

Постановка задач и выбор моделей в машинном обучении

Вадим Викторович Стрижов

Московский физико-технический институт

Осенний семестр 2019

Problem statement for machine learning

Formal problem statement, **an analyst has to set**

- 1) an algebraic structure for the dataset from measurements
- 2) a data generation hypothesis from 1)
- 3) a model, or a mixture from 2)
- 4) an error function (quality criteria with restrictions) from 2)
- 5) an optimization algorithm from 3) and 4)

The result of the model construction is a Cartesian product

{models \times data sets \times quality criteria}.

Def: Big data rejects the i.i.d. (independent and identically distributed random variables) data generation hypothesis from 2). It requests a mixture model.

Некоторые задачи машинного обучения

- ▶ Задача оценки параметров модели,
- ▶ задача выбора признаков или объектов выборки,
- ▶ задача выбора модели оптимальной сложности,
- ▶ задача построения и выбора структуры модели,
- ▶ задача проверки гипотезы порождения данных.

Предполагается, что функция ошибки $S(\mathbf{w}|D, f)$ задана исходя из

- ▶ гипотезы порождения данных,
- ▶ либо из практических соображений.

Задача нахождения наиболее правдоподобных параметров

Задана выборка $D = \{(\mathbf{x}_i, y_i)\}$, $i \in \mathcal{I}$, функция ошибки модели S и модель — параметрическое семейство функций $f(\mathbf{w}, \mathbf{x})$. Требуется найти такие параметры \mathbf{w} модели, которые бы доставляли минимум функции ошибки

$$\mathbf{w}^* = \arg \min_{\mathbf{w} \in \mathbb{W}} S(\mathbf{w} | D, f). \quad (1)$$

Функция ошибки, определенная посредством логарифмической функции правдоподобия

$$S(\mathbf{w}) = -\ln(p(D | \mathbf{w}, f)),$$

обеспечивает максимизацию правдоподобия параметров. Параметры, найденные минимизацией этой функции ошибок, будут называться наиболее правдоподобными.

Примеры функции ошибки в регрессии и классификации

Регрессия

Гипотеза порождения данных: $\mathbf{y} \sim \mathcal{N}(\mathbf{f}, \mathbf{I})$.

Функция ошибки:

$$S(\mathbf{w}) = \|\mathbf{y} - \mathbf{f}\|_2^2.$$

Классификация

Гипотеза порождения данных: $\mathbf{y} \sim \mathcal{B}(f, 1 - f)$.

Функция ошибки:

$$S(\mathbf{w}) = \sum_{i \in \mathcal{I}} y_i \ln f(\mathbf{w}^T \mathbf{x}_i) + (1 - y_i) \ln(1 - f(\mathbf{w}^T \mathbf{x}_i)).$$

Задача выбора оптимального набора признаков

- ▶ Задана выборка $D = \{(\mathbf{x}_i, y_i)\}$, $i \in \mathcal{I}$.
- ▶ Задано случайное разбиение множество индексов элементов выборки $\mathcal{I} = \mathcal{L} \sqcup \mathcal{C}$.
- ▶ Множество независимых переменных $\mathbf{x} = [x_1, \dots, x_j, \dots, x_n]$ проиндексировано $j \in \mathcal{J} = \{1, \dots, n\}$.
- ▶ Задано множество моделей-претендентов $\mathfrak{F} = \{f(\mathbf{w}, \mathbf{x})\}$.
- ▶ Модель — параметрическое семейство функций $f(\mathbf{w}, \mathbf{x}) = \mu(\mathbf{w}^T \mathbf{x})$, где μ — функция связи (в случае регрессии $\mu = \text{id}$, в случае классификации $\mu = \frac{1}{1 + \exp(-\mathbf{w}^T \mathbf{x})}$).
- ▶ Структура модели $f_{\mathcal{A}}$ задана множеством индексов $\mathcal{A} \subseteq \mathcal{J}$ и означает включение переменных $\mathbf{x}_{\mathcal{A}}$. Иначе, используются только признаки-столбцы матрицы \mathbf{X} с индексами из множества \mathcal{A} .
- ▶ Задана функция ошибки S .

Задача выбора оптимального набора признаков

Требуется найти такое подмножество индексов $\mathcal{A} \subseteq \mathcal{J}$, которое бы доставляло минимум функции

$$\mathcal{A}^* = \arg \min_{\mathcal{A} \subseteq \mathcal{J}} S(f_{\mathcal{A}} | \mathbf{w}^*, D_{\mathcal{C}})$$

на разбиении выборки D , определенном множеством индексов \mathcal{C} .

При этом параметры \mathbf{w}^* модели должны доставлять минимум функции

$$\mathbf{w}^* = \arg \min_{\mathbf{w} \in \mathbb{W}} S(\mathbf{w} | D_{\mathcal{L}}, f_{\mathcal{A}})$$

на разбиении выборки, определенном множеством \mathcal{L} .

