Обучение с учителем

Санкт-Петербургский государственный университет Кафедра статистического моделирования

16 сентября 2025, Санкт-Петербург

Введение

Машинное обучение — это раздел искусственного интеллекта, в котором разрабатываются методы и алгоритмы, позволяющие компьютерам обнаруживать закономерности в данных и делать прогнозы без явных инструкций.

Обучение с учителем — один из способов машинного обучения, в ходе которого для каждого примера в обучающем наборе известно, какой результат является правильным.

Пример задач:

- Регрессия: предсказание стоимости недвижимости, количества продаж некоторого товара, погоды.
- Классификация: предсказание ценовой категории товара, типа изображения, болеет ли человек или нет.

Постановка задачи

Дано:

- ① Пространство объектов X множество описаний объектов (например, фотографии, тексты, таблицы с признаками).
- ② Пространство ответов Y множество меток или значений, которые нужно предсказывать (например, классы «кот»/«собака», цена товара).
- $oldsymbol{\circ}$ Обучающая выборка $D=\{(x_i,y_i)\}_{i=1}^n$, где $x_i\in X$, $y_i\in Y$.

Модель:

$$y = f(x) + \varepsilon,$$

где f(x) — некоторая фиксированная (но неизвестная) функция, ε — шум, $\mathsf{E}\varepsilon=0$ и ε не зависит от x.

Предположение: f(x) лежит в некотором классе функций (например, в классе линейных функций).

Задача: по обучающей выборке D построить оценку $\hat{f}(x)$ функции f(x) в выбранном классе функций.

Функция потерь и ее минимизация

Чтобы оценить, насколько хорошо модель предсказывает ответы, используется функция потерь $L(y,\hat{y})$. Она показывает, насколько велико расхождение между истинными значениями y и его предсказаниями \hat{y} .

Тогда задача машинного обучения — минимизация выбранной функции потерь:

$$L(y, \hat{y}) \longrightarrow \min$$
.

В большинстве случаев вычислить точку минимума функции потерь аналитически не представляется возможным, поэтому для его нахождения прибегают к методам детерменированной и стохастической оптимизации (например, перебор значений по сетке, метод Ньютона и квазиньютоновские методы, (стохастический) градиентный спуск, случайный поиск).

Градиентный спуск

Градиентный спуск является наиболее распространенным алгоритмом оптимизации в машинном обучении.

Пусть f — некоторая гладкая функция, у которой необходимо найти минимум. Обозначим $p_n = -\nabla f(x_n)$ — направление антиградиента в точке x_n . Тогда

$$x_{n+1} = x_n + \alpha p_n,$$

где α — гиперпараметр, отвечающий за скорость обучения.

Условия сходимости: выпуклость f, липшицевость ∇f , ...

Критерий остановки: достижение определенного числа итераций, малая норма градиента, малое изменение значения функции.

Модификации градиентного спуска

В машинном обучении:

$$f(x) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} f_i(x),$$

где f_i — функция потерь для i-го наблюдения.

(Batch) Gradient Descent (GD):

$$p_n = -\nabla f(x_n) = -\sum_{i=1}^n \nabla f_i(x_n).$$

- ② Mini-batch GD: случайным образом выбирается m наблюдений и делается шаг с $p_n = -\sum_{i=1}^m \nabla f_{j_i}(x_n)$.
- **3** Stochastic GD: mini-batch GD c m=1.
- Adam (Adaptive Moment Estimation): основан на GD, каждый параметр модели имеет собственную адаптивную скорость обучения, основанную на прошлых градиентах.

Процесс обучения

Процесс обучения любого алгоритма машинного обучения выглядит следующим образом:

- lacktriangled Выборка D предварительно разбивается на тренировочную и тестовую: $D=D_{\mathsf{train}}\sqcup D_{\mathsf{test}}$.
- **②** На тренировочных данных модель обучается: минимизируется выбранная функция потерь $L(y,\hat{y})$.
- Также часто присутствует и валидационная выборка D_{val} , на основе которой подбираются гиперпараметры модели/производится остановка оптимизации функции потерь.

Проверка качества модели

После обучения проверяется качество/обобщающая способность модели — на тестовых данных вычисляются различные метрики. Выбираются они в зависимости от задачи.

Таблица: Метрики для задач регрессии и классификации

| Регрессия | MSE, RMSE, MAE, MAPE, WAPE |
|---------------|--|
| Классификация | Accuracy, Precision, Recall, F1-score, |
| | ROC AUC, PR AUC |

Также имеет смысл сравнить полученные результаты с baseline предсказаниями (например, среднее в задаче регрессии и наиболее распространенная метка в задаче классификации).

Линейная классификация

Пусть целевая переменная y принимает значения $\{-1,1\}$. Хотим обучить линейную модель так, чтобы плоскость, которую она задает, как можно лучше отделяла объекты одного класса от другого.

Линейный классификатор:

$$\hat{y} = \hat{f}(x; w) = \operatorname{sign}\langle x, w \rangle.$$

Функция потерь:

$$L(y, \hat{y}) = \sum_{i=1}^{n} \mathbb{I}[y_i \langle x_i, w \rangle < 0] \longrightarrow \min_{w}.$$

Линейная классификация. Отступ

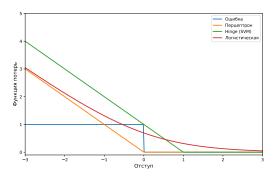
Величина $M_i=y_i\langle x_i,w\rangle$ называется **отступом** (margin) классификатора. Абсолютная величина отступа говорит о степени уверенности классификатора.

Проблема: функция $\mathbb{I}[M<0]$ кусочно-постоянная, следовательно функцию потерь невозможно оптимизировать градиентными методами, поскольку во всех точках производная равна нулю.

Решение: можно мажорировать эту функцию более гладкой функцией и минимизировать функцию потерь с этой мажорирующей функцией с помощью методов численной оптимизации.

Линейная классификация. Функции потерь

- ① Перцептрон: $L(M) = \max(0, -M)$ отступы учитываются только для неправильно классифицированных объектах пропорционально величине отступа.
- ② Hinge (SVM): $L(M) = \max(0, 1-M)$ объекты, которые классифицированы правильно, но не очень «уверенно», продолжают вносить свой вклад в градиент.
- **3** Логистическая: $L(M) = \ln (1 + e^{-M})$.



Логистическая регрессия

Посмотрим на задачу классификации как на задачу предсказания вероятностей (например, предсказание «кликабельности» рекламного баннера).

Принцип работы: научить линейную модель предсказывать значения $z \in \mathbb{R}$ (логиты), а затем преобразовывать их в вероятности с помощью сигмоиды:

$$z_i = \langle x_i, w \rangle = \ln \frac{p_i}{1 - p_i}, \quad p_i = \frac{1}{1 + e^{-\langle x_i, w \rangle}} = \sigma(\langle x_i, w \rangle).$$

Функция правдоподобия для распределения Бернулли:

$$p(y \mid \mathbf{X}, w) = \prod_{i=1}^{n} p_i^{y_i} (1 - p_i)^{1 - y_i}.$$

Прологарифмируем:

$$\sum_{i=1}^{n} \left[y_i \ln(\sigma(\langle x_i, w \rangle)) + (1 - y_i) \ln(1 - \sigma(\langle x_i, w \rangle)) \right].$$

Логистическая регрессия. Связь с отступом

Теперь пусть $y\in\{-1,1\}$. Тогда, поскольку $\sigma(z)=1-\sigma(-z)$, логарифм правдоподобия можно представить в следующем виде:

$$\ln p(y \mid \mathbf{X}, w) = -\sum_{i=1}^{n} \left[\mathbb{I}[y_i = 1] \sigma(z_i) + \mathbb{I}[y_i = -1] (1 - \sigma(z_i)) \right]$$
$$= -\sum_{i=1}^{n} \ln \sigma(y_i \langle x_i, w \rangle)$$
$$= \sum_{i=1}^{n} \ln \left(1 + e^{-M}\right)$$

Таким образом, функцию потерь в логистической регрессии можно представить в виде функции от отступа.