Введение в машинное обучение

Национальный исследовательский университет "Высшая школа экономики"
Yandex School of Data Analysis

Неофициальный конспект по курсу.

1 апреля 2021 г.

1 Проблема переобучения

Одна из основных проблем в машинном обучении — проблема переобучения. Рассмотрим пару примеров:

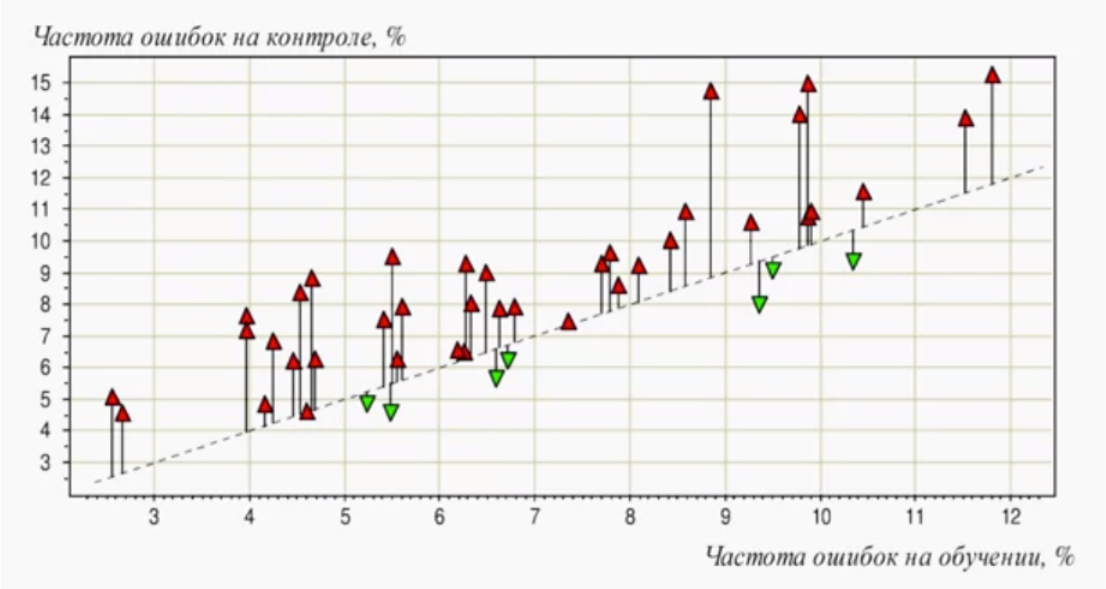
1.1 Пример. Переобучение в задачи медицинской диагностики.

Задача предсказания отдаленного результата хирургического лечения атеросклероза.

Задача в целом типичная. Данные в ней содержат разнотипные признаки с пропусками, причем признаки делятся на 2 большие группы: данные о гемодинамике (скорость кровотоков в артериях, венах), данные об иммунологии.

Задача состоит в том, чтобы предсказать, будут ли у человека осложнения после хирургического лечения атеросклероза, когда человеку кусок вены заменяют шунтом. Это важно для хирургов, чтобы как можно раньше заметить различные осложнения.

И при решении этой задачи (у лектора) возникли проблемы переобучения:

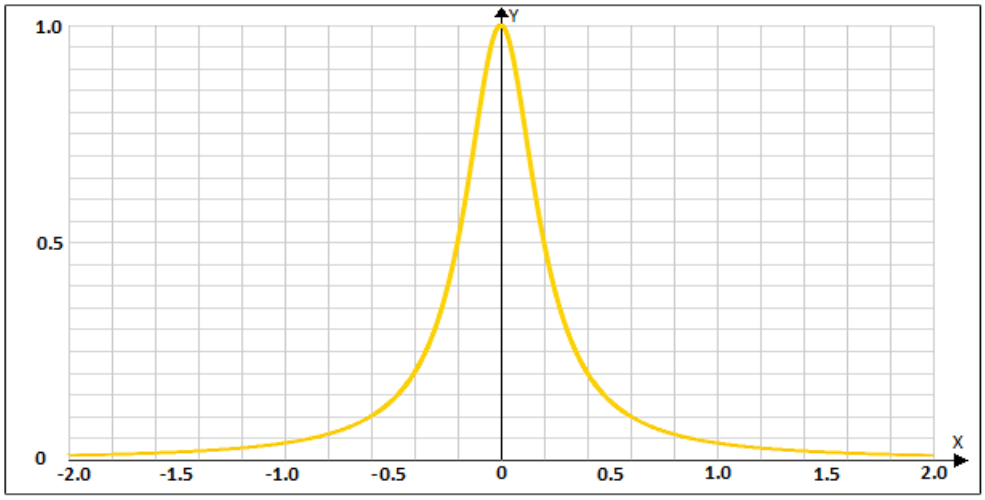


Точки на данном графике — это отдельные предсказательные модели, отдельные алгоритмы.
По осям – частота ошибок на обучении и частота ошибок на контроле.
Пунктирная линия — это биссектриса (проходит под углом 45 градусов), она показывает геометрическое место точек, где частота ошибок на контроле и обучении совпадает.

На графике видно, что все что множество точек имеет систематический сдвиг вверх, то есть в среднем частота ошибок на контроле больше. То есть алгоритм на практике становится не таким точным, как хотелось бы — мы переобучили до соответствия обучающей выборке.

1.2 Пример. Переобучение полиномиальной регрессии

Второй пример уже из области регрессии (пример искусственный, но все же).
Возьмем функцию $y(x) = \frac{1}{1+25x^2}$ на отрезке $x \in [-2, 2]$ и попробуем ее аппроксимировать.



А в качестве признаковых описаний объектов будем использовать векторы степеней x:

$$x \mapsto (1, x^1, x^2, \ldots, x^n)$$

В таком случае можно попробовать использовать линейную модель регрессии, а именно – модель полиномиальной регрессии (у нас получится полином, потому полиномиальная):

$$a(x, \theta) = \theta_0 + \theta_1 x + \ldots + \theta_n x^n \quad \text{— полином степени n.}$$

Совершенно стандартный подход к решению этой задачи – метод наименьших квадратов, то есть, на языке машинного обучения, использование квадратичных функций потерь:

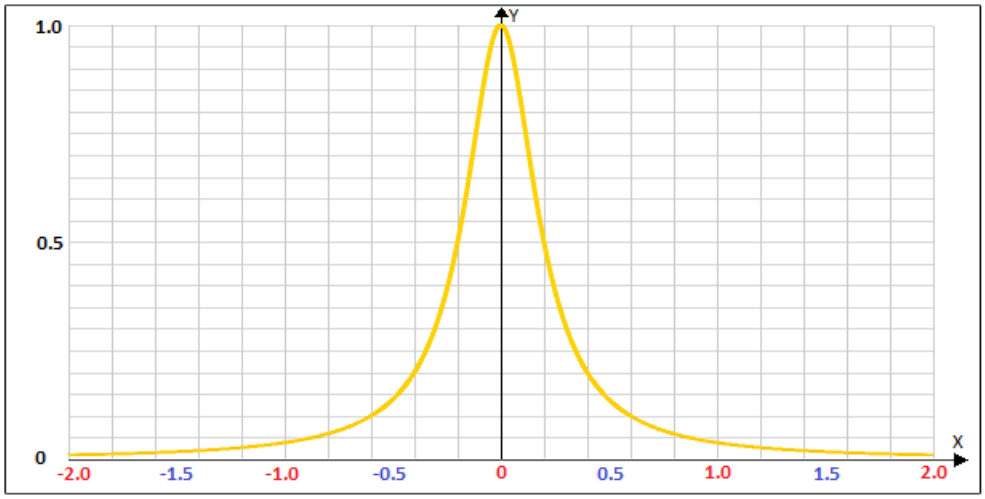
$$Q(a, X^l) = \sum_{i=1}^{l} (\theta_0 + \theta_1 x_i + \ldots + \theta_n x_i^n - y_i)^2 \to \min_{\theta_0, \ldots, \theta_n}$$

Далее возьмем обучающую и контрольную выборки следующим образом:

$$X^l = \{x_i = 4\frac{i-1}{l-1} - 2 \mid i = 1, \ldots, l\}$$

$$X^k = \{x_i = 4\frac{i-0.5}{l-1} - 2 \mid i = 1, \ldots, l-1\}$$

Выглядит странно, но на деле это нам даст обучающую выборку в узлах сетки, а контрольная выборка будет содержать точки ровно посередине между двумя соседними обучающими точками:



И наконец зададимся вопросом, **что происходит с функционалом качества на обучающей выборке и контрольной выборке**.

Нарисуем их как две зависимости среднеквадратичной ошибки от степени полинома ($l = 50$, $n = 1, \ldots, n31$):

Можно увидеть, что ошибка на обучении монотонно убывает (чем больше степень полинома, тем больше коэффициентов степеней свободы, тем точнее соответствие функции), но в какой-то момент степень полинома начинает нам "мешать и качество восстановления зависимости на контрольной выборке, начиная с 21 степени начинает только ухудшаться.

Вопрос: почему и что происходит при этом с самой функцией?

На данном графике красным изображена зависимость, которую мы аппроксимируем (исходная функция), а синим — то, чем мы ее аппроксимируем (наш полином степени 38 в данном случае).

Тут же мы видим, что на концах отрезка полином очень плохо описывает эту функцию, хотя очень точно проходит через точки обучающей выборки. Между точками обучающей выборки полином "улетает"куда-то ближе к бесконечности.

Данный эффект связан с тем, что при увеличении числа степеней свободы (числа параметров модели) у нас начинает происходить подстройка под конкретные точки выборки, и модель ловит несоответствия между моделью и оригинальной функцией. Такая модель может быть очень неустойчива к шумам (погрешностям измерений, неточным данным) — значит нужно как-то ограничивать сложность модели.

Как избежать этого эффекта? Как научиться оценивать этот эффект? Как строить такие модели, где гарантировано степень переобучения будет в некоторых пределах, например, 2%?

1.3 Эмпирические оценки обобщающей способности

Для того, чтобы измерять подобные эффекты, принято использовать функционалы, которые непосредственно измеряют качество построенной модели на тех данных, на которых модель не обучалась.

- Эмпирический риск на тестовых данных (**hold-out**):

$$HO(\mu, X^l, X^k) = Q(\mu(X^l), X^k) \to min$$

Напомним, что $\mu(X^l)$ — это минимизация некоторого функционала качества (не указан явно, но подразумевается) на некоторой выборке (X^l).
И $Q(a, X^k)$ – функционал качества некоторого алгоритма a на некоторой выборке X^k.

В данном случае *разделение выборок* происходит самым простым способом — выборка между обучением и контролем в некотором соотношении: X^l и X^k соответственно.

Однако, есть проблема, когда при *неудачном выборе разбиения* наша оценка будет *субъективной, смещенной*. Чтобы этого не происходило, используется метод, описанный далее.

- Скользящий контроль (**leave-one-out**), $L = l + 1$:

$$LOO(\mu, X^L) = \frac{1}{L}\sum_{i=1}^{L} \mathscr{L}(\mu(X^L \backslash \{x_i\}),\ x_i) \to min$$

Так же напомним, что $\mathscr{L}(a, x)$ — функция потерь — величина ошибки алгоритма a на объекте x.

Решение проблемы *«неудачного разбиения»* здесь решается тем, что делается *много* разбиений.

Простейший способ это сделать — каждый раз выделять по *одному контрольному объекту*, а по оставшейся выборке проводить обучение. *Минус* в том, что обучение придется проводить столько раз, сколько объектов в обучающей выборке (может тысяча, а может миллион... долго в общем).

- Кросс-проверка (**cross-validation**) по N разбиениям, $X^L = X^l_n \sqcup X^k_n$, $L = l + k$:

$$CV(\mu, X^L) = \frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N} Q(\mu(x^l_n), X^k_n) \to min$$

Метод делает всевозможные кросс-проверки (как следует из названия), когда мы каким-то образом устраиваем много N разбиений выборки на обучение и контроль, и каждый раз мы на одной части обучаемся, на другой проверяем результат, и в итоге усредняем результат по всевозможным разбиениям.

Данный способ уже менее зависим от того, какие разбиения будут выбраны. Можно в том числе делать случайные разбиения.

2 Эксперименты в машинном обучении

2.1 Эксперименты на реальных данных

1. **Эксперименты на конкретной прикладной задаче:**

   - цель — решить задачу как можно лучше
   - важно понимание задачи и данных
   - важно придумывать информативные признаки
   - конкурсы по анализу данных: https://www.kaggle.com

2. **Эксперименты на наборах прикладных задач:**

   - цель — протестировать метод в разнообразных условиях
   - нет необходимости (и времени) разбираться в сути задач (:c)
   - признаки, как правило, уже кем-то придуманы
   - репозитории UC Irvine Machine Learning Repository https://archive.ics.uci.edu/ml (308 задач, 09-02-2015)

   Часто берется большой массив задач с хорошо (понадеемся на это) подготовленными данными, и по этим задачам прогоняется большое число алгоритмов. Обычно строится матрица *«задача-методы»*, и в каждой ячейке этой матрицы находятся те самые оценки **CV** или **LOO**, и показываются наличия и степени переобучения различных методов.

   По этим данным можно уже разрабатывать, подгонять алгоритм, чтобы он был как можно более универсален или по крайней мере не имел серьезных проблем с переобучением.

   Этот тип экспериментов скорее нужен для исследователей, которые занимаются разработкой новых методов, а не решением каких-то задач.

2.2 Эксперименты на модельных (синтетических) данных

Используются для тестирования новых методов обучения.

Преимущество — мы знаем истинную $y(x)$ (**ground truth**) т.к. мы на ее основе генерируем данные. Более того, поскольку мы выбираем нашу зависимость $y(x)$, мы можем устроить целую линейку задач от *очень простой* до *очень сложной*, и посмотреть, где алгоритм уже не справляется.

1. **Эксперименты на модельных (syntetic) данных:**

   - цель — отладить метод, выявить границы применимости
   - объекты x_i из придуманного распределения (часто 2D)
   - ответы $y_i = y(x_i)$ для придуманной функции $y(x)$
   - двумерные данные + визуализация сборки

2. **Эксперименты на полумодельных (semi-syntetic) данных:**

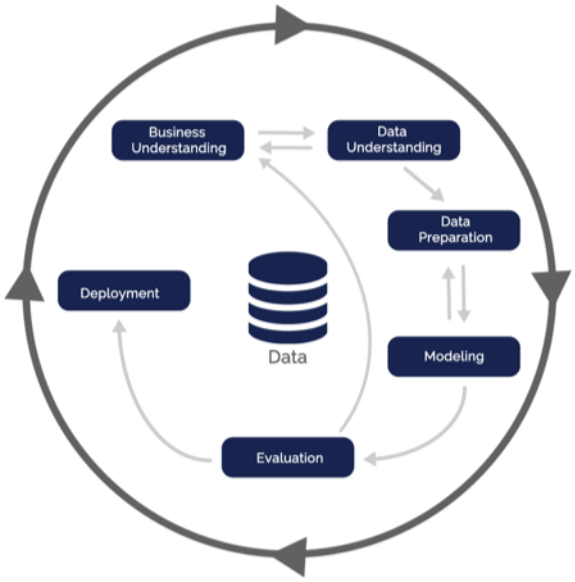
   - цель — протестировать помехоустойчивость модели
   - объекты x_i из реальной задачи (+ шум)
   - зависимость y_i все еще искусственная (выбирается на реальных данных)
   - ответы $y_i = a(x_i)$ для полученного решения $a(x)$ (+ шум)

3 CRISP-DM: CRoss Industry Standart Process for Data Mining

CRISP-DM — **CR**oss **I**ndustry **S**tandart **P**rocess for **D**ata **M**ining
(да, я просто выделил буковки, если кому было лень читать название, чтобы уж так было понятнее)

Говоря о решении задач в реальных приложениях (в науке, бизнесе, медицине...) можно вспомнить про межотраслевые стандарты. Одним из них является **CRISP-DM** — межотраслевой стандарт решения задач интеллектуального анализа данных.

CRISP-DM содержит в себе **формализацию схемы решения прикладных задач на реальных данных**, которую, в общем-то, сообщество выработало уже давно. Он предполагает решение задачи в 5 шагов, которые могут при этом замыкаться и повторяться многократно:



1. Понять, откуда задача пришла (понять предметную область, сферу).
2. Понять, как собирались данные: если ли там шумы, пропуски, выбросы, все ли признаки полезны.
3. Выделить полезные данные по сырой информации — *подготовка данных*
4. Моделирование — построение предсказательной модели (основное).
5. Оценка полученных моделей.
6. Внедрение модели в производственные процессы (окончание задачи).

4 Резюме

Этапы решения задач машинного обучения

- понимание задачи и данных;
- предобработка данных и изобретение признаков;
- построение модели;
- сведение обучения к оптимизации;
- решение проблем оптимизации и переобучения;
- оценивание качества решения;
- внедрение и эксплуатация.

Красным выделены основные моменты, которыми мы будем заниматься.