



# Машинное обучение в науках о Земле

Михаил Криницкий

[krinitsky.ma@phystech.edu](mailto: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

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

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

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

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

# Обучение по прецедентам: вероятностная постановка

## принцип максимального правдоподобия maximum likelihood estimation

$\mathbf{x}_i$  - признаковое описание объектов  
 $\mathbf{y}_i$  - признаковое описание ответов  
 $p(\mathbf{x}, \mathbf{y})$  – (искомая, аппроксимируемая)  
совместная плотность распределения  
событий на множестве  $X \times Y$   
 $\phi(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \boldsymbol{\theta})$  - модель плотности  
распределения, предлагаемая  
исследователем

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

*Предположение!*

$(\mathbf{x}_i, \mathbf{y}_i)$  – выбираются из  $p(\mathbf{x}, \mathbf{y})$   
независимо и случайно

## MLE

$\phi(\mathbf{x}_i, \mathbf{y}_i, \boldsymbol{\theta})$  - правдоподобие для одного экземпляра выборки

$L(\{\mathbf{x}_i\}, \{\mathbf{y}_i\}, \boldsymbol{\theta}) = \prod_{i=1}^N \phi(\mathbf{x}_i, \mathbf{y}_i, \boldsymbol{\theta})$  - правдоподобие выборки

$$\boldsymbol{\theta}^* = \underset{\Theta}{\operatorname{argmax}} L(\{\mathbf{x}_i\}, \{\mathbf{y}_i\}, \boldsymbol{\theta})$$

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

# Обучение по прецедентам. Вероятностная постановка, MLE

## Примеры

### Линейная регрессия

MSE

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

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

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

MAE

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

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

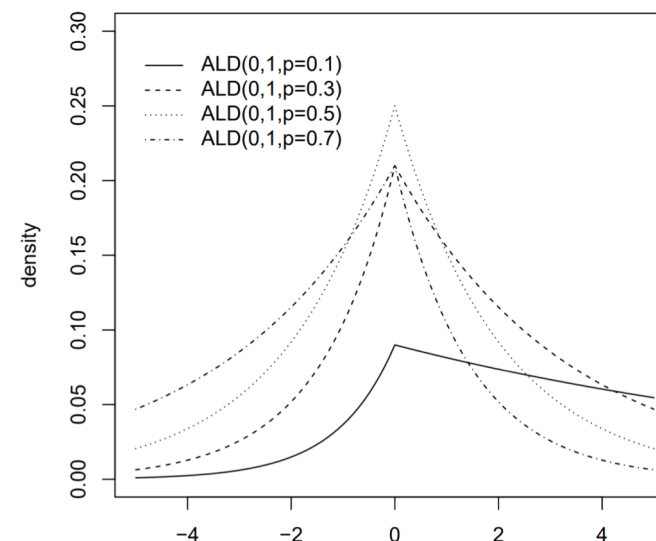
$$\Rightarrow \mathcal{L}(\theta, \mathcal{T}) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N |y_i - \theta x_i|$$

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.



# Решение задач типа ОБУЧЕНИЕ С УЧИТЕЛЕМ

Михаил Криницкий

[krinitsky.ma@phystech.edu](mailto: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

## 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:
  - $\hat{p} = \underset{\mathbb{P}}{\operatorname{argmin}}(L(\vec{p}, \mathcal{T}))$
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.