

МАШИННОЕ ОБУЧЕНИЕ

ОСНОВЫ



Теорема Байеса,
тест Тьюринга,
ирисы Фишера,
правило Лапласа,
проклятие размерности,
логистическая регрессия,
биномиальные обезьяны,
кризис воспроизводимости,
информационные критерии,
развитие пандемии COVID-19,
экспоненциальное семейство,
метод наименьших квадратов,
ретроспективные исследования
и многое другое



Сергей Николенко

Оглавление

Предисловие	9
Весна искусственного интеллекта	9
Горький урок или повод для оптимизма?	13
План книги: о чём пойдёт речь далее	17
История книги и благодарности	20

Глава 1. Что такое машинное обучение

1.1 Искусственный интеллект от Адама до Франкенштейна	24
1.1.1 Ранняя история	24
1.1.2 Механические автоматы Средних веков и Нового времени	27
1.1.3 Ранняя математическая логика	30
1.2 AI как наука: тест Тьюринга и три волны хайпа	34
1.2.1 Тест Тьюринга	34
1.2.2 Дартмутский семинар и первая волна хайпа	39
1.2.3 Машинный перевод и первая «зима искусственного интеллекта»	42
1.2.4 Обратное распространение ошибки и вторая волна хайпа	47
1.3 Постановки задач искусственного интеллекта	50
1.3.1 Классификация задач искусственного интеллекта	50
1.3.2 Обучение с учителем: регрессия и классификация	52
1.3.3 Обучение без учителя	54
1.4 Области искусственного интеллекта: какие бывают данные	57
1.4.1 Извлечение признаков в машинном обучении	57
1.4.2 Оверфиттинг и разные части датасета	58
1.4.3 Табличные данные	60
1.4.4 Обработка последовательностей	61
1.4.5 Обработка изображений и более сложных типов данных	62
1.5 Как машинное обучение помогает другим наукам	64
1.5.1 Физика и астрономия	64
1.5.2 Математика	66
1.5.3 Химия и биология	69
1.5.4 Науки о Земле	72
1.5.5 Социальные науки	73

Глава 2. Основы байесовского вывода

2.1 Основы теории вероятностей	77
2.1.1 Введение: вероятностные пространства и распределения	77
2.1.2 Случайные величины и совместные распределения	82
2.1.3 Условные вероятности	85
2.1.4 Независимость и условная независимость	87
2.1.5 Моменты случайной величины: ожидание и дисперсия	91
*2.1.6 Как ещё можно ввести понятие вероятности	94

2.2	Вероятности в машинном обучении: теорема Байеса	100
2.2.1	Теорема Байеса в машинном обучении.	100
2.2.2	Медицинский тест с двусторонней ошибкой	104
2.2.3	Разные виды ошибок и метрики качества классификации	106
2.2.4	Задачи байесовского вывода.	110
2.3	Байес в суде и сложности вероятностной интуиции	115
2.3.1	Вероятностная интуиция — точнее, её отсутствие	115
2.3.2	Ошибка прокурора	117
2.3.3	Ошибка адвоката	120
2.3.4	Парадокс Монти Холла и когнитивные искажения	122
2.4	Монетка и сопряжённые априорные распределения.	126
2.4.1	Монетка с точки зрения байесовского вывода	126
2.4.2	Бета-распределения как апостериорные для монетки	129
2.4.3	Предсказательное распределение и правило Лапласа	132
2.4.4	Сопряжённые априорные распределения	134
2.4.5	Игральные кости и распределения, добавляющие разреженность	139
*2.5	<i>Case study: монетки, подобранные «горячей рукой»</i>	<i>149</i>
*2.5.1	<i>Разоблачение эффекта «горячей руки»</i>	<i>149</i>
*2.5.2	<i>Разоблачение разоблачения эффекта «горячей руки»</i>	<i>151</i>
*2.5.3	<i>Выводы.</i>	<i>155</i>
2.6	Кризис воспроизводимости	157
2.6.1	Кризис воспроизводимости в психологии и социальных науках	157
2.6.2	Почему результаты не воспроизводятся: р-значения и р-хакинг	162
2.6.3	Сад расходящихся тропок и парапсихология.	167
*2.6.4	<i>Модель Иоаннидиса.</i>	<i>170</i>
2.6.5	Воспроизводимость в машинном обучении.	173

Глава 3. Теория вероятностей и оптимизация

3.1	Важные дискретные распределения	177
3.1.1	Равномерное, биномиальное и геометрическое распределения	177
3.1.2	Биномиальное распределение Пуассона	181
3.1.3	Распределение Пуассона и закон редких событий	183
3.1.4	Отрицательное биномиальное, гипергеометрическое распределения	186
*3.1.5	<i>Закон Ципфа</i>	<i>191</i>
3.2	Важные непрерывные распределения	196
3.2.1	Непрерывное равномерное распределение	196
3.2.2	Нормальное распределение	197
3.2.3	Логнормальное распределение и распределение Стьюдента.	204
3.2.4	Гамма-распределение и экспоненциальное распределение.	207
3.3	Немецкие танки, датская камбала и биномиальные обезьяны	213
3.3.1	Выборка без замещения и военная разведка	213
3.3.2	Байесовский анализ и некорректные априорные распределения.	217
3.3.3	Как правильно ловить уток	224
*3.3.4	<i>Пример Джейнса: урна с шарами и биномиальные обезьяны</i>	<i>228</i>

3.4	Энтропия, KL-дивергенция и полное незнание	238
3.4.1	Энтропия как мера неопределённости	238
3.4.2	Производные понятия: перекрёстная энтропия и KL-дивергенция . . .	243
3.4.3	KL-дивергенция в машинном обучении	246
3.4.4	Информация Фишера и принцип максимума энтропии	251
*3.4.5	Априорные распределения Джеффриса	258
3.5	Оптимизация в машинном обучении.	265
3.5.1	Машинное обучение и невыпуклая оптимизация.	265
3.5.2	Анализ градиентного спуска: проблемы с масштабом	267
3.5.3	Стохастический градиентный спуск	273
3.5.4	Свойства стохастического градиентного спуска.	275

Глава 4. Линейная регрессия

4.1	История вопроса и метод наименьших квадратов	280
4.1.1	История вопроса: почему «регрессия»?	280
4.1.2	Метод наименьших квадратов	285
4.1.3	Коэффициент детерминации	290
4.1.4	Функции признаков в линейной регрессии.	293
4.1.5	Локальные признаки	298
4.2	Оверфиттинг и регуляризация.	304
4.2.1	Оверфиттинг в регрессии с полиномиальными признаками.	304
4.2.2	Гребневая регрессия.	309
4.2.3	Лассо-регрессия.	313
4.2.4	Геометрия регуляризации и другие её формы	314
4.3	Вероятностная интерпретация линейной регрессии.	321
4.3.1	Правдоподобие линейной регрессии и гауссовский шум	321
4.3.2	Все вероятностные предположения линейной регрессии.	324
4.3.3	Интерпретация коэффициентов: корреляция и причинность	329
*4.3.4	Вероятностная робастная регрессия: другие распределения шума.	335
*4.3.5	Другая робастная регрессия: RANSAC и оценка Тейла — Сена	338
4.4	Байесовский вывод в линейной регрессии	346
4.4.1	Априорное и апостериорное распределения	346
4.4.2	Пример байесовского вывода в линейной регрессии.	351
4.4.3	Предсказательное распределение	357
*4.4.4	Оценка Джеймса — Штейна	362
4.5	Case study: линейная регрессия и коронавирус	371
4.5.1	Постановка задачи	371
4.5.2	Линейная регрессия на логарифмической шкале	372
4.5.3	Обучаем функцию распределения гауссиана.	375
4.5.4	Анализ результатов и выводы.	376

Глава 5. Классификация

5.1	Постановка задачи, геометрия и вероятности	381
5.1.1	Геометрия классификации: разделяющие поверхности	381
5.1.2	Геометрия классификации для нескольких классов	385
5.1.3	Линейный дискриминант Фишера	389
5.1.4	Порождающие модели для классификации: LDA и QDA.	397
5.2	Логистическая регрессия	405
5.2.1	Как из линейной функции получить вероятности	405
5.2.2	Максимизация правдоподобия	409
5.2.3	Другие сигмоиды и пробит-регрессия	413
5.3	Байесовский вывод в логистической регрессии	416
5.3.1	Лапласовская аппроксимация	416
5.3.2	Обобщённое нормальное распределение и формула Стирлинга	418
*5.3.3	<i>Предсказательное распределение в логистической регрессии</i>	<i>421</i>
5.4	Ирисы Фишера	426
5.4.1	Набор данных	426
5.4.2	Предварительный анализ данных	428
5.4.3	Сравнение классификаторов	431
5.5	Общие замечания о классификаторах	435
5.5.1	Несбалансированные классы и перевзвешенная ошибка	435
5.5.2	Калибровка классификаторов	439
5.5.3	Как изменить классификатор в новых условиях	449
*5.5.4	<i>Проспективные и ретроспективные исследования.</i>	<i>455</i>
5.6	Порождающие модели и наивный Байес	460
5.6.1	Порождающие и дискриминирующие модели	460
5.6.2	Вероятностные предположения наивного Байеса.	463
5.6.3	Правдоподобие и сравнение с логистической регрессией.	465
5.6.4	Пример классификации текстов	467

Глава 6. Несколько важных сюжетов

6.1	Ближайшие соседи и проклятие размерности	478
6.1.1	Метод ближайших соседей.	478
6.1.2	В чём проблема с ближайшими соседями? Проклятие размерности	483
6.1.3	Эффект кожуры апельсина	489
6.2	Статистическая теория принятия решений.	494
6.2.1	Функция регрессии	494
6.2.2	Анализ метода ближайших соседей	496
6.2.3	Минимизация ожидаемой ошибки предсказания	498
6.2.4	Разложение на смещение, дисперсию и шум	500
6.3	Эквивалентные ядра и ядерные методы	507
6.3.1	Другой взгляд на предсказания линейной регрессии	507
6.3.2	Эквивалентное ядро в линейной регрессии.	509
6.3.3	Ядерные методы	511

Глава 5. Классификация

5.1	Постановка задачи, геометрия и вероятности	381
5.1.1	Геометрия классификации: разделяющие поверхности	381
5.1.2	Геометрия классификации для нескольких классов	385
5.1.3	Линейный дискриминант Фишера	389
5.1.4	Порождающие модели для классификации: LDA и QDA.	397
5.2	Логистическая регрессия	405
5.2.1	Как из линейной функции получить вероятности	405
5.2.2	Максимизация правдоподобия	409
5.2.3	Другие сигмoиды и пробит-регрессия	413
5.3	Байесовский вывод в логистической регрессии	416
5.3.1	Лапласовская аппроксимация	416
5.3.2	Обобщённое нормальное распределение и формула Стирлинга	418
*5.3.3	<i>Предсказательное распределение в логистической регрессии</i>	<i>421</i>
5.4	Ирисы Фишера	426
5.4.1	Набор данных	426
5.4.2	Предварительный анализ данных	428
5.4.3	Сравнение классификаторов	431
5.5	Общие замечания о классификаторах	435
5.5.1	Несбалансированные классы и перевзвешенная ошибка	435
5.5.2	Калибровка классификаторов	439
5.5.3	Как изменить классификатор в новых условиях	449
*5.5.4	<i>Перспективные и ретроспективные исследования.</i>	<i>455</i>
5.6	Порождающие модели и наивный Байес	460
5.6.1	Порождающие и дискриминирующие модели	460
5.6.2	Вероятностные предположения наивного Байеса.	463
5.6.3	Правдоподобие и сравнение с логистической регрессией.	465
5.6.4	Пример классификации текстов	467

Глава 6. Несколько важных сюжетов

6.1	Ближайшие соседи и проклятие размерности	478
6.1.1	Метод ближайших соседей.	478
6.1.2	В чём проблема с ближайшими соседями? Проклятие размерности	483
6.1.3	Эффект кожуры апельсина	489
6.2	Статистическая теория принятия решений.	494
6.2.1	Функция регрессии	494
6.2.2	Анализ метода ближайших соседей	496
6.2.3	Минимизация ожидаемой ошибки предсказания	498
6.2.4	Разложение на смещение, дисперсию и шум	500
6.3	Эквивалентные ядра и ядерные методы	507
6.3.1	Другой взгляд на предсказания линейной регрессии	507
6.3.2	Эквивалентное ядро в линейной регрессии.	509
6.3.3	Ядерные методы	511

6.4	Case study: байесовский вывод для гауссиана	514
6.4.1	Выводы для фиксированного среднего и фиксированной точности. . .	514
6.4.2	Вывод для среднего и точности одновременно.	519
6.4.3	Маргинализация апостериорного распределения.	523
6.4.4	Предсказательное распределение для гауссиана	525
6.5	Оценки $p(D)$: эмпирический Байес и сравнение моделей	528
6.5.1	Маргинальное правдоподобие и подбор гиперпараметров	528
6.5.2	Оценка $p(D)$ как метод сравнения моделей	535
6.5.3	Байесовский информационный критерий.	538
*6.5.4	Информационные критерии Такеучи и Акаике	540
6.6	Экспоненциальное семейство	553
6.6.1	Определение и примеры	553
6.6.2	Моменты достаточных статистик	557
6.6.3	Максимизация правдоподобия	559
6.6.4	Сопряжённые априорные и предсказательные распределения	561
6.7	Обобщённые линейные модели	563
6.7.1	Определение GLM	563
6.7.2	Примеры и максимизация правдоподобия	565
6.7.3	Пуассоновская регрессия.	567
6.7.4	Отрицательная биномиальная регрессия	574
	Заключение	576
	Литература	580