Significant increase in complexity and modest increase in accuracy

	train	test	out-of-time	Number of parameters
Logistic regression	53,08%	55,18%	57,50%	= 12
Neural network	59,85%	57,04%	58,27%	~ 240
Regression forest	61,85%	57,01%	59,61%	>1 000
Gradient boosting	**63,58%**	**58,31%**	**59,50%**	> 10 000

... it was a banking credit scoring model

To start an applied project an expert and an analyst set

1. Project goal (the expected result of development)
   main purpose of research
2. Project application (how the project result will be applied)
   environment of measures and impacts
3. Historical data description (data formats and timing)
   algebraic structures of data
4. Quality criteria (how the project quality is measured)
   error function
5. Feasibility of the project (how to prove the project feasibility, list possible risks)
   error analysis

How long the model lives after being put on operation? What replaces it after?

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

$$\{\textbf{models} \times \textbf{datasets} \times \textbf{quality criteria}\}.$$

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

Analyst creates an optimal model for expert to put it to operation

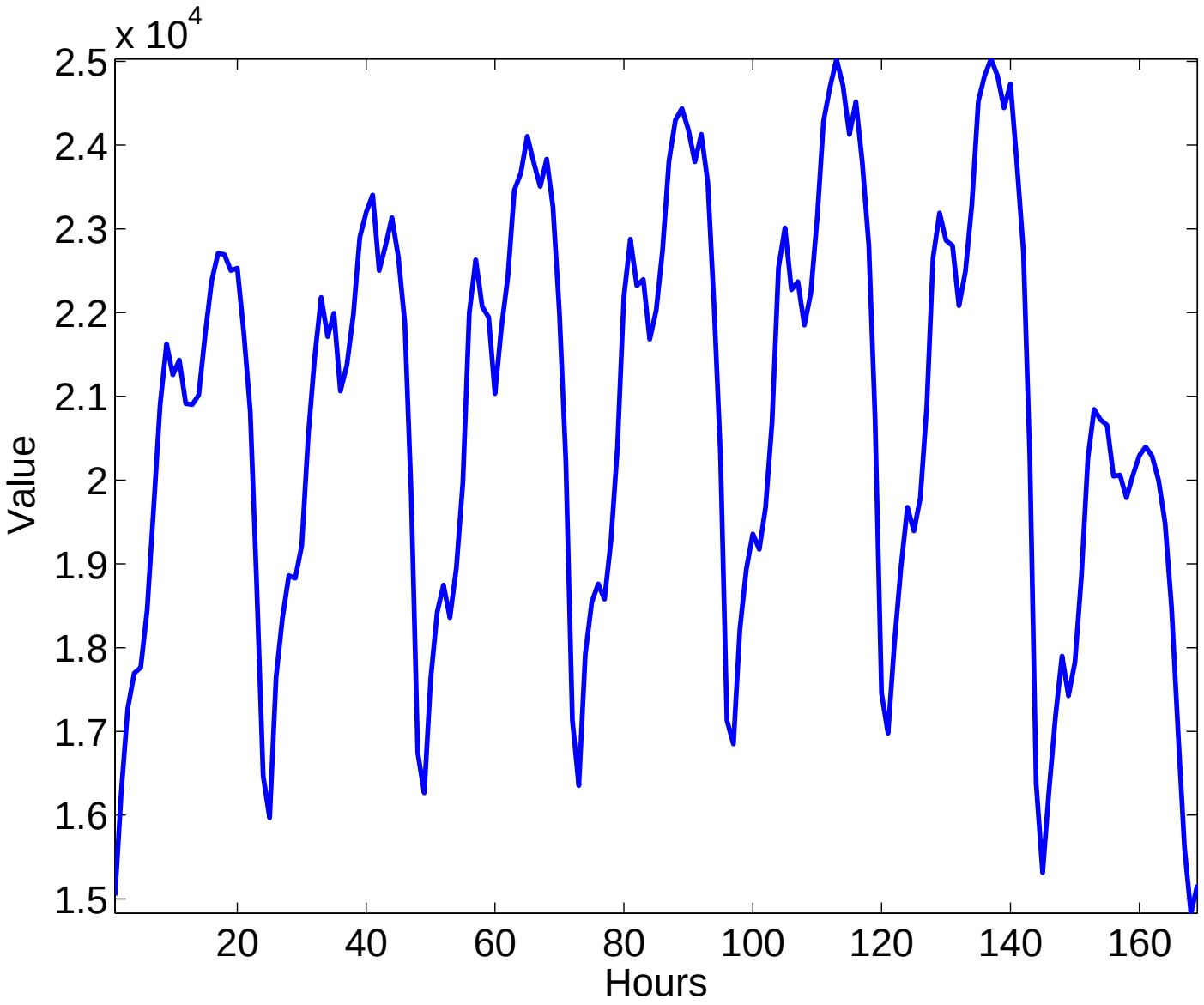
Origins of quality criteria

1. Theory: statistical hypotheses of data generation, algebraic structures of data, models of measurement
2. Computations: a criterion is useful to an optimisation procedure
3. Deployment: revenue, loss, failure rate

Quality criteria

- Accuracy: MAPE, AUC, F1 score
- Stability: forecasting variance, failure rate, parameter variance
- Complexity: number of parameters, Kolmogorov complexity

Source time series, one week



The autoregressive matrix to forecast periodic time series

- There given the time series $\{s_1, \ldots, s_\tau, \ldots, s_{T-1}\}$, the length of a period is κ.
- One must to forecast the next sample T.
- The autoregressive matrix:
  - its i-th row is a period of samples,
  - its j-th column is a phase of the period and
  - they map into the time series sample number such that $(i-1)\kappa \mapsto \tau$; let $\mathrm{mod}\frac{T}{\kappa} = 0$;

$$\underset{(m+1)\times(n+1)}{X^*} = \begin{pmatrix} s_T & s_{T-1} & \ldots & s_{T-\kappa+1} \\ s_{(m-1)\kappa} & s_{(m-1)\kappa-1} & \ldots & s_{(m-2)\kappa+1} \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ s_{n\kappa} & s_{n\kappa-1} & \ldots & s_{n(\kappa-1)+1} \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ s_\kappa & s_{\kappa-1} & \ldots & s_1 \end{pmatrix}.$$

The autoregressive matrix and the linear model

$$\underset{(m+1)\times(n+1)}{X^*} = \left(\begin{array}{c|ccc} s_T & s_{T-1} & \cdots & s_{T-\kappa+1} \\ \hline s_{(m-1)\kappa} & s_{(m-1)\kappa-1} & \cdots & s_{(m-2)\kappa+1} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ s_{n\kappa} & s_{n\kappa-1} & \cdots & s_{n(\kappa-1)+1} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ s_{\kappa} & s_{\kappa-1} & \cdots & s_1 \end{array}\right).$$

In a nutshell,

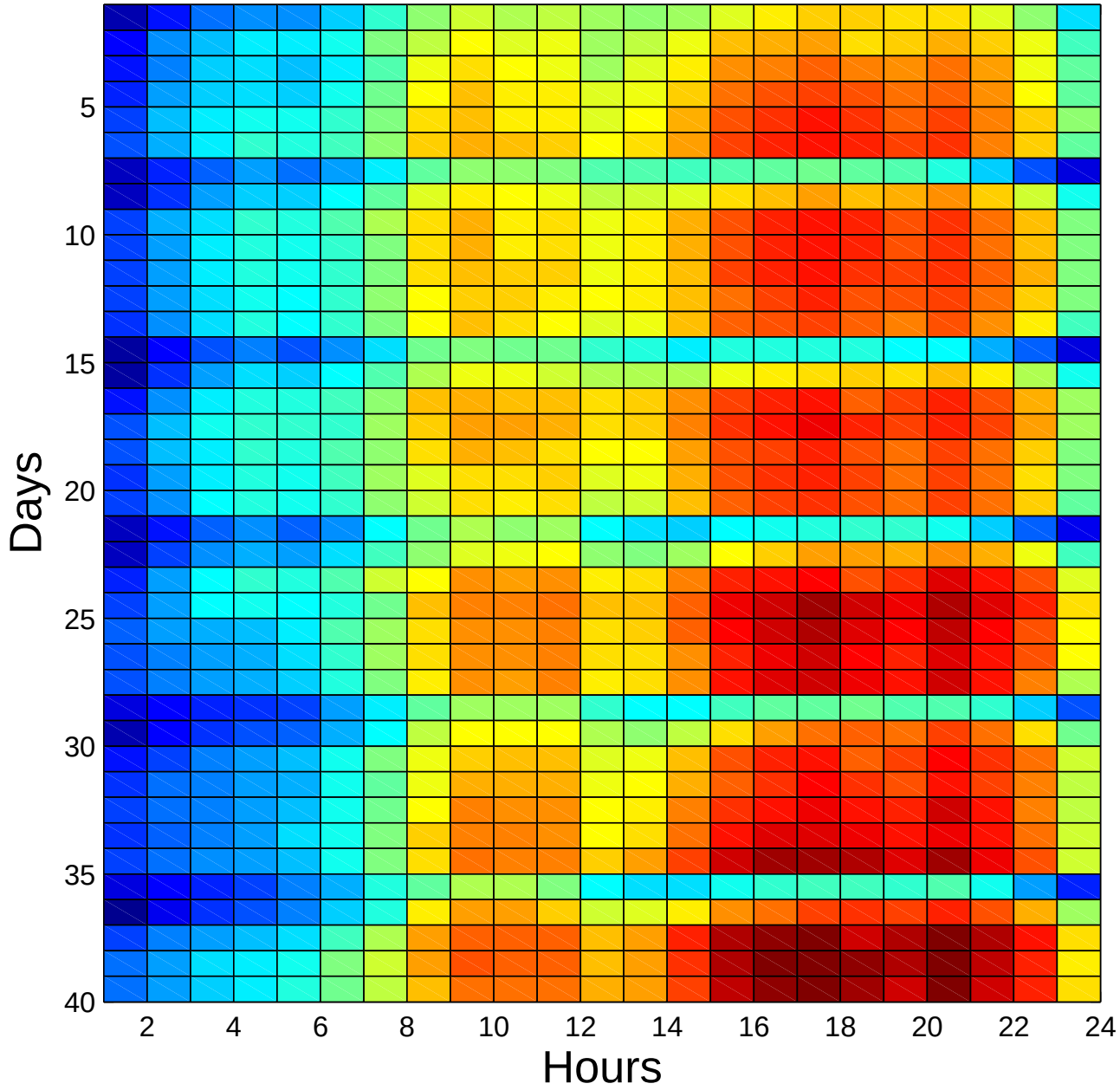
$$X^* = \left[\begin{array}{c|c} \underset{1\times 1}{s_T} & \underset{1\times n}{\mathbf{x}_{m+1}} \\ \hline \underset{m\times 1}{\mathbf{y}} & \underset{m\times n}{X} \end{array}\right].$$

In terms of linear regression:

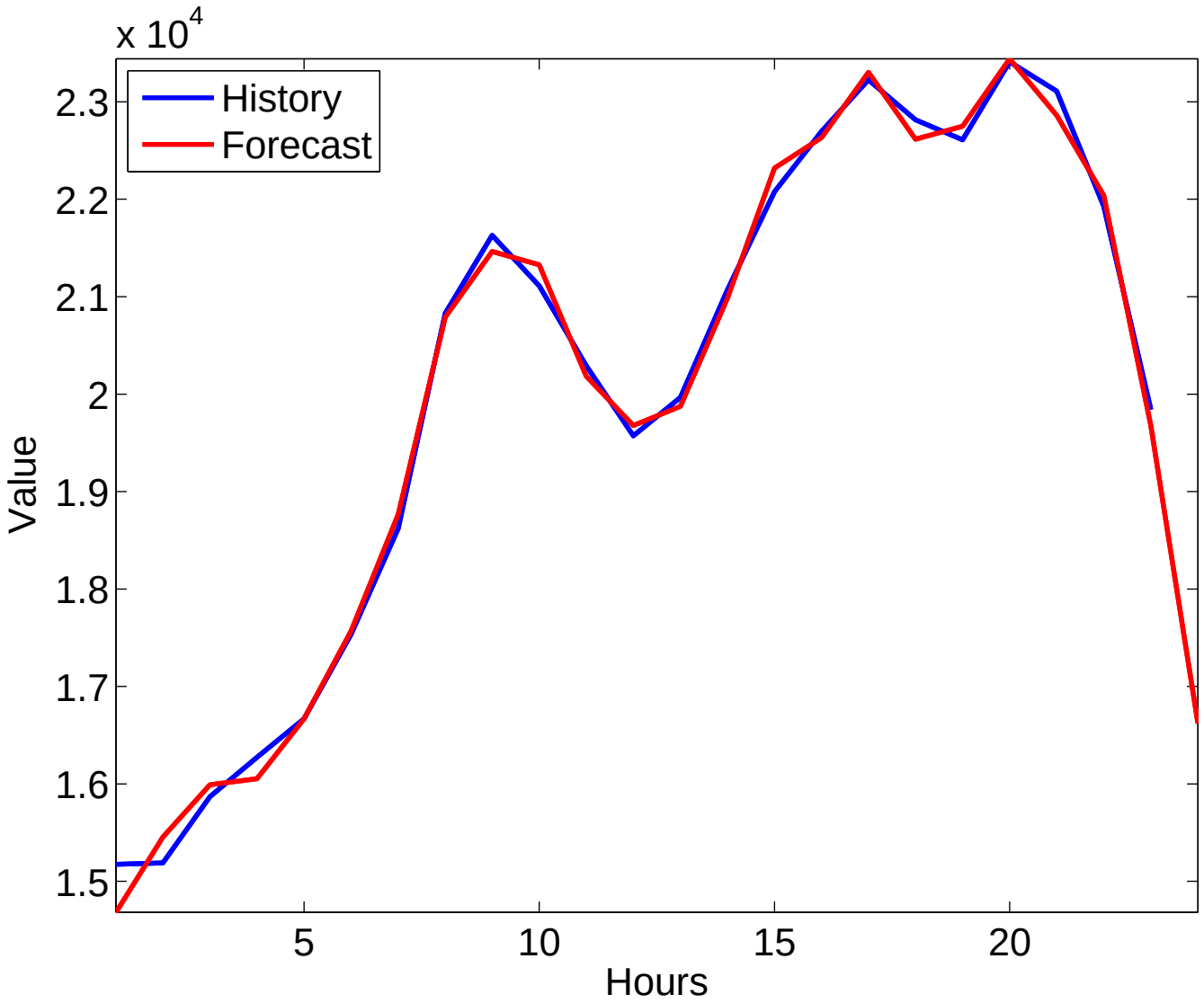
$$\mathbf{y} = X\mathbf{w},$$

$$y_{m+1} = s_T = \mathbf{w}^{\mathsf{T}}\mathbf{x}_{m+1}^{\mathsf{T}}.$$

The autoregressive matrix, five week-ends



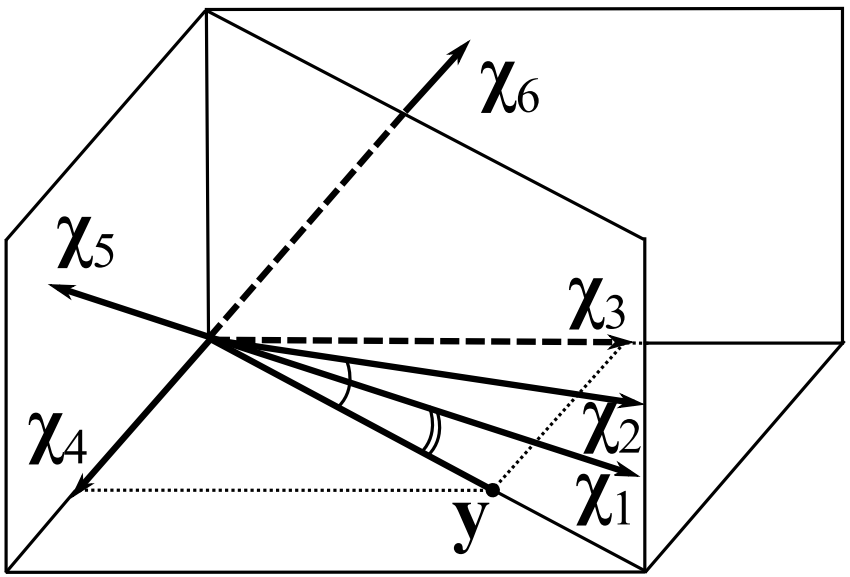
The one-day forecast, an example



Select an accurate and stable set of features

Features $\chi_1, \ldots, \chi_6$ are columns of the design matrix $\underset{3\times 6}{\mathbf{X}}$.

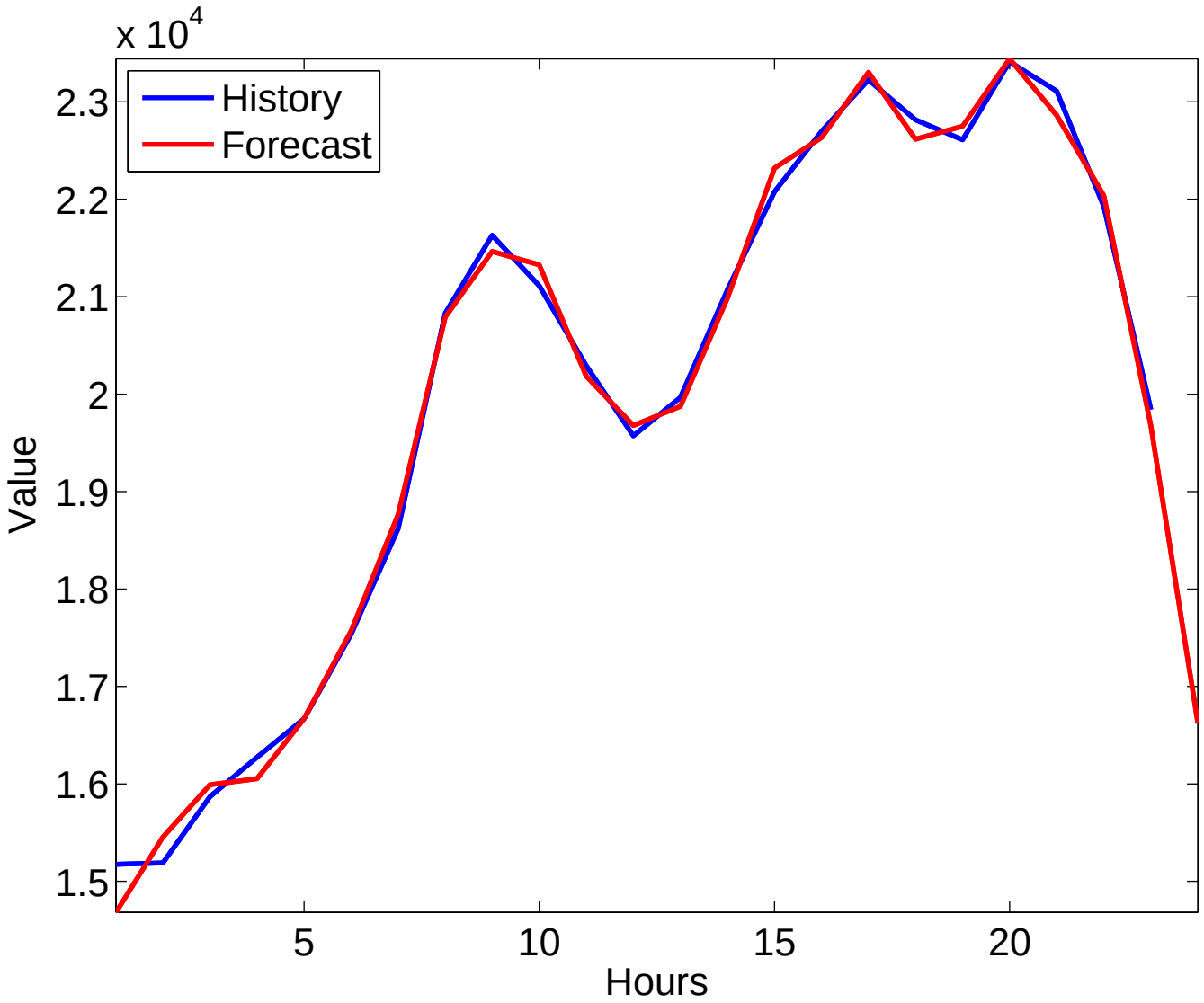
The sample contains multicollinear χ_1, χ_2 and noisy χ_5, χ_6 features, columns of the design matrix $\mathbf{X}$. One has to select two features from six.



Solution: χ_3, χ_4 are orthogonal; their linear combination fits $\mathbf{y}$.

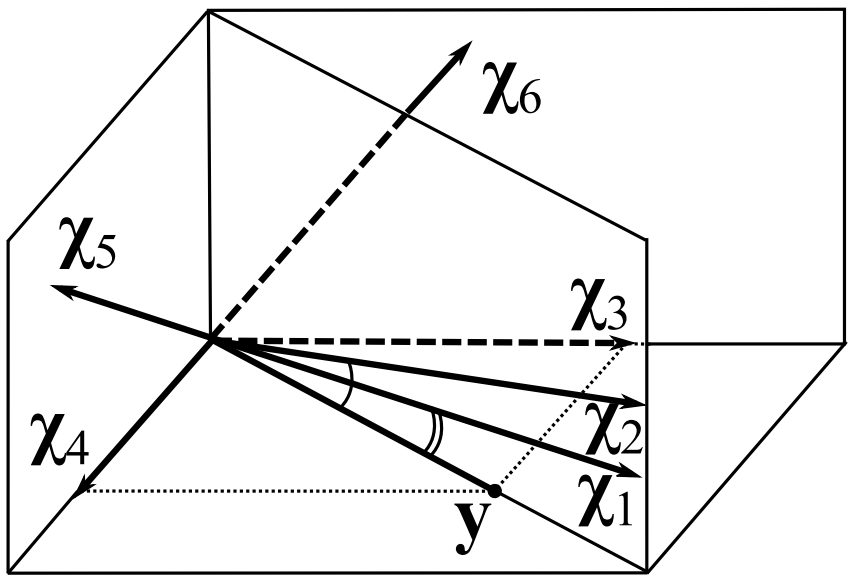
Katrutsa, Strijov. 2015. Stress-test procedure for feature selection // Chemometrics

The one-day forecast, an example



Выбор устойчивой и точной модели

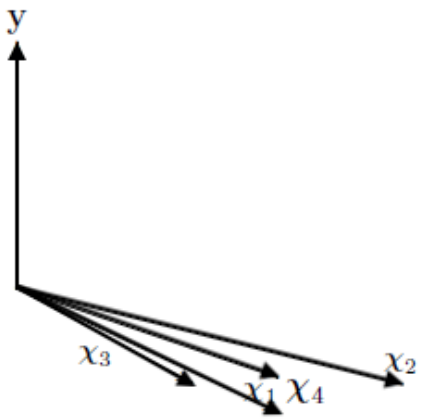
Выборка содержит мультикоррелирующие χ_1, χ_2 и устойчивые χ_5, χ_6 признаки — столбцы матрицы «объект-признак» $\mathbf{X}$. Требуется выбрать два признака из шести.



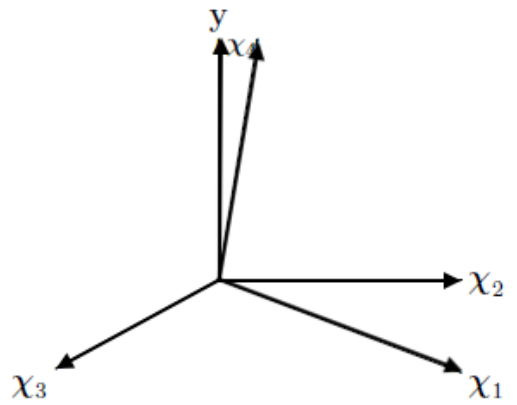
Точность и устойчивость при заданной сложности

Решение: χ_3, χ_4 — набор ортогональных признаков с наименьшим значением функции ошибки.

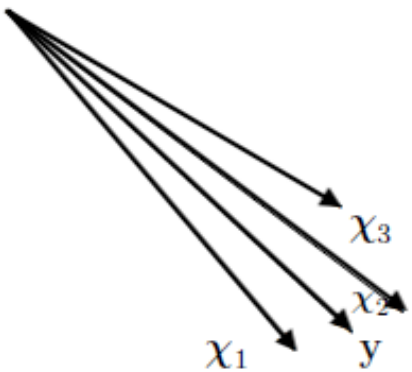
Configurations of design space



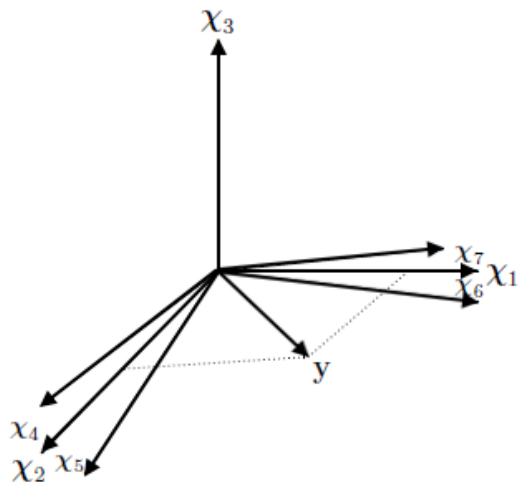
Non-adequate correlated



Adequate random



Adequate redundant



Adequate correlated

Katrutsa, Strijov. 2017. Comprehensive study of feature selection methods to solve multicollinearity problem // Expert Systems with Applications

Некторые 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

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

Функция ошибки, определенная посредством логарифмической функции правдоподобия

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

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:

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

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 $\mathbf{x} = [x_1, \ldots, x_j, \ldots, x_n]$ проиндексировано $j \in \mathcal{J} = \{1, \ldots, n\}$.
- Задано множество моделей-претендентов $\mathfrak{F} = \{f(\mathbf{w}, \mathbf{x})\}$.
- Модель — параметрическое семейство функций $f(\mathbf{w}, \mathbf{x}) = \mu(\mathbf{w}^\mathsf{T}\mathbf{x})$, где μ — функция связи (в случае регрессии $\mu = \mathrm{id}$, в случае классификации $\mu = \frac{1}{1+\exp(-\mathbf{w}^\mathsf{T}\mathbf{x})}$.
- 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 $\mathcal{L}$.