{\vec{p}}, \boldsymbol{x_i}) = \boldsymbol{poly}^{(6)}(\boldsymbol{x_i})$

Функция потерь: $\mathcal{L}(\boldsymbol{\vec{p}}, \{\boldsymbol{x_i}\}, \{\boldsymbol{m_i}\}) = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(\boldsymbol{f}(\boldsymbol{\vec{p}}, \boldsymbol{x_i}) - \boldsymbol{m_i})^2$

Решение (оценка параметров $\boldsymbol{\vec{p}}$): $\overrightarrow{p^*} = \underset{\mathbb{P}}{\operatorname{argmin}}(\mathcal{L}(\boldsymbol{\vec{p}}, \{\boldsymbol{x_i}\}, \{\boldsymbol{m_i}\}))$

Решение задачи восстановления регрессии: ПРИМЕР

Результаты модели



Решение задачи восстановления регрессии: ПРИМЕР

Построение и настройка модели

Возьмем нейросеть

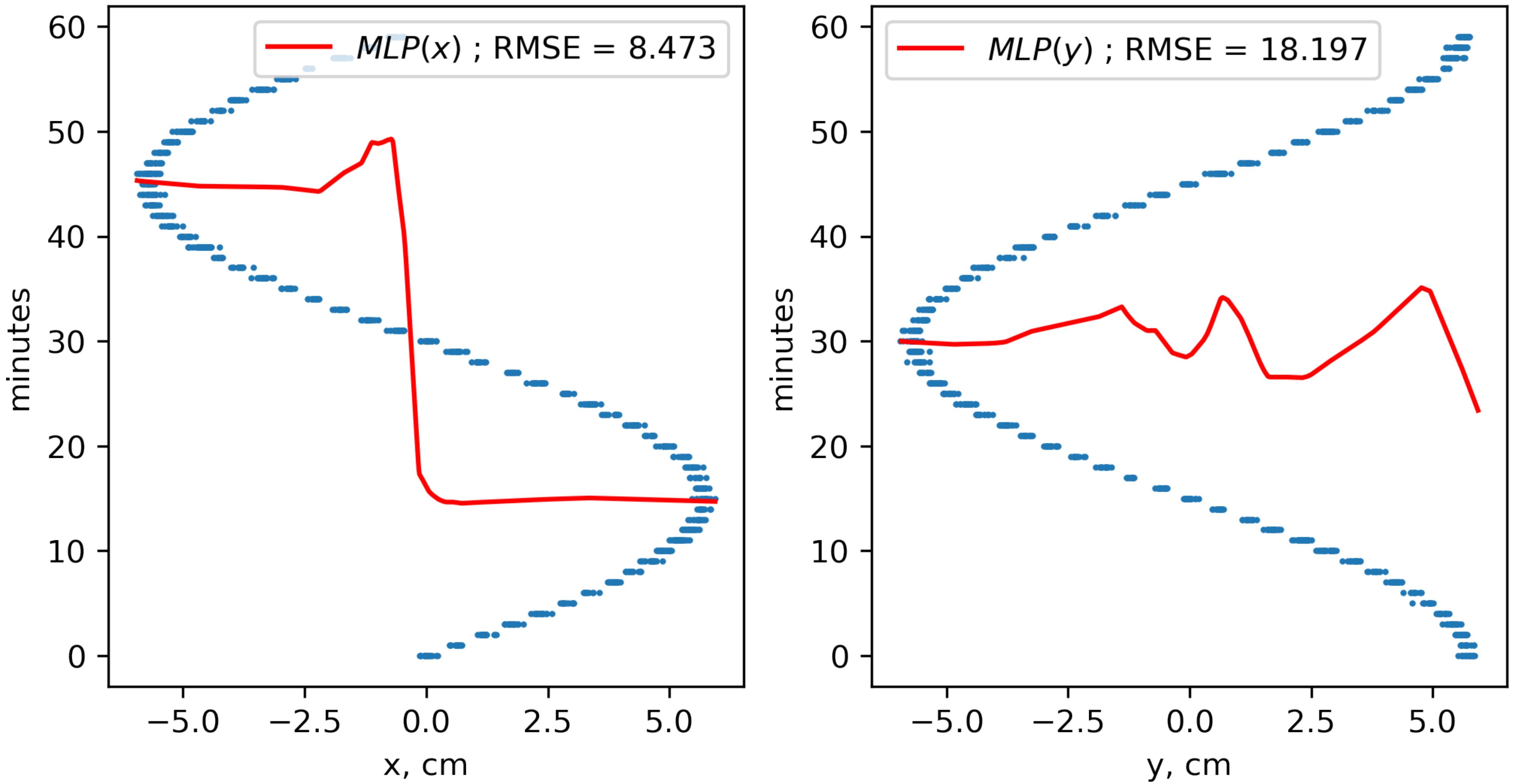
$$\hat{\boldsymbol{m}}_i = \boldsymbol{MLP}(\vec{\boldsymbol{p}}, \boldsymbol{x}_i)$$

$$\mathcal{L}(\vec{\boldsymbol{p}}, \{\boldsymbol{x}_i\}, \{\boldsymbol{m}_i\}) = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(\boldsymbol{MLP}(\vec{\boldsymbol{p}}, \boldsymbol{x}_i) - \boldsymbol{m}_i)^2$$

$$\overrightarrow{p^*} = \underset{\mathbb{P}}{\operatorname{argmin}}(\mathcal{L}(\vec{\boldsymbol{p}}, \{\boldsymbol{x}_i\}, \{\boldsymbol{m}_i\}))$$

Решение задачи восстановления регрессии: ПРИМЕР

Результаты модели



Решение задачи восстановления регрессии: ПРИМЕР

ЧТО ЖЕ ДЕЛАТЬ?

что-то не так с постановкой задачи? (не тот тип задачи? не та целевая переменная?)

что-то не так с признаковым описанием событий? (нерелевантное? неполное? шумное?)

что-то не так с разметкой? (шумная? некорректная? много? мало?)

что-то не так с моделью? (слишком простая? слишком сложная? не подходит для этой задачи?)

что-то не так с программным кодом?

что-то не так с исследователем?

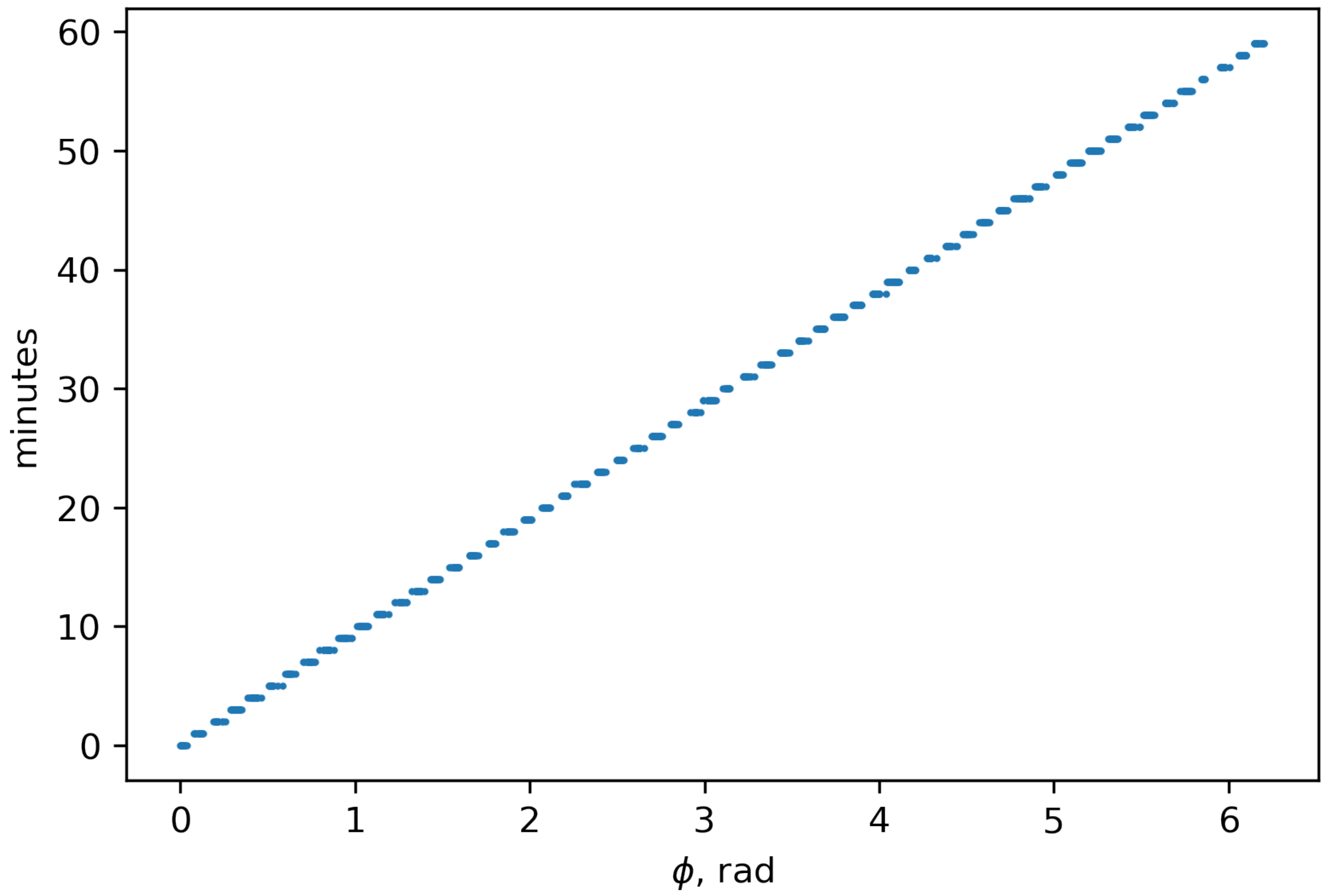
МОЖЕТ, ПРОСТО НЕТ ЗАКОНОМЕРНОСТИ?

Решение задачи восстановления регрессии: ПРИМЕР

изобретать (более информативные) признаки

Новое признаковое описание событий: $\vec{x_i}$ - угол отклонения минутной стрелки

$$x_i = \phi = \begin{cases} \arccos\left(\dfrac{x}{\sqrt{x^2+y^2}}\right), \text{если } x \geq 0 \\ 2\pi - \arccos\left(\dfrac{x}{\sqrt{x^2+y^2}}\right), \text{если } x < 0 \end{cases}$$



Решение задачи восстановления регрессии: ПРИМЕР

Построение и настройка модели

Возьмем очень слабую модель

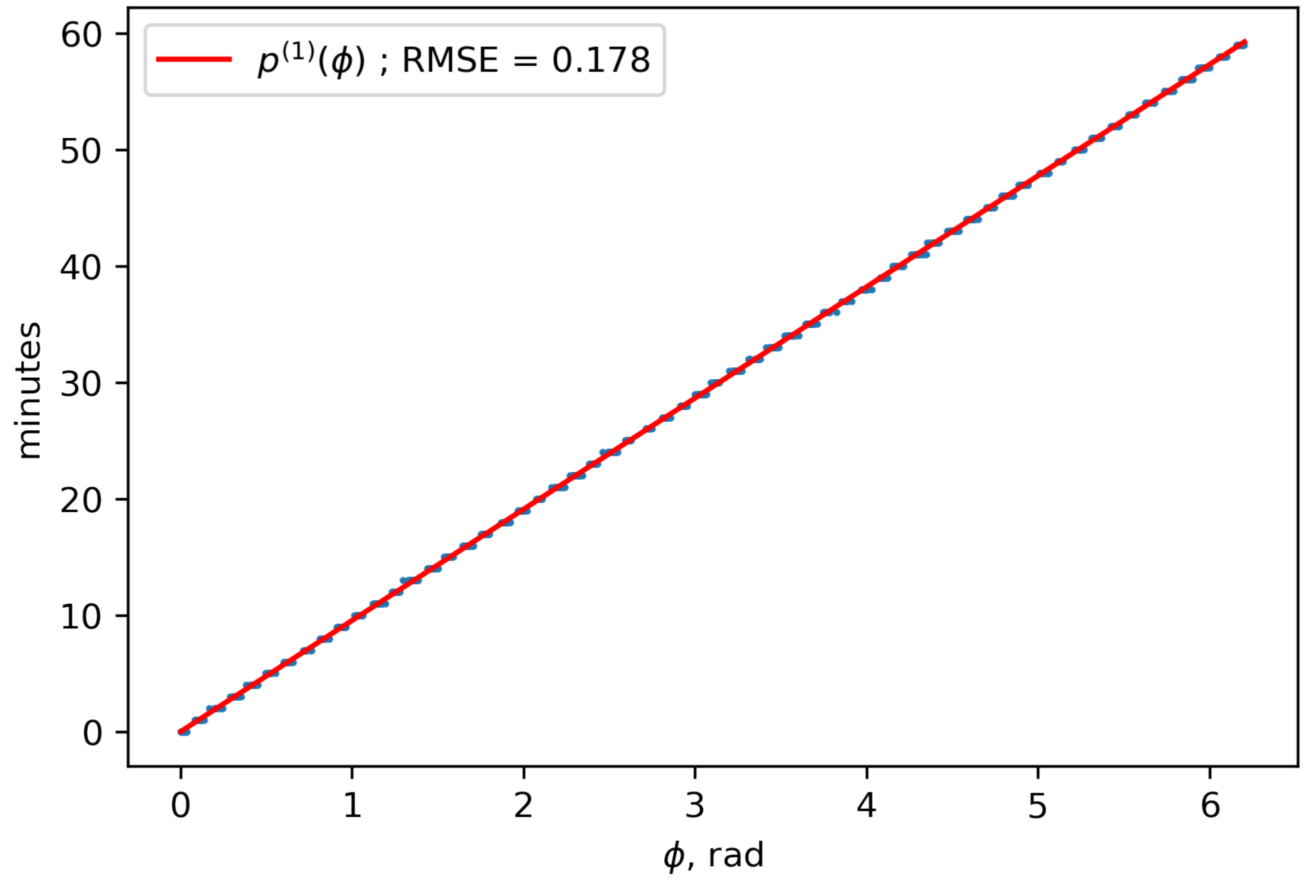
Модель в задаче восстановления регрессии: $\hat{\boldsymbol{m}}_i = \boldsymbol{f}(\vec{\boldsymbol{p}}, \boldsymbol{\phi}_i) = \boldsymbol{k}\boldsymbol{\phi}_i + \boldsymbol{b}$

Функция потерь: $\mathcal{L}(\vec{\boldsymbol{p}}, \{\boldsymbol{\phi}_i\}, \{\boldsymbol{m}_i\}) = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(\boldsymbol{f}(\vec{\boldsymbol{p}}, \boldsymbol{\phi}_i) - \boldsymbol{m}_i)^2$

Решение (оценка параметров $\vec{\boldsymbol{p}}$): $\overrightarrow{p^*} = \underset{\mathbb{P}}{\operatorname{argmin}}(\mathcal{L}(\vec{\boldsymbol{p}}, \{\boldsymbol{\phi}_i\}, \{\boldsymbol{m}_i\}))$

Решение задачи восстановления регрессии: ПРИМЕР

Результаты модели



Решение задачи восстановления регрессии: ПРИМЕР

использовать (более) полную информацию о событиях

Новое признаковое описание событий: $\overrightarrow{\boldsymbol{x_i}}$ - **обе** координаты x, y конца минутной стрелки

Возьмем нейросеть

$$\widehat{\boldsymbol{m}}_{\boldsymbol{i}} = \boldsymbol{MLP}(\vec{\boldsymbol{p}}, \overrightarrow{\boldsymbol{x_i}})$$

$$\mathcal{L}(\vec{\boldsymbol{p}}, \{\overrightarrow{\boldsymbol{x_i}}\}, \{\boldsymbol{m_i}\}) = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(\boldsymbol{MLP}(\vec{\boldsymbol{p}}, \overrightarrow{\boldsymbol{x_i}}) - \boldsymbol{m_i})^2$$

$$\overrightarrow{p^*} = \underset{\mathbb{P}}{\operatorname{argmin}}(\mathcal{L}(\vec{\boldsymbol{p}}, \{\overrightarrow{\boldsymbol{x_i}}\}, \{\boldsymbol{m_i}\}))$$

Качество модели: $RMSE = 0.28m$