# Методы машинного обучения. Обзор оптимизационных задач

Bopoнцов Константин Вячеславович www.MachineLearning.ru/wiki?title=User:Vokov вопросы к лектору: k.vorontsov@iai.msu.ru

материалы курса: github.com/MSU-ML-COURSE/ML-COURSE-24-25 орг.вопросы по курсу: ml.cmc@mail.ru

BMK МГУ • 15 октября 2024

## Содержание

- Обучение с учителем
  - Классификация и регрессия
  - Регуляризация
  - Обучение ранжированию
- 2 Обучение без учителя
  - Восстановление плотности распределения
  - Кластеризация и частичное обучение
  - Обучаемая векторизация объектов
- Пеклассические парадигмы обучения
  - Перенос обучения и многозадачное обучение
  - Обучение с привилегированной информацией
  - Типология задач машинного обучения

## Общая оптимизационная задача машинного обучения

**Дано**: выборка объектов  $X^\ell = \{x_1, \dots, x_\ell\}$ 

**Найти:** вектор параметров w модели a(x,w)

Критерий: минимум эмпирического риска

$$Q(w,X^{\ell}) = \sum_{i=1}^{\ell} \mathscr{L}(w,x_i) \rightarrow \min_{w}$$

где  $\mathscr{L}(w,x_i)$  — функция потерь модели a(x,w) на объекте  $x_i$ , или минимум регуляризованного эмпирического риска

$$Q(w, X^{\ell}) = \sum_{i=1}^{\ell} \mathscr{L}(w, x_i) + \sum_{j=1}^{r} \tau_j R_j(w) \rightarrow \min_{w}$$

где  $R_j$  — регуляризаторы,  $au_j$  — коэффициенты регуляризации

# Напоминание. Задача обучения бинарной классификации

Обучающая выборка:  $X^\ell = (x_i, y_i)_{i=1}^\ell, \;\; x_i \in \mathbb{R}^n, \;\; y_i \in \{-1, +1\}$ 

Фиксируется модель классификации, например, линейная:

$$a(x, w) = \operatorname{sign} g(x, w) = \operatorname{sign} \sum_{j=1}^{n} w_j f_j(x) = \operatorname{sign} \langle x, w \rangle$$

② Функция потерь — убывающая функция отступа  $L(\mathsf{margin})$ 

$$\mathscr{L}(w,x_i) = [g(x_i,w)y_i < 0] \leqslant L(g(x_i,w)y_i)$$

Метод обучения — минимизация эмпирического риска:

$$Q(w,X^{\ell}) = \sum_{i=1}^{\ell} \left[ g(x_i,w)y_i < 0 \right] \leqslant \sum_{i=1}^{\ell} L\left( \frac{g(x_i,w)y_i}{w} \right) \to \min_{w}$$

lacktriangled Проверка модели  $w^*$  по тестовой выборке  $X^k=( ilde{x}_i, ilde{y}_i)_{i=1}^k$ :

$$Q(w^*, X^k) = \frac{1}{k} \sum_{i=1}^k \left[ g(\tilde{x}_i, w^*) \tilde{y}_i < 0 \right]$$

# Напоминание. Задача обучения многоклассовой классификации

Обучающая выборка: 
$$X^\ell=(x_i,y_i)_{i=1}^\ell, \ x_i\in\mathbb{R}^n, \ y_i=y(x_i)\in Y$$

**1** Модель классификации, например, *линейная*,  $w = (w_y)_{y \in Y}$ :

$$a(x, w) = \arg \max_{y \in Y} g(x, w_y) = \arg \max_{y \in Y} \langle x, w_y \rangle$$

Функция потерь — бинарная или её аппроксимация:

$$\mathscr{L}(w, x_i) = \sum_{\mathbf{z} \neq y_i} [g(x_i, \mathbf{w}_{y_i}) < g(x_i, \mathbf{w}_{\mathbf{z}})] \leqslant \sum_{\mathbf{z} \neq y_i} L(M_{iz}(w)),$$

где  $M_{iz}(w) = g(x_i, \mathbf{w}_{y_i}) - g(x_i, \mathbf{w}_{z})$  — отступ  $x_i$  по классу z

Метод обучения — минимизация эмпирического риска:

$$Q(w, X^{\ell}) = \sum_{i=1}^{\ell} \sum_{\mathbf{z} \neq y_i} L(g(x_i, \mathbf{w}_{y_i}) - g(x_i, \mathbf{w}_{\mathbf{z}})) \to \min_{w}$$

lacktriangled Проверка модели  $w^*$  по тестовой выборке  $X^k=( ilde{x}_i, ilde{y}_i)_{i=1}^k$ 

# Напоминание. Задача обучения регрессии

Обучающая выборка:  $X^\ell=(x_i,y_i)_{i=1}^\ell,\;\;x_i\in\mathbb{R}^n,\;\;y_i=y(x_i)\in\mathbb{R}$ 

lacktriangle Модель регрессии, например, линейная,  $w\in\mathbb{R}^n$ :

$$a(x, w) = \langle x, w \rangle = \sum_{j=1}^{n} w_j f_j(x)$$

Функция потерь — квадратичная:

$$\mathscr{L}(w,x_i) = (a(x_i,w) - y_i)^2$$

Метод обучения — метод наименьших квадратов:

$$Q(w,X^{\ell}) = \sum_{i=1}^{\ell} \mathscr{L}(w,x_i) = \sum_{i=1}^{\ell} (a(x_i,w) - y_i)^2 \rightarrow \min_{w}$$

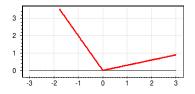
lacksquare Проверка модели  $w^*$  по тестовой выборке  $X^k = ( ilde{x}_i, ilde{y}_i)_{i=1}^k$ :

$$Q(w^*, X^k) = \frac{1}{k} \sum_{i=1}^k (a(\tilde{x}_i, w^*) - \tilde{y}_i)^2$$

## Квантильная регрессия

Функция потерь, 
$$\varepsilon = a(x_i, w) - y_i$$
:

$$L(\varepsilon) = \begin{cases} C_{+}|\varepsilon|, & \varepsilon > 0 \\ C_{-}|\varepsilon|, & \varepsilon < 0; \end{cases}$$



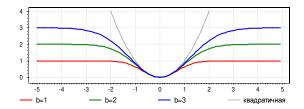
Модель a(x,w)=w: решением является q-кванти́ль  $w=y^{(\ell q)}$ , где  $y^{(1)},\dots,y^{(\ell)}$  — вариационный ряд,  $q=\frac{C_-}{C_-+C_+}$ .

Модель  $a(x,w)=\langle x,w\rangle$ : задача линейного программирования после замены переменных  $\varepsilon_i^+=\big(a(x_i)-y_i\big)_+,\ \varepsilon_i^-=\big(y_i-a(x_i)\big)_+$ :

$$\begin{cases} \sum_{i=1}^{\ell} \left( C_{+} \varepsilon_{i}^{+} + C_{-} \varepsilon_{i}^{-} \right) & \to & \min_{w}; \\ \langle x_{i}, w \rangle - y_{i} = \varepsilon_{i}^{+} - \varepsilon_{i}^{-}; & \varepsilon_{i}^{+} \geqslant 0; & \varepsilon_{i}^{-} \geqslant 0. \end{cases}$$

# Робастная (помехоустойчивая) регрессия

Функция Мешалкина: 
$$L(\varepsilon) = b \left( 1 - \exp \left( -\frac{1}{b} \varepsilon^2 \right) \right), \;\; \varepsilon = a - y$$



**Модель регрессии:** не обязательно линейная a(x, w)

Постановка оптимизационной задачи:

$$\sum_{i=1}^{\ell} \exp\left(-\frac{1}{b}(a(x_i, w) - y_i)^2\right) \to \max_{w}$$

Численное решение — методом SG или Ньютона-Рафсона

#### Задачи прогнозирования временных рядов

**Дано:**  $y_0, y_1, \ldots, y_t, \ldots$  — временной ряд,  $y_i \in \mathbb{R}$  **Найти:**  $\hat{y}_{t+d}(w) = f_{t,d}(y_1, \ldots, y_t; w)$  — модель временного ряда, где  $d = 1, \ldots, D$ , D — горизонт прогнозирования, w — вектор параметров модели.

Критерий: минимум среднеквадратичной ошибки прогнозов:

$$\sum_{t=T_0}^T (\hat{y}_{t+d}(w) - y_{t+d})^2 \rightarrow \min_{w}$$

Пример: линейная модель авторегрессии.

В роли признаков выступают n предыдущих наблюдений ряда:

$$\hat{y}_{t+1}(w) = \sum_{j=1}^{n} w_j y_{t-j+1}, \quad w \in \mathbb{R}^n$$

В роли объектов  $\ell=t-n+1$  моментов истории ряда.

## Регуляризаторы, штрафующие сложность линейной модели

Регуляризатор — аддитивная добавка к основному критерию:

$$\sum_{i=1}^{\ell} \mathscr{L}(w,x_i) + \tau$$
 штраф $(w) \rightarrow \min_{w}$ 

где au — коэффициент регуляризации

L<sub>2</sub>-регуляризация:

штра
$$\phi(w) = \|w\|_2^2 = \sum_{j=1}^n w_j^2$$
.

 $L_1$ -регуляризация (приводит к отбору признаков):

штра
$$\phi(w) = \|w\|_1 = \sum_{j=1}^n |w_j|.$$

 $L_0$ -регуляризация (приводит к отбору признаков):

штра
$$\phi(w) = \|w\|_0 = \sum_{j=1}^n [w_j \neq 0].$$

# Напоминание. L1-регуляризация приводит к отбору признаков

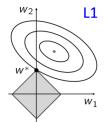
Эквивалентная постановка задачи  $\sum\limits_{i=1}^\ell \mathscr{L}(w,x_i) o \min\limits_w$ 

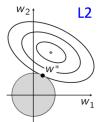
с регуляризатором в виде ограничения-неравенства:

L1: 
$$\sum_{j=1}^{n} |w_j| \leqslant \varkappa$$

L2: 
$$\sum_{j=1}^{n} w_j^2 \leqslant \varkappa$$

L1 — это метод LASSO (Least Absolute Shrinkage and Selection Operator) приводит к обнулению некоторых  $w_j$ , то есть к отбору признаков

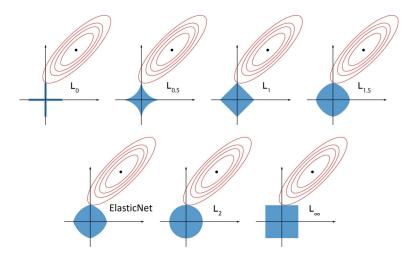




T. Hastie, R. Tibshirani, J. Friedman. The Elements of Statistical Learning. 2017.

# Напоминание. Геометрический смысл $L_p$ -регуляризаторов

Отбор признаков происходит благодаря негладкости нормы:



# Негладкие регуляризаторы для отбора и группировки признаков

Общий вид регуляризаторов ( $\mu$  — параметр селективности):

$$\begin{array}{l} \sum\limits_{i=1}^{\ell} \mathscr{L}(w,x_i) + \sum\limits_{j=1}^{n} R_{\mu}(w_j) \ \rightarrow \ \min_{w}. \end{array}$$

Регуляризаторы с эффектами отбора и группировки признаков:

**LASSO** (
$$L_1$$
):  $R_{\mu}(w) = \mu |w|$ 

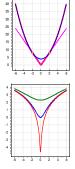
Elastic Net: 
$$R_{\mu}(w) = \mu |w| + \tau w^2$$

Support Feature Machine (SFM):

$$R_{\mu}(w) = egin{cases} 2\mu |w|, & |w| \leqslant \mu; \ \mu^2 + w^2, & |w| \geqslant \mu; \end{cases}$$

Relevance Feature Machine (RFM):

$$R_{\mu}(w) = \ln(\mu w^2 + 1)$$



# Задачи ранжирования (Learning to Rank, LtR, L2R, LETOR)

Ранжирование нужно везде, где система предоставляет пользователю выбор из большого числа вариантов:

- выдача поисковой системы
- рекомендации книг, фильмов, музыки, и др. товаров
- рекомендации контента в дистанционном образовании
- автоматическое завершение запроса (auto-suggest)
- варианты ответа в диалоговых системах
- варианты перевода в системах машинного перевода

## Критерий конструируется по-разному в трёх подходах:

- Point-wise поточечный (аналог регрессии/классификации)
- Pair-wise попарный (качество парных сравнений)
- List-wise списочный (качество ранжированного списка)

# Попарный (pair-wise) подход к обучению ранжированию

**Дано:**  $X^{\ell} = \{x_1, \dots, x_{\ell}\}$  — обучающая выборка  $i \prec j$  — правильный порядок на парах объектов  $(x_i, x_j)$  (например, в поиске два документа в ответ на один запрос)

**Найти:** модель ранжирования  $a\colon X \to \mathbb{R}$  такую, что

$$i \prec j \Rightarrow a(x_i, w) < a(x_j, w)$$

**Критерий**: число неверно упорядоченных пар объектов  $(x_i, x_j)$  или аппроксимированный попарный эмпирический риск:

$$\sum_{i \prec j} \left[ a(x_j, w) < a(x_i, w) \right] \leqslant \sum_{i \prec j} L(\underbrace{a(x_j, w) - a(x_i, w)}_{M_{ij}(w)}) \rightarrow \min_{w}$$

где L(M) — убывающая функция парного отступа  $M_{ii}(w)$ 

#### Задача восстановления плотности распределения

**Дано**:  $X^\ell = \{x_1, \dots, x_\ell\}$  — обучающая выборка

**Найти**: вектор параметров  $\theta$  в модели  $p(x|\theta)$ 

Критерий: максимум правдоподобия

$$\sum_{i=1}^{\ell} \ln p(x_i|\theta) \to \max_{\theta}$$

или максимум апостериорной вероятности

$$\sum_{i=1}^{\ell} \ln p(x_i|\theta) + \ln p(\theta|\gamma) \rightarrow \max_{\theta}$$

где  $\gamma$  — вектор гиперпараметров априорного распределения

#### Задача восстановления смеси плотностей распределения

**Дано**:  $X^\ell = \{x_1, \dots, x_\ell\}$  — обучающая выборка

**Найти:** параметры  $w_j$ ,  $\theta_j$  в модели  $p(x|\theta,w) = \sum\limits_{i=1}^K w_j p(x|\theta_j)$ 

Критерий: максимум правдоподобия

$$\sum_{i=1}^{\ell} \ln p(x_i|\theta,w) \to \max_{\theta,w}$$

или максимум апостериорной вероятности

$$\sum_{i=1}^{\ell} \ln p(x_i|\theta, w) + \ln p(\theta, w|\gamma) \rightarrow \max_{\theta, w}$$

где  $\gamma$  — вектор гиперпараметров априорного распределения

# Задача кластеризации (clustering)

**Дано:**  $X^\ell = \{x_1, \dots, x_\ell\}$  — обучающая выборка,  $x_i \in \mathbb{R}^n$ 

#### Найти:

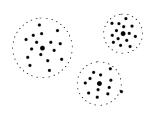
- центры кластеров параметры  $\mu_j \in \mathbb{R}^n$ ,  $j=1,\ldots,K$
- какому кластеру принадлежит каждый объект  $a_i \in \{1,\ldots,K\}$

**Критерий:** минимум суммы внутрикластерных расстояний

$$\sum_{i=1}^{\ell} \|x_i - \mu_{a_i}\|^2 \to \min_{\{a_i\}, \{\mu_j\}}$$

Метрика, как правило, евклидова (но может быть и другая):

$$||x - \mu_j||^2 = \sum_{d=1}^n (f_d(x) - \mu_{jd})^2$$



# Одноклассовая классификация (one-class classification)

Задачи детекции выбросов / аномалий / новизны (outlier / anomaly / novelty detection)

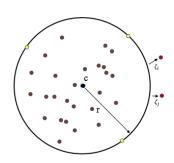
**Дано:**  $X^{\ell} = \{x_1, \dots, x_{\ell}\}$  — обучающая выборка,  $x_i \in \mathbb{R}^n$ 

**Найти:** центр  $c \in \mathbb{R}^n$  и радиус r шара, охватывающего всю выборку кроме, быть может, небольшого числа аномальных объектов-выбросов

**Критерий:** минимизация радиуса шара и суммы штрафов за выход из шара:

$$\tau r^2 + \sum_{i=1}^{\ell} L(\underbrace{r^2 - \|x_i - c\|^2}_{\zeta_i = \mathsf{margin}(c,r)}) \to \min_{c,r},$$

где L(M) — убывающая функция отступа



# Задача частичного обучения (semi-supervised learning, SSL)

## Дано:

$$X^k = \{x_1, \dots, x_k\}$$
 — размеченные объекты (labeled data);  $\{y_1, \dots, y_k\}$ ,  $y_i \in Y$ 

 $U = \left\{ x_{k+1}, \dots, x_{\ell} 
ight\}$  — неразмеченные объекты (unlabeled data).

**Найти:** классификации  $\{a_{k+1},\ldots,a_\ell\}$  неразмеченных объектов

Критерий: без модели классификации (transductive learning):

$$\sum_{i=1}^{\ell} \|x_i - \mu_{a_i}\|^2 + \lambda \sum_{i=1}^{k} \left[ a_i \neq y_i \right] \to \min_{\{a_i\}, \{\mu_j\}}$$

**Критерий** с моделью классификации  $a_i = a(x_i, w)$ :

$$\sum_{i=1}^{\ell} \|x_i - \mu_{a_i}\|^2 + \lambda \sum_{i=1}^{k} \mathcal{L}(w, x_i, y_i) + \tau R(w) \rightarrow \min_{\{a_i\}, \{\mu_j\}, w}$$

где  $\mathscr{L}(w, x_i, y_i)$  — функция потерь для модели  $a(x_i, w)$ 

# Частный случай SSL: PU-learning (Positive and Unlabeled)

Примеры задач, когда известны объекты только одного класса:

- обнаружение мошеннических транзакций
- рекомендательные системы, персонализация рекламы
- медицинская диагностика при неизвестном анамнезе
- автоматическое пополнение базы знаний фактами

Модель двухклассовой классификации  $a(x_i,w)\in\{-1,+1\}$  Неразмеченные трактуются как негативные с весом  $\lambda\ll 1$ :

$$\sum_{i=1}^{k} \mathcal{L}(w, x_i, +1) + \frac{\lambda}{\lambda} \sum_{i=k+1}^{\ell} \mathcal{L}(w, x_i, -1) + \tau R(w) \rightarrow \min_{w}$$

Hepaзмeчeнные могут выбираться случайно (Negative Sampling)

Gang Li. A Survey on Positive and Unlabelled Learning. 2013. J.Bekker, J.Davis. Learning From Positive and Unlabeled Data: A Survey. 2020.

# Задача обучения автокодировщика (AutoEncoder)

**Дано**:  $X^\ell = \{x_1, \dots, x_\ell\}$  — обучающая выборка

Найти модель векторизации, сохраняющую информацию:

 $f:X\! o\!Z$  — кодировщик (encoder), кодовый вектор  $z\!=\!f(x,lpha)$ 

 $g:Z\! o\! X$  — декодировщик (decoder), реконструкция  $\hat{x}\!=\!g(z,\beta)$ 

**Критерий**: точность восстановления объектов  $g(f(x_i)) = \hat{x}_i \approx x_i$ 

$$\sum_{i=1}^{\ell} \mathscr{L}\big(\mathbf{g}(f(\mathbf{x}_i,\alpha),\beta),\mathbf{x}_i\big) \to \min_{\alpha,\beta}$$

Квадратичная функция потерь:  $\mathscr{L}(\hat{x},x) = \|\hat{x} - x\|^2$ 

**Пример**. Линейный автокодировщик:  $x \in \mathbb{R}^n$ ,  $z \in \mathbb{R}^m$ 

$$f(x, A) = \underset{m \times n}{A} x, \qquad g(z, B) = \underset{n \times m}{B} z$$

При  $m \ll n$  происходит сжатие данных об объектах

#### Автокодировщик, частично обучаемый с учителем

**Данные:** размеченные  $(x_i, y_i)_{i=1}^k$ , неразмеченные  $(x_i)_{i=k+1}^\ell$ 

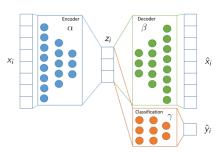
**Найти:** кодировщик f, декодировщик g и предиктор  $\hat{y}$  (предсказательную модель классификации, регрессии или др.):

$$\sum_{i=1}^{\ell} \mathscr{L}(g(f(x_i,\alpha),\beta),x_i) + \lambda \sum_{i=1}^{k} \widetilde{\mathscr{L}}(\hat{y}(f(x_i,\alpha),\gamma),y_i) \to \min_{\alpha,\beta,\gamma}$$

$$egin{aligned} z_i &= f(x_i, lpha) - \mathsf{кодировщик} \ \hat{x}_i &= g(z_i, eta) - \mathsf{декодировщик} \ \hat{y}_i &= \hat{y}(z_i, \gamma) - \mathsf{предиктор} \end{aligned}$$

#### Функции потерь:

$$\mathscr{L}(\hat{x}_i, x_i)$$
 — реконструкция  $\widetilde{\mathscr{L}}(\hat{y}_i, y_i)$  — предсказание



Dor Bank, Noam Koenigstein, Raja Giryes. Autoencoders. 2020

## Задачи низкорангового матричного разложения

Дано: матрица 
$$X=\|x_{ij}\|_{\ell\times n},\ \ (i,j)\in\Omega\subseteq\{1..\ell\} imes\{1..n\}$$

**Найти:** матрицы 
$$Z=\|z_{it}\|_{\ell imes m}$$
 и  $B=\|b_{tj}\|_{m imes n}, \ m\ll\ell,n$ 

**Критерий:** точность восстановления X произведением ZB:

$$||X - ZB||_{\Omega} = \sum_{(i,j) \in \Omega} \mathscr{L}\left(x_{ij} - \sum_{t} z_{it} b_{tj}\right) \to \min_{Z,B}$$

Применения матричных разложений:

- ullet для восстановления пустых ячеек (missing values)  $x_{ii}
  ot\in\Omega$
- ullet для генерации сжатых векторных представлений  $x_i\mapsto z_i$
- для векторизации объектов по транзакционным данным
- в рекомендательных системах
- в тематическом моделировании

# Графовые (матричные) разложения (graph factorization)

**Дано:** 
$$(i,j) \in E$$
 — выборка рёбер графа  $\langle V, E \rangle$ ,  $x_{ij}$  — сходство (близость, similarity) вершин ребра  $(i,j)$  Например,  $x_{ij} = [(i,j) \in E]$  — матрица смежности вершин.

**Найти:** векторные представления вершин  $z_i \in \mathbb{R}^d$ , чтобы близкие (по графу) вершины имели близкие векторы.

**Критерий** для **не**ориентированного графа (X симметрична):

$$\|X - ZZ^{\mathsf{T}}\|_{E} = \sum_{(i,j)\in E} (x_{ij} - \langle z_i, z_j \rangle)^2 \to \min_{Z}, \quad Z \in \mathbb{R}^{V \times d}$$

**Критерий** для ориентированного графа (X несимметрична):

$$\|X - ZB^{\mathsf{T}}\|_{E} = \sum_{(i,j) \in E} (x_{ij} - \langle z_i, b_j \rangle)^2 \to \min_{Z,B}, \quad Z, B \in \mathbb{R}^{V \times d}$$

I. Chami et al. Machine learning on graphs: a model and comprehensive taxonomy. 2020.

# Многомерное шкалирование (multidimensional scaling, MDS)

**Дано:** 
$$(i,j) \in E$$
 — выборка рёбер графа  $\langle V, E \rangle$ ,  $x_{ij}$  — расстояния (distance) между вершинами ребра  $(i,j)$ 

**Найти:** векторные представления вершин  $z_i \in \mathbb{R}^d$ , чтобы близкие (по графу) вершины имели близкие векторы

Критерий стресса (stress):

$$\sum_{(i,j)\in E} w_{ij} (\rho(z_i,z_j)-x_{ij})^2 \to \min_{Z}, \quad Z\in \mathbb{R}^{V\times d},$$

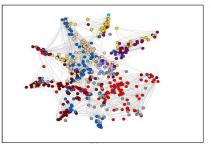
где  $ho(z_i,z_j)=\|z_i-z_j\|$  — обычно евклидово расстояние,  $w_{ij}$  — веса (какие расстояния важнее, большие или малые)

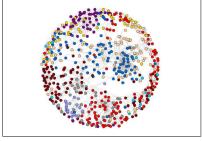
Обычно решается методом стохастического градиента (SG)

I. Chami et al. Machine learning on graphs: a model and comprehensive taxonomy. 2020.

# Многомерное шкалирование для визуализации данных

#### При d=2 осуществляется проекция выборки на плоскость





- Используется для визуализации кластерных структур
- Форму облака точек можно настраивать весами и метрикой
- Недостаток искажения неизбежны
- Наиболее популярный метод для визуализации t-SNE

Laurens van der Maaten, Geoffrey Hinton. Visualizing data using t-SNE. 2008

# Перенос обучения (transfer learning)

 $z = f(x, \alpha)$  — универсальная часть модели (векторизация)  $y = g(z, \beta)$  — специфичная для задачи часть модели

Базовая задача на выборке  $\{x_i\}_{i=1}^\ell$  с функцией потерь  $\mathscr{L}_i$ :

$$\sum_{i=1}^{\ell} \mathscr{L}_i(g(f(x_i,\alpha),\beta)) \rightarrow \min_{\alpha,\beta}$$

 $extstyle \mathcal{L}_i^{\prime}$ елевая задача на другой выборке  $\{x_i^{\prime}\}_{i=1}^m$ , с другими  $\mathcal{L}_i^{\prime}$ ,  $g^{\prime}$ :

$$\sum_{i=1}^{m} \mathcal{L}'_{i}(g'(\mathbf{f}(\mathbf{x}'_{i}, \boldsymbol{\alpha}), \beta')) \rightarrow \min_{\beta'}$$

при  $m \ll \ell$  это может быть намного лучше, чем

$$\sum_{i=1}^{m} \mathcal{L}'_i \big( g'(f(x'_i, \alpha), \beta) \big) \rightarrow \min_{\alpha, \beta}$$

Sinno Jialin Pan, Qiang Yang. A Survey on Transfer Learning. 2009

# Многозадачное обучение (multi-task learning)

 $z = f(x, \alpha)$  — векторизация, универсальная для всех моделей  $g_t(z,\beta)$  — специфичная часть модели для задачи  $t\in T$ 

Одновременное обучение модели f по задачам  $X_t$ ,  $t \in T$ :

$$\sum_{t \in \mathcal{T}} \sum_{x_{ti} \in X_t} \mathscr{L}_{ti} \big( g_t \big( f(x_{ti}, \alpha), \beta_t \big) \big) \ \to \ \min_{\alpha, \{\beta_t\}}$$

Обучаемость (learnability): качество решения отдельной задачи  $\langle X_t, \mathscr{L}_t, g_t 
angle$  улучшается с ростом объёма выборки  $\ell_t = |X_t|$ .

Learning to learn: качество решения каждой из задач  $t \in T$ улучшается с ростом как  $\ell_t$ , так и общего числа задач |T|.

Few-shot learning: для решения новой задачи t достаточно небольшого числа примеров, иногда даже одного.

M. Crawshaw. Multi-task learning with deep neural networks: a survey. 2020 Y. Wang et al. Generalizing from a few examples: a survey on few-shot learning, 2020

## Дистилляция моделей или суррогатное моделирование

Обучение сложной модели a(x, w) «долго, дорого»:

$$\sum_{i=1}^{\ell} \mathcal{L}(\mathbf{a}(\mathbf{x}_i, \mathbf{w}), \mathbf{y}_i) \rightarrow \min_{\mathbf{w}}$$

Обучение простой модели b(x, w'), возможно, на других данных:

$$\sum_{i=1}^{k} \mathcal{L}(b(x_i', w'), a(x_i', w)) \rightarrow \min_{w'}$$

#### Примеры задач:

- замена сложной модели (климат, аэродинамика и др.), которая вычисляется на суперкомпьютере месяцами, «лёгкой» аппроксимирующей суррогатной моделью
- замена сложной нейросети, которая обучается неделями на больших данных, «лёгкой» аппроксимирующей нейросетью с минимизацией числа нейронов и связей

# Задача обучения с привилегированной информацией

 $x_i^st$  — информация об объекте  $x_i$ , доступная только на обучении

Раздельное обучение модели-ученика и модели-учителя:

$$\begin{array}{ll} \sum\limits_{i=1}^{\ell} \mathscr{L}\big(\mathsf{a}(\mathsf{x}_i, \mathsf{w}), \mathsf{y}_i\big) \to \min_{\mathsf{w}} & \sum\limits_{i=1}^{\ell} \mathscr{L}\big(\mathsf{a}(\mathsf{x}_i^*, \mathsf{w}^*), \mathsf{y}_i\big) \to \min_{\mathsf{w}^*} \end{array}$$

Модель-ученик обучается у модели-учителя:

$$\sum_{i=1}^{\ell} \mathcal{L}(a(x_i, w), y_i) + \mu \mathcal{L}(a(x_i, w), a(x_i^*, w^*)) \rightarrow \min_{w}$$

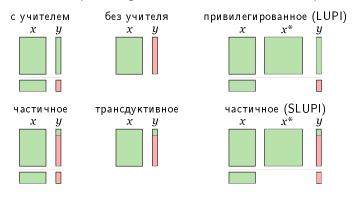
Совместное обучение модели-ученика и модели-учителя:

$$\sum_{i=1}^{\ell} \mathcal{L}(a(x_i, w), y_i) + \lambda \mathcal{L}(a(x_i^*, w^*), y_i) + \mu \mathcal{L}(a(x_i, w), a(x_i^*, w^*)) \rightarrow \min_{w, w^*}$$

D.Lopez-Paz, L.Bottou, B.Scholkopf, V.Vapnik. Unifying distillation and privileged information. 2016.

# Обучение с использованием привилегированной информации

 $x_i^*$  — информация об объекте  $x_i$ , доступная только на обучении Варианты LUPI (Learning Using Priveleged Information):



V. Vapnik, A. Vashist. A new learning paradigm: Learning Using Privileged Information // Neural Networks. 2009.

## Типология задач машинного обучения

- ① Предварительная обработка (data preparation)
  - извлечение признаков (feature extraction)
  - отбор признаков (feature selection)
  - восстановление пропусков (missing values)
  - фильтрация выбросов (outlier detection)
- Обучение с учителем (supervised learning)
  - классификация (classification)
  - регрессия (regression)
  - ранжирование (learning to rank)
  - прогнозирование (forecasting)
- Обучение без учителя (unsupervised learning)
  - восстановление плотности (density estimation)
  - кластеризация (clustering)
  - одноклассовая классификация (OCC, anomaly detection)
  - поиск ассоциативных правил (association rule learning)
- Частичное обучение (semi-supervised learning)
  - трансдуктивное обучение (transductive learning)
  - обучение с положительными примерами (PU-learning)

# Типология задач машинного обучения

- Обучаемая векторизация объектов (representation learning)
  - автокодировщики (autoencoders, feature learning)
  - матричные разложения (matrix factorization)
  - обучение многообразий (manifold learning)
- Перенос обучения (transfer learning)
- Многозадачное обучение (multitask learning)
- Привилегированное обучение (privileged learning, distilling)
- Инкрементное обучение (online/incremental learning)
- Активное обучение (active learning)
- Обучение с подкреплением (reinforcement learning)
- Мета-обучение (meta-learning, AutoML)
- Обучение близости/связей (similarity/relational learning)
- Обучение структуры модели (structure learning)
- Глубокое обучение (deep learning)
  - Порождение структурированных данных (structured output)
  - Состязательное обучение (adversarial learning)