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

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.)

ОБЩАЯ СХЕМА РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ ОБУЧЕНИЯ С УЧИТЕЛЕМ

2. формулировка модели:
   - задать вид модели (линейная регрессия, дерево решений, композиционный алгоритм, нейронная сеть, etc.)
   - задать сложность модели (задается гиперпараметрами – настройками модели)
   - определиться с функцией потерь (MSE, MAE, LogLikelihood, etc.)

3. подготовка данных или генератора данных:
   - стандартизировать данные (если нужно)
   - обработать пропуски, категориальные значения, подготовить кодирование текста, применить понижение размерности данных
   - оставить часть данных для проверки качества (train-test split)
   - подготовить генератор данных с учетом стратегии скользящего контроля (cross-validation quality estimation)

4. оптимизация модели на обучающей выборке:
   - $\hat{p} = \underset{\mathbb{P}}{\operatorname{argmin}}\left(L(\vec{p}, \mathcal{T})\right)$

ОБЩАЯ СХЕМА РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ ОБУЧЕНИЯ С УЧИТЕЛЕМ

5. оценка модели:
   - оценить качество по метрикам, определенным на этапе **1.** на тестовой выборке
   - оценить неопределенности параметров модели (если возможно)
   - оценить неопределенности оценок целевой переменной
   - определить наличие недообучения или переобучения
   - оценить соотношение сложности модели и сложности закономерностей в данных; при неадекватной сложности модели вернуться к **п.2**

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

ОБЩАЯ СХЕМА РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ ОБУЧЕНИЯ С УЧИТЕЛЕМ

7. публикация результатов:
   - описание результатов в виде статей, отчетов об исследованиях
   - защита результатов перед лицом научного сообщества
   - получение наград, признание успехов, etc.

КЛАССИФИКАЦИЯ ЗАДАЧ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ

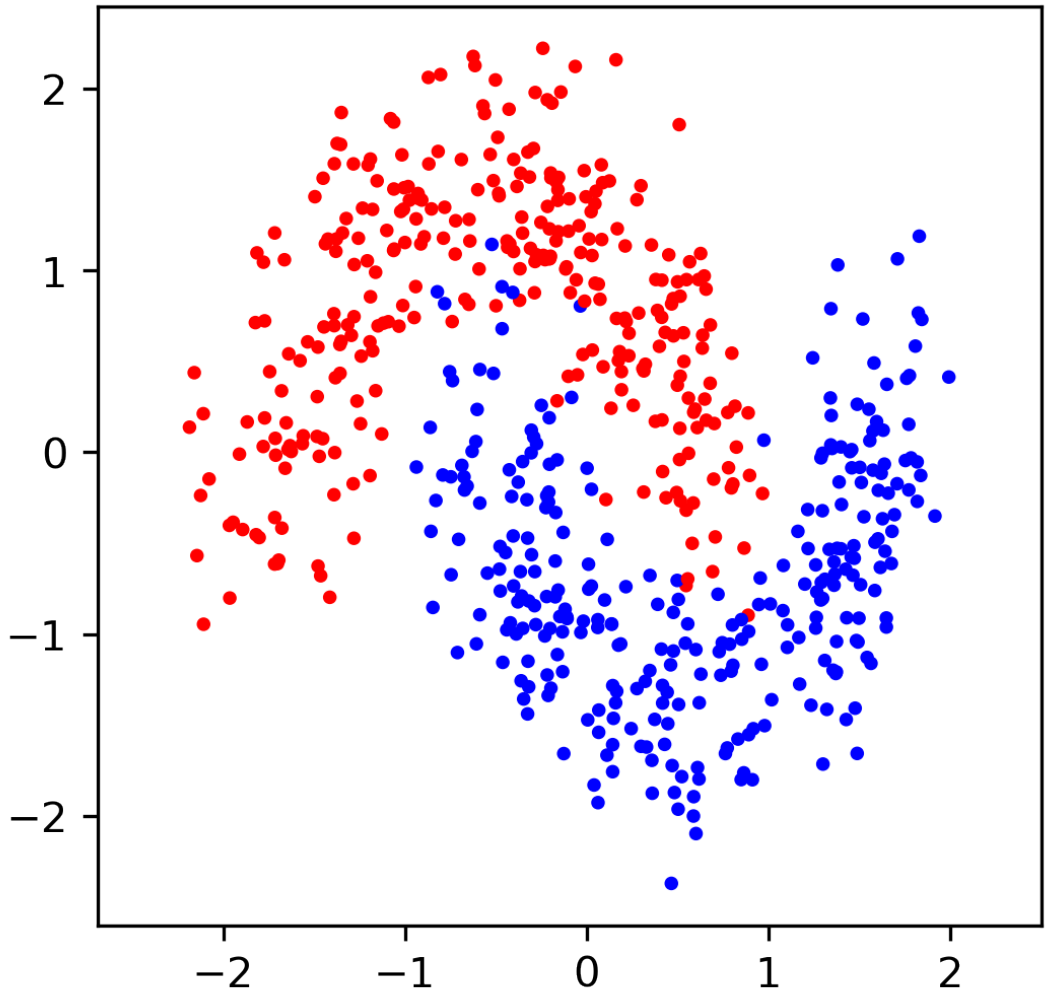
Формулировка задачи (в терминах машинного обучения)

- «Обучение с учителем»
  - восстановление регрессии
  - классификация

что я хочу? – метку класса

«красный или синий?»

(бинарная классификация)



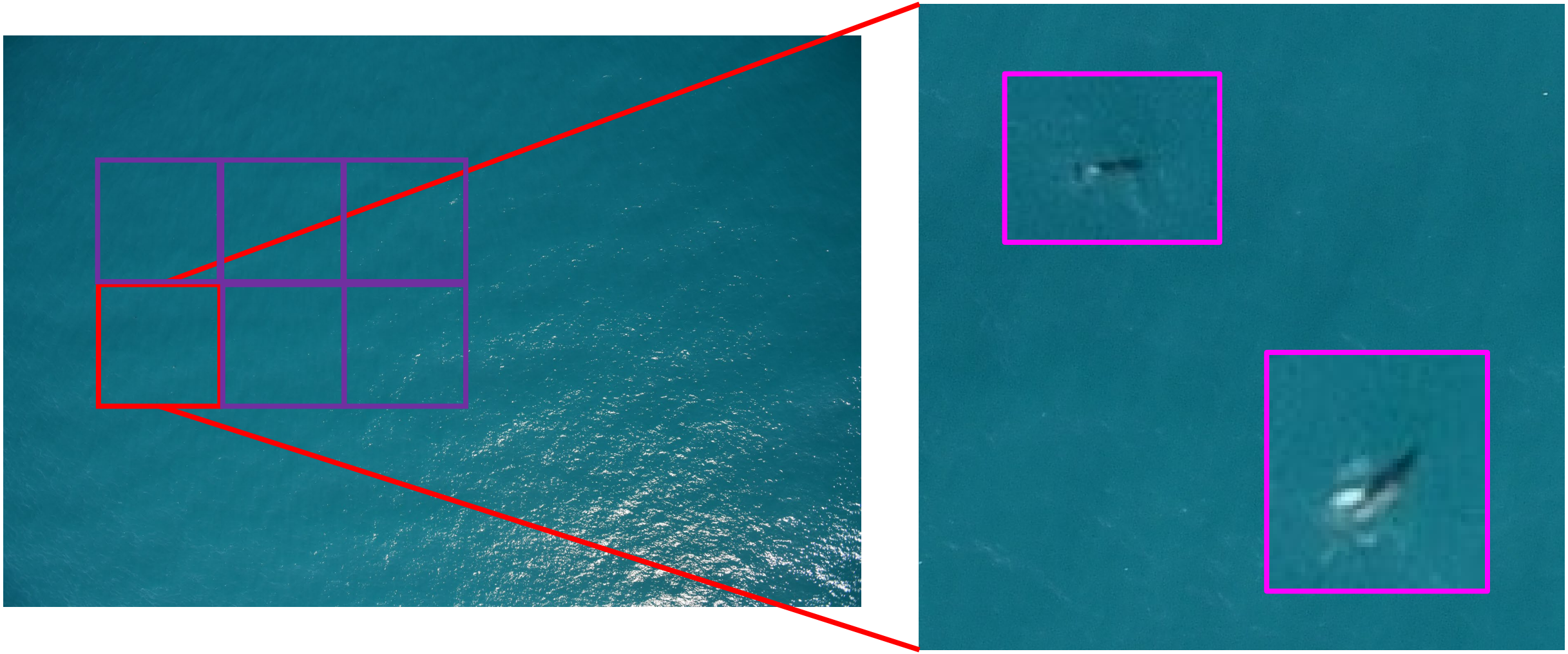
ЗАДАЧА КЛАССИФИКАЦИИ

цель – метка класса (y – категориальная переменная)

«спам / не-спам»
«мезоциклон / не-мезоциклон»
«превышает порог / не превышает»
«кот / собака / лошадь»
«0 / 1 / 2 / 3 / 4 / 5 / 6 / 7 / 8 / 9»

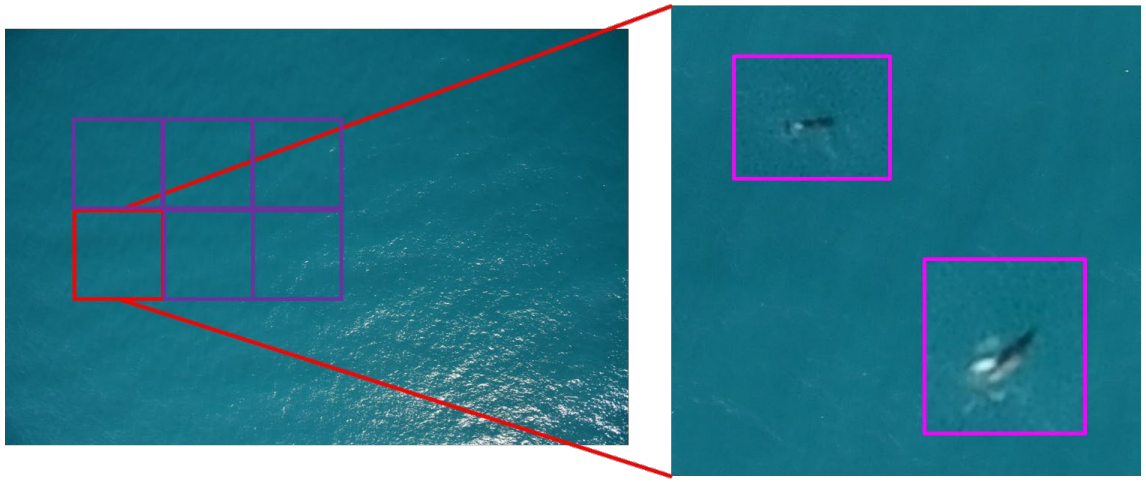
ЗАДАЧА КЛАССИФИКАЦИИ

Пример: классификация участков учетных снимков поверхности океана в отношении признака наличия морских млекопитающих



ЗАДАЧА КЛАССИФИКАЦИИ

Пример: классификация участков учетных снимков поверхности океана в отношении признака наличия морских млекопитающих



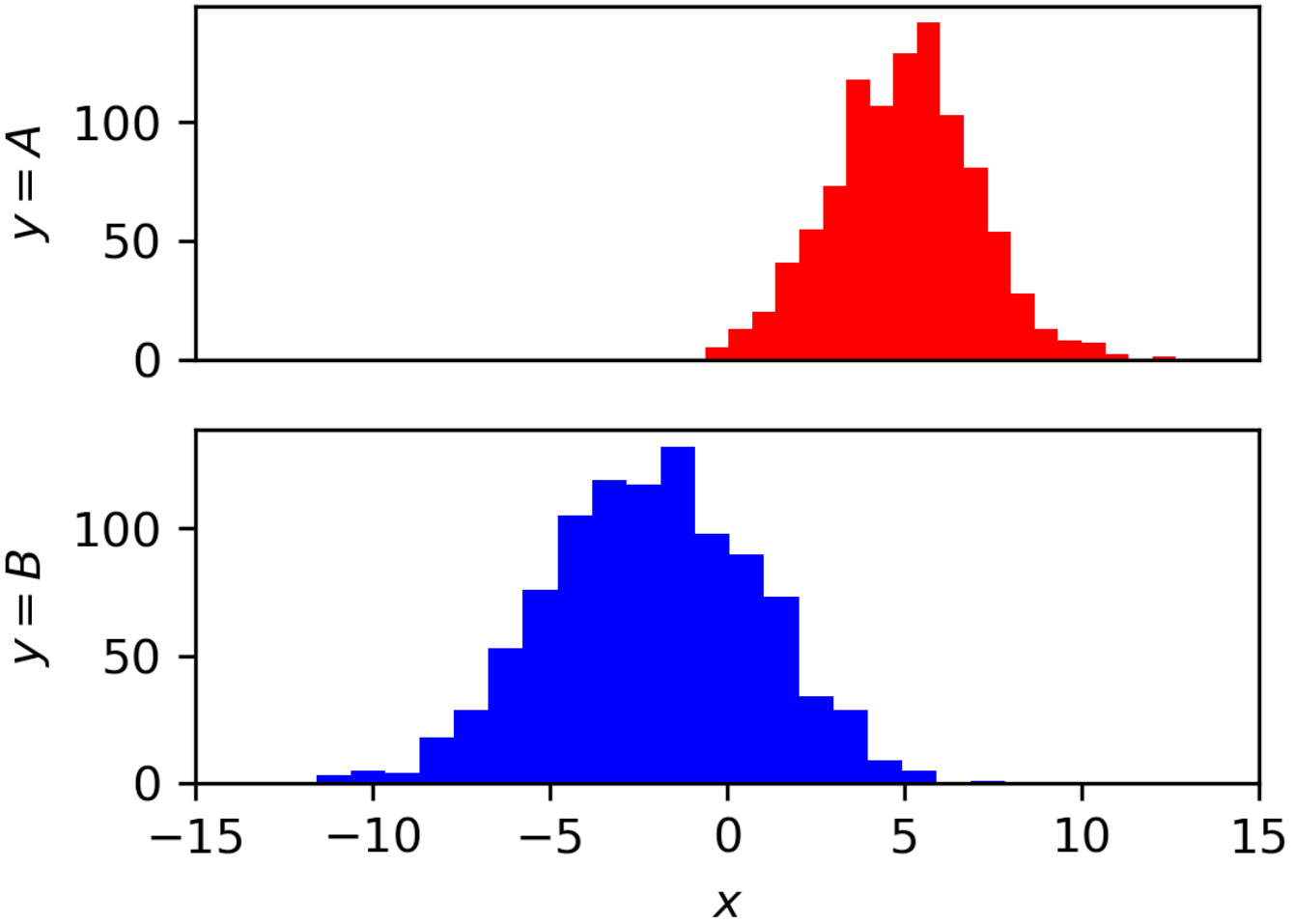
- Что есть **объекты** выборки?
- Что есть **признаковое описание**?
- Что есть **целевая переменная**?
- Тип целевой переменной?
- Размерность ц.п.?
- **Мера качества** решения?

ЗАДАЧА КЛАССИФИКАЦИИ

Простейший пример: объекты описываются действительным признаком $\boldsymbol{x}$
целевая переменная $\boldsymbol{y}$ – бинарная, классы: $\boldsymbol{A}$, $\boldsymbol{B}$; по 1000 экземпляров каждого класса
пусть для класса $y = \boldsymbol{A}$ значения $x \sim \mathcal{N}(\mu_{\boldsymbol{A}}, \sigma_{\boldsymbol{A}})$, для класса $y = \boldsymbol{B}$ значения $x \sim \mathcal{N}(\mu_{\boldsymbol{B}}, \sigma_{\boldsymbol{B}})$

Базируясь на этих данных, каково должно быть решение (значение $\boldsymbol{y}$) при:

$x = -10$
$x = -5$
$x = 2$
$x = 5$
$x = 10$
$x = 15$

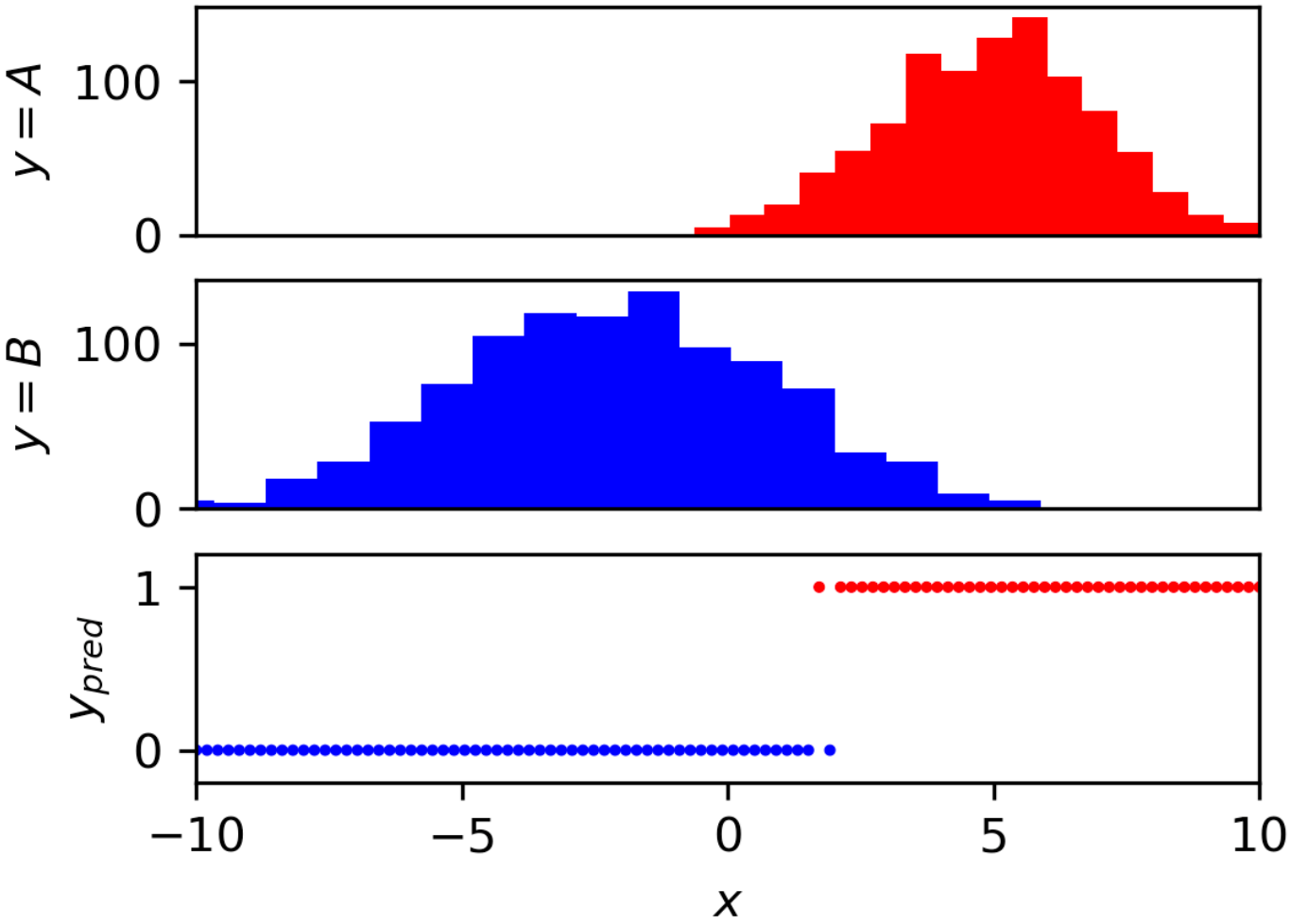


ЗАДАЧА КЛАССИФИКАЦИИ

Простейший пример: объекты описываются действительным признаком $\boldsymbol{x}$
целевая переменная $\boldsymbol{y}$ – бинарная, классы: $\boldsymbol{A}$, $\boldsymbol{B}$; по 1000 экземпляров каждого класса
пусть для класса $y = \boldsymbol{A}$ значения $x \sim \mathcal{N}(\mu_{\boldsymbol{A}}, \sigma_{\boldsymbol{A}})$, для класса $y = \boldsymbol{B}$ значения $x \sim \mathcal{N}(\mu_{\boldsymbol{B}}, \sigma_{\boldsymbol{B}})$

Подход №1: **KNN** (метод $\boldsymbol{K}$ ближайших соседей)

1. выбрать $\boldsymbol{K}$ ближайших соседей для нового объекта (! нужно определить меру близости !)
2. 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



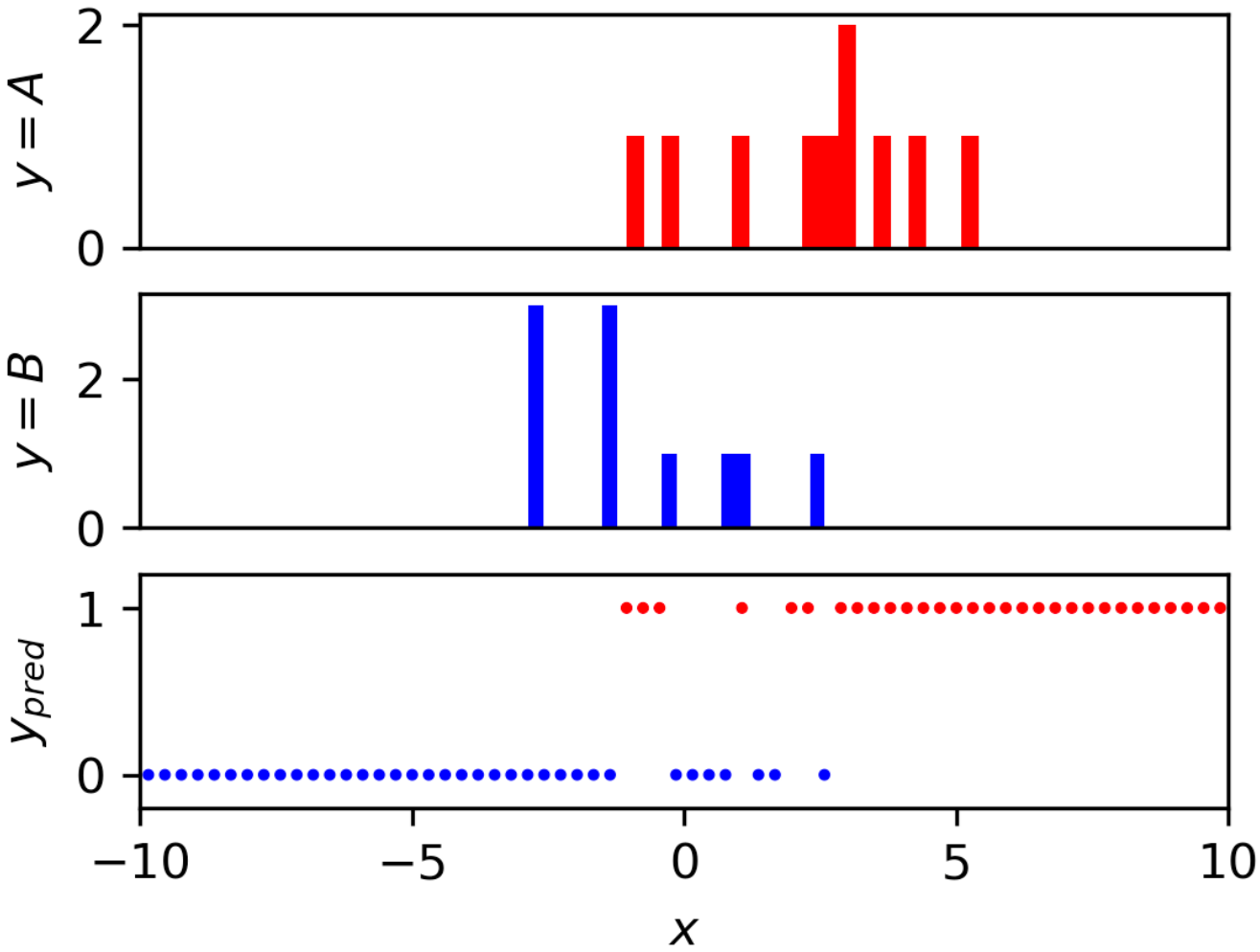
ЗАДАЧА КЛАССИФИКАЦИИ

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



ЗАДАЧА КЛАССИФИКАЦИИ

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

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

ЗАДАЧА КЛАССИФИКАЦИИ

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, помним, что $P(x_i)$ – константа, которую можно не учитывать при сравнении $P(Y = \boldsymbol{A}|X = x_i)$ и $P(Y = \boldsymbol{B}|X = x_i)$

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

формула полной вероятности

ЗАДАЧА КЛАССИФИКАЦИИ

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 (или полагаем как допущение в процессе решения) распределения X для каждого из классов $P(X|Y = \boldsymbol{A})$, $P(X|Y = \boldsymbol{B})$ etc., - то можно получить **аналитическое решение!**

И это решение будет ЛУЧШИМ из всех возможных.

ЗАДАЧА КЛАССИФИКАЦИИ

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

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

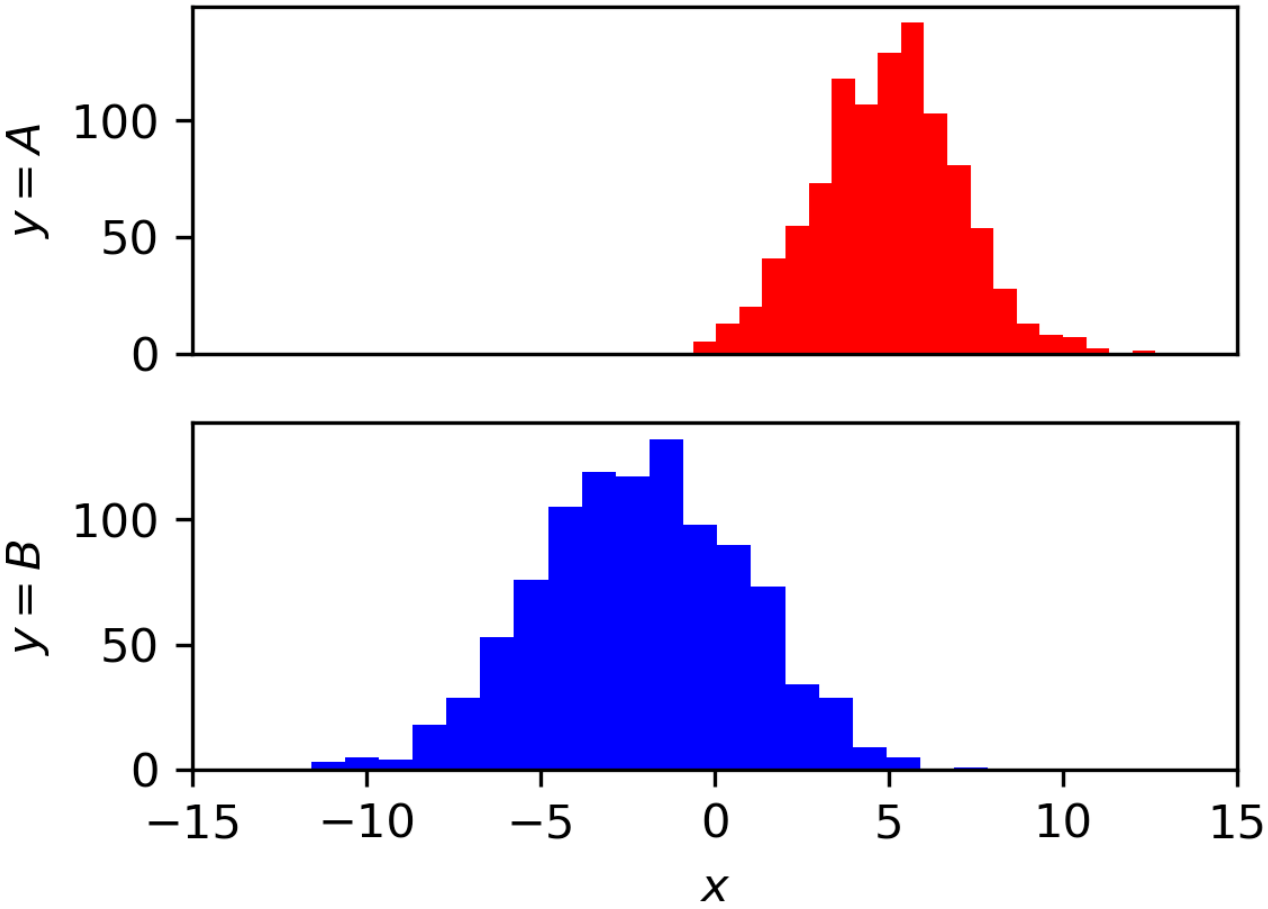
previously on ML4ES

объекты описываются действительным признаком $\boldsymbol{x}$

целевая переменная $\boldsymbol{y}$ – бинарная

пусть для класса $y = \boldsymbol{A}$ значения $x \sim \mathcal{N}(\mu_A, \sigma_A)$, для класса $y = \boldsymbol{B}$ значения $x \sim \mathcal{N}(\mu_B, \sigma_B)$

$$\mu_A = 5$$
$$\mu_B = -2$$
$$\sigma_A = 2$$
$$\sigma_B = 3$$



ОБУЧЕНИЕ С УЧИТЕЛЕМ: задача классификации

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

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

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

«Байесовский классификатор»

(не путать с «naïve bayes»)