Машинное обучение

Лекция 4

Построение ансамблей, Random Forest и Gradient Boosting

Виктор Кантор

План

I. Обзор методов построения композиций
II. Ансамбли решающих деревьев

I. Обзор методов построения композиций

Bagging

Bagging = Bootstrap aggregation

Бутстреп

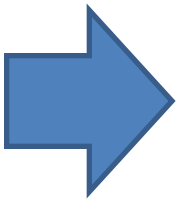
Выборка из некоторого распределения:

№	значение
1	
2	
3	
N	

Бутстреп

Выборка из некоторого распределения:

№	значение
1	
2	
3	
N	



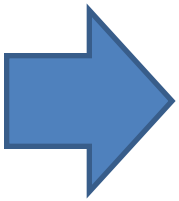
Хотим вычислить какую-то величину X по данным наблюдениями.

Было бы здорово вычислить X на многих выборках из распределения, а потом усреднить, но их у нас нет

Бутстреп

Выборка из некоторого распределения:

№	значение
1	
2	
3	
N	



Хотим вычислить какую-то величину X по данным наблюдениями.

Было бы здорово вычислить X на многих выборках из распределения, а потом усреднить, но их у нас нет

Решение:

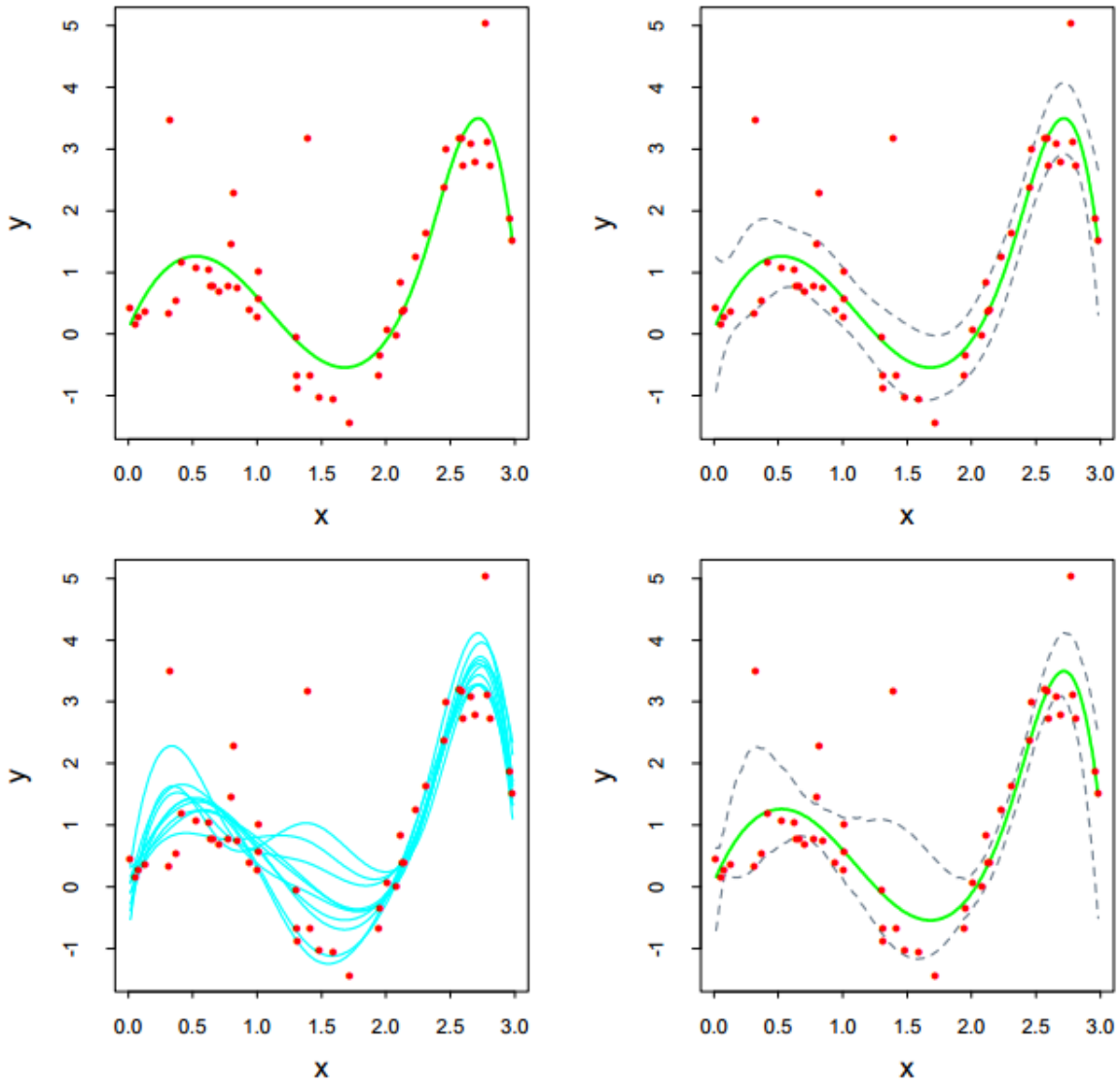
1. Выбираем наугад одно наблюдение из имеющихся.
2. Повторяем пункт 1 столько раз, сколько у нас есть наблюдений. При этом некоторые из них мы можем выбрать повторно
3. Считаем интересующие нас величины по новой выборке. Запоминаем результат.
4. Повторяем пункты 1-3 много раз и усредняем

Bagging

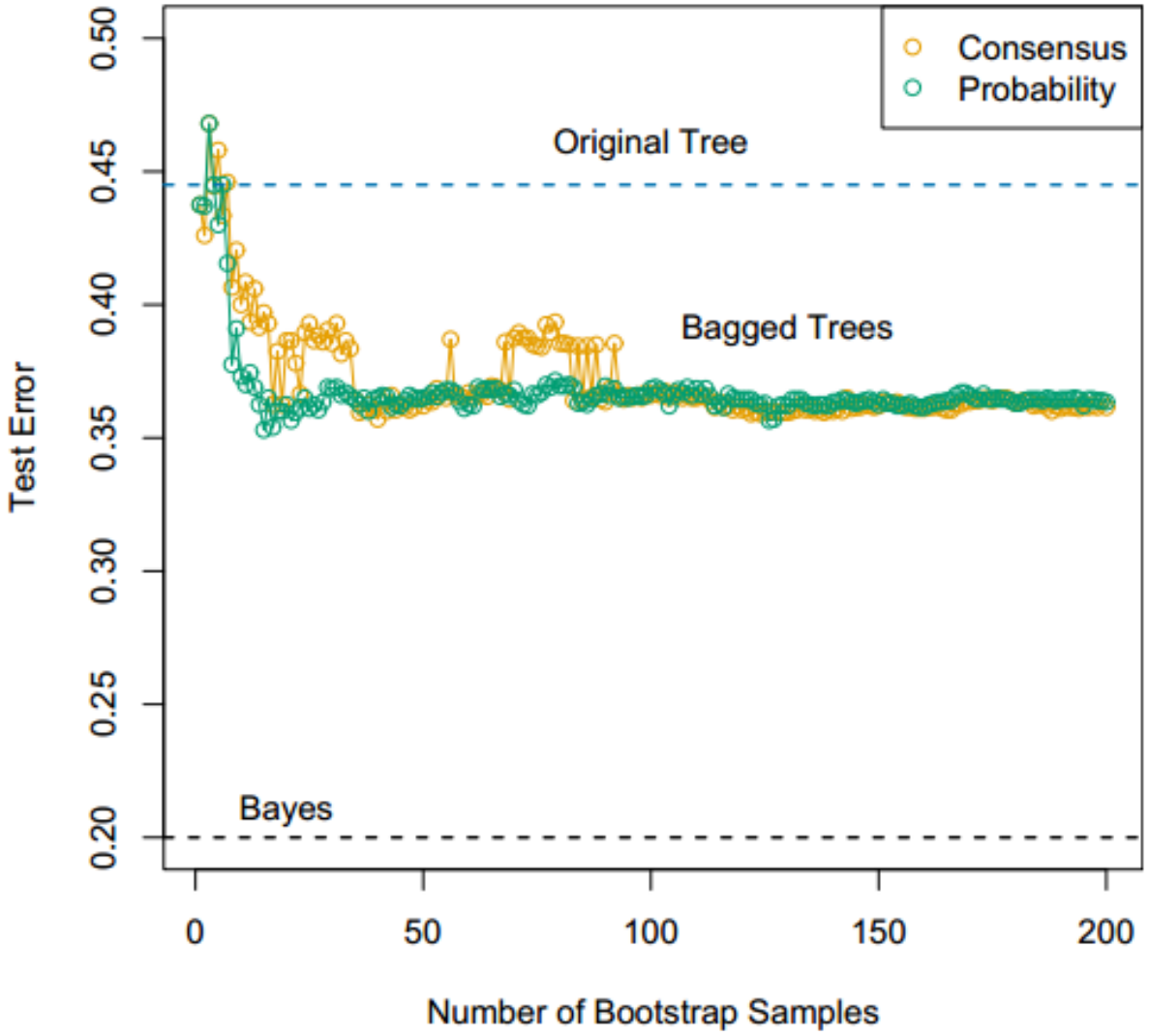
Bagging = Bootstrap aggregation

По схеме выбора с возвращением, генерируем M обучающих выборок такого же размера, обучаем на них модели и усредняем

Bagging



Бэггинг в классификации



Вариации: Pasting, RSM

- RSM – Random Subspace Method, выбираем не объекты, а признаки
- Pasting – выбираем объекты без возвращения

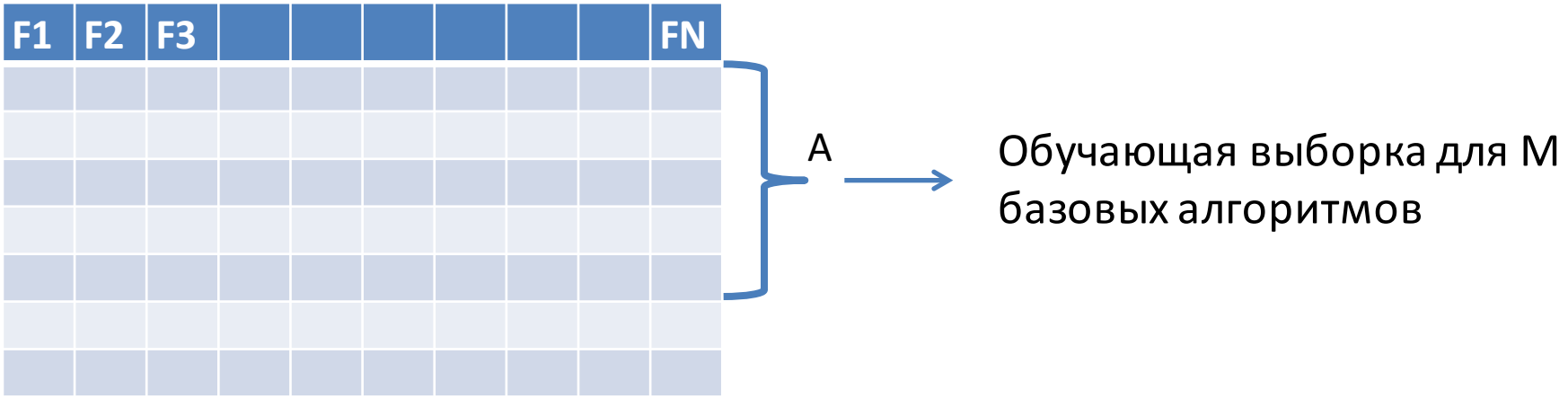
Stacking

Обучающая выборка:

F1	F2	F3							FN

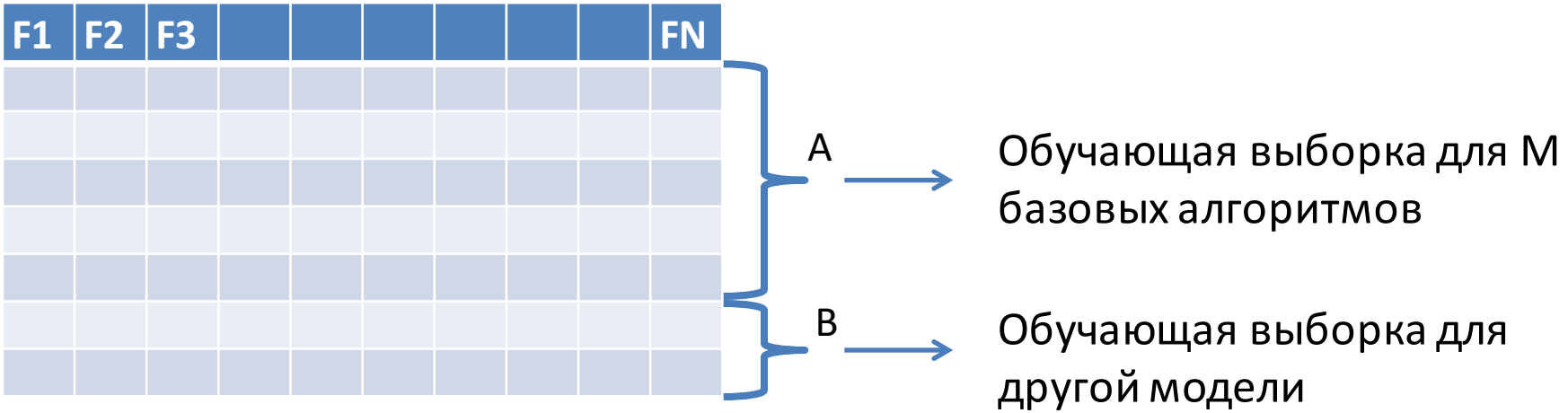
Stacking

Обучающая выборка:



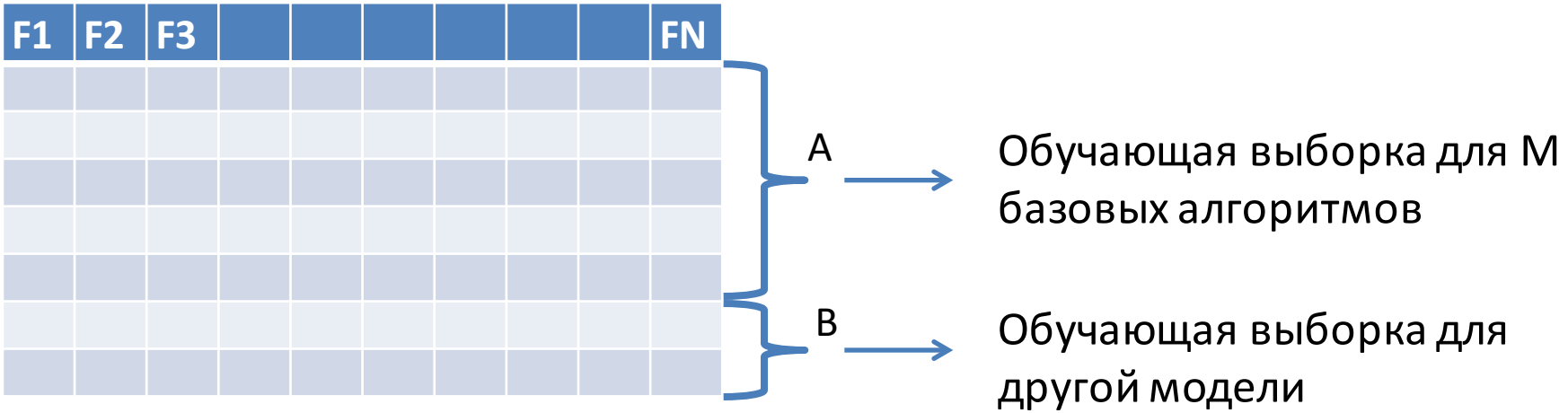
Stacking

Обучающая выборка:



Stacking

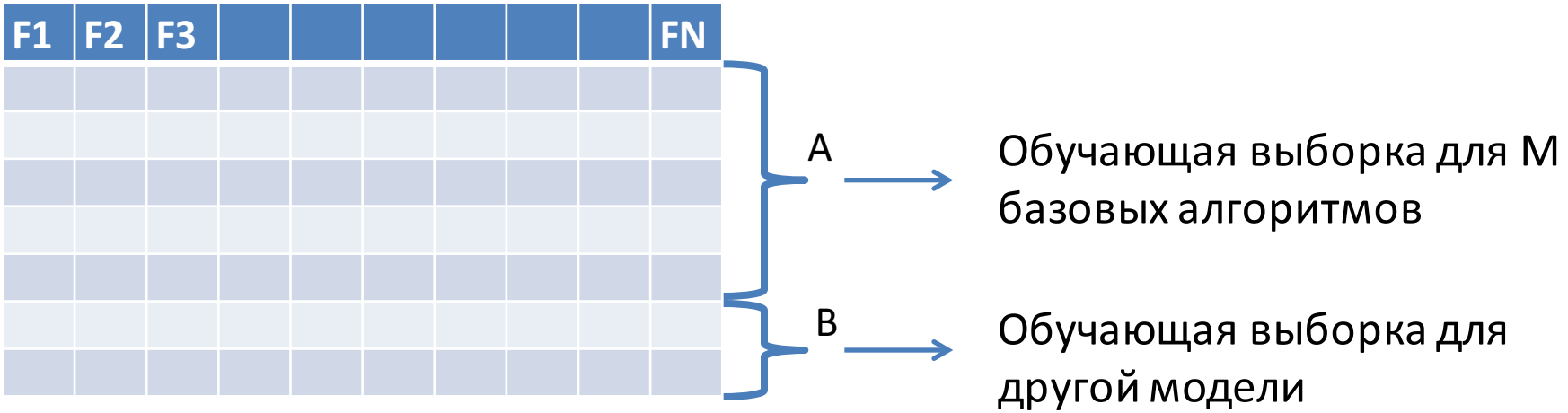
Обучающая выборка:



Обучаем M базовых алгоритмов на выборке A

Stacking

Обучающая выборка:

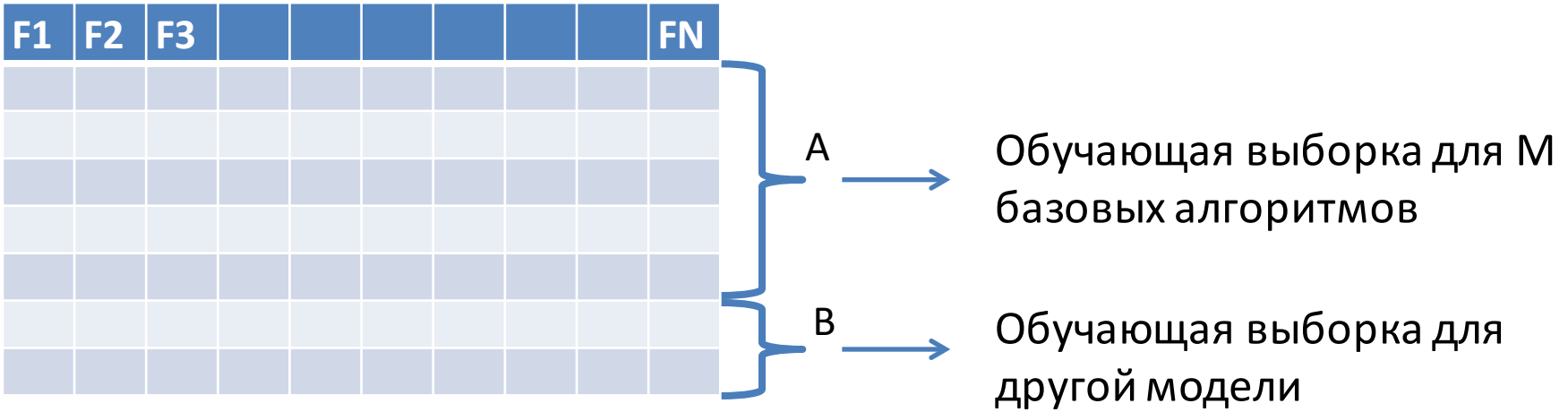


Обучаем M базовых алгоритмов на выборке A

Считаем их прогнозы на выборке B

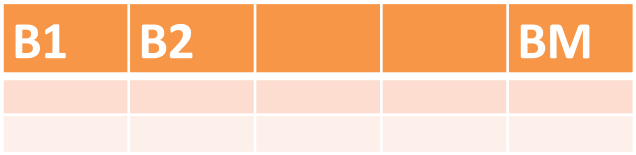
Stacking

Обучающая выборка:



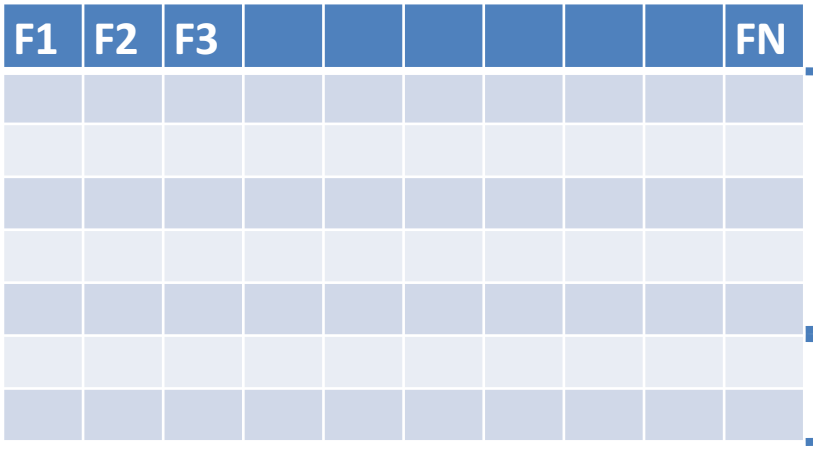
Обучаем M базовых алгоритмов на выборке A

Считаем их прогнозы на выборке B



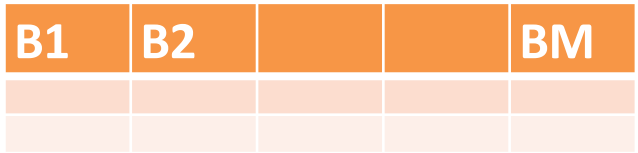
Stacking

Обучающая выборка:



A → Обучающая выборка для M базовых алгоритмов

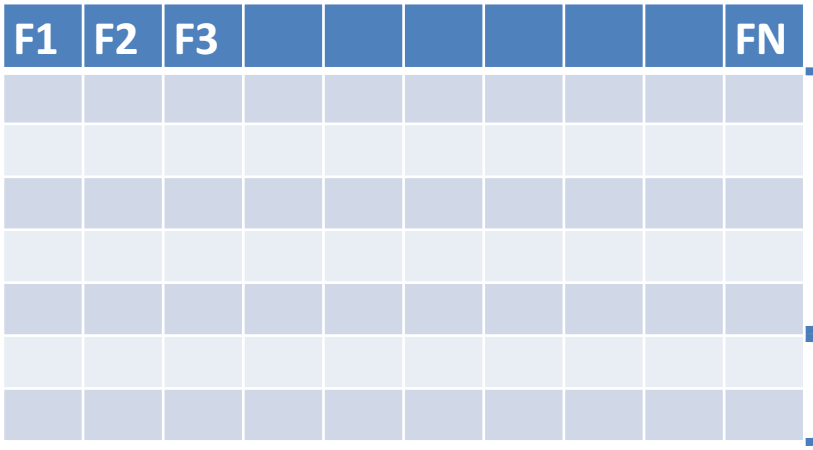
B → Обучающая выборка для другой модели

Обучаем M базовых алгоритмов на выборке A → Считаем их прогнозы на выборке B → 

→ Обучаем другую модель (например, линейную регрессию с $w_0 = 0$)

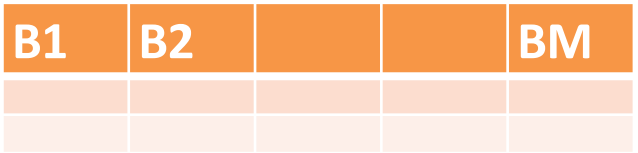
Stacking

Обучающая выборка:



A → Обучающая выборка для M базовых алгоритмов

B → Обучающая выборка для другой модели

Обучаем M базовых алгоритмов на выборке A → Считаем их прогнозы на выборке B → 

→ Обучаем другую модель (например, линейную регрессию с $w_0 = 0$)

→ $a(x) = \sum_{t=1}^{T} \alpha_t b_t(x)$

Blending

Смесь нескольких сильных классификаторов:

$$a(x) = \sum_{t=1}^{T} \alpha_t b_t(x)$$

+ веса неотрицательны и дают в сумме единицу

Blending

Смесь нескольких сильных классификаторов:

$$a(x) = \sum_{t=1}^{T} \alpha_t b_t(x)$$

+ веса неотрицательны и дают в сумме единицу

Преимущества и недостатки:

- Очень прост идейно, хорошо работает, логичен

Blending

Смесь нескольких сильных классификаторов:

$$a(x) = \sum_{t=1}^{T} \alpha_t b_t(x)$$

+ веса неотрицательны и дают в сумме единицу

Преимущества и недостатки:

- Очень прост идейно, хорошо работает, логичен
- Иногда надо перебирать веса или использовать дискретную оптимизацию

Blending

Смесь нескольких сильных классификаторов:

$$a(x) = \sum_{t=1}^{T} \alpha_t b_t(x)$$

+ веса неотрицательны и дают в сумме единицу

Преимущества и недостатки:

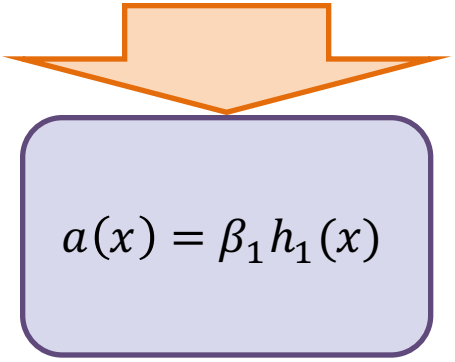
- Очень прост идейно, хорошо работает, логичен
- Иногда надо перебирать веса или использовать дискретную оптимизацию
- Не всегда композиция в виде взвешенной суммы – то, что надо. Иногда нужна более сложная композиция

Boosting

Бустинг – жадное построение взвешенной суммы базовых алгоритмов $h_k(x)$

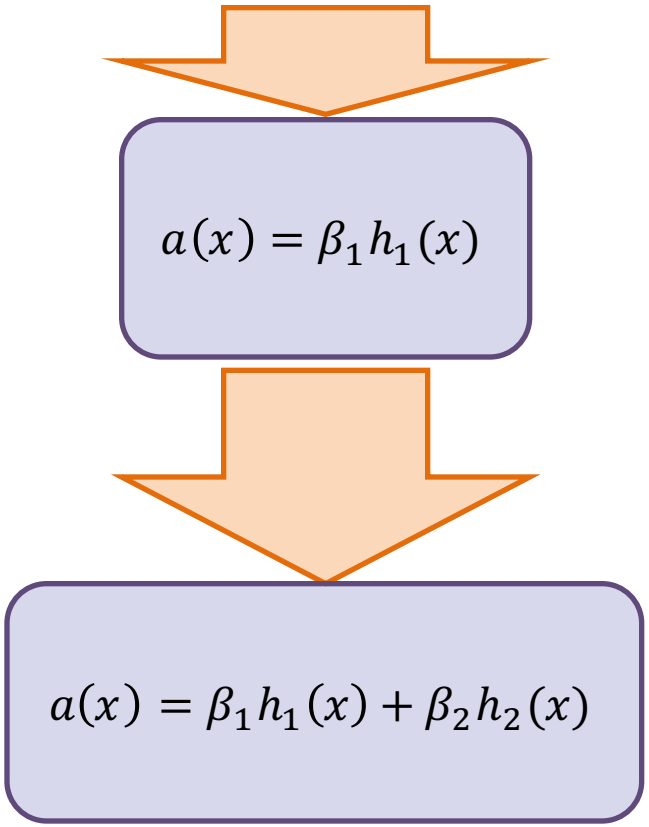
Boosting

Бустинг – жадное построение взвешенной суммы базовых алгоритмов $h_k(x)$



Boosting

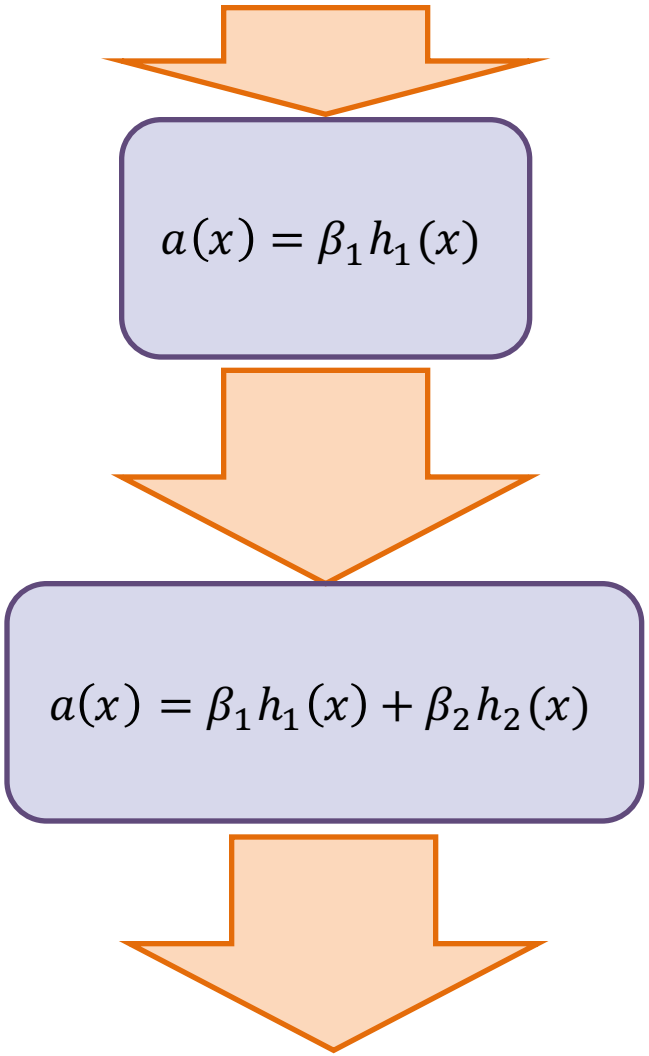
Бустинг – жадное построение взвешенной суммы базовых алгоритмов $h_k(x)$



Boosting

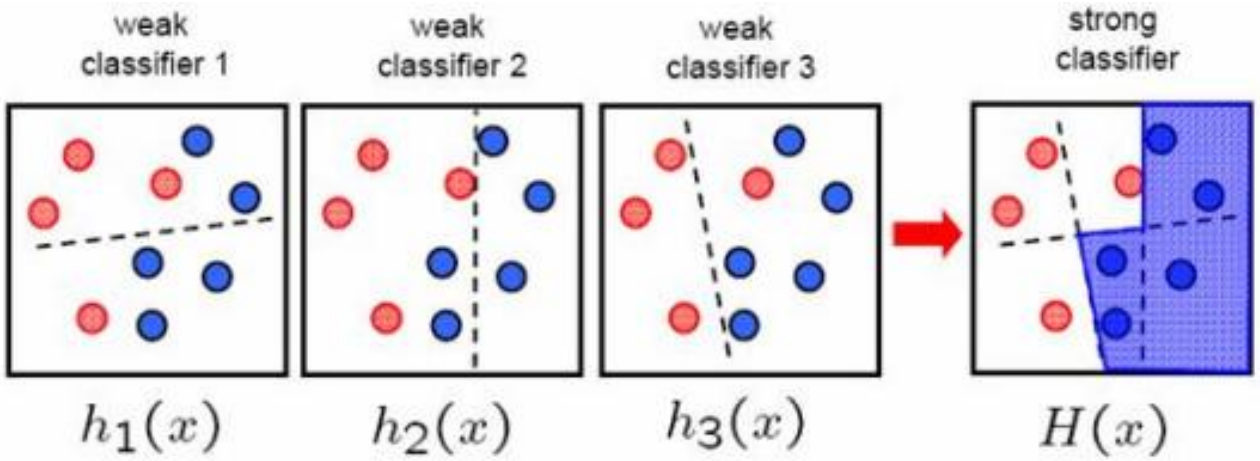
Бустинг – жадное построение взвешенной суммы базовых алгоритмов $h_k(x)$

$$a(x) = \sum_{t=1}^{T} \beta_t h_t(x)$$

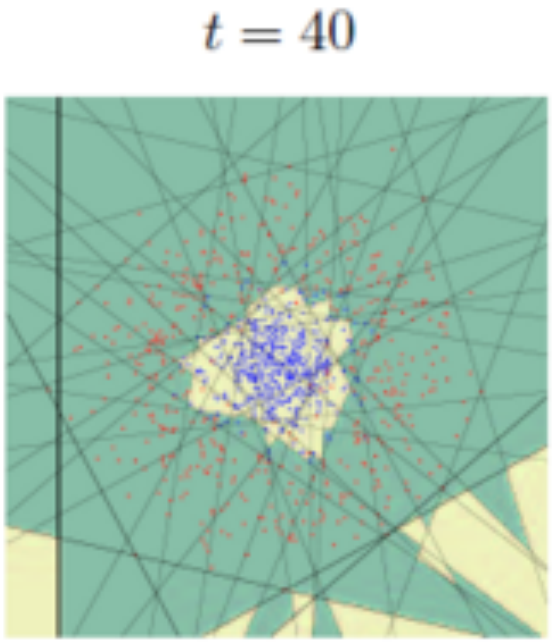


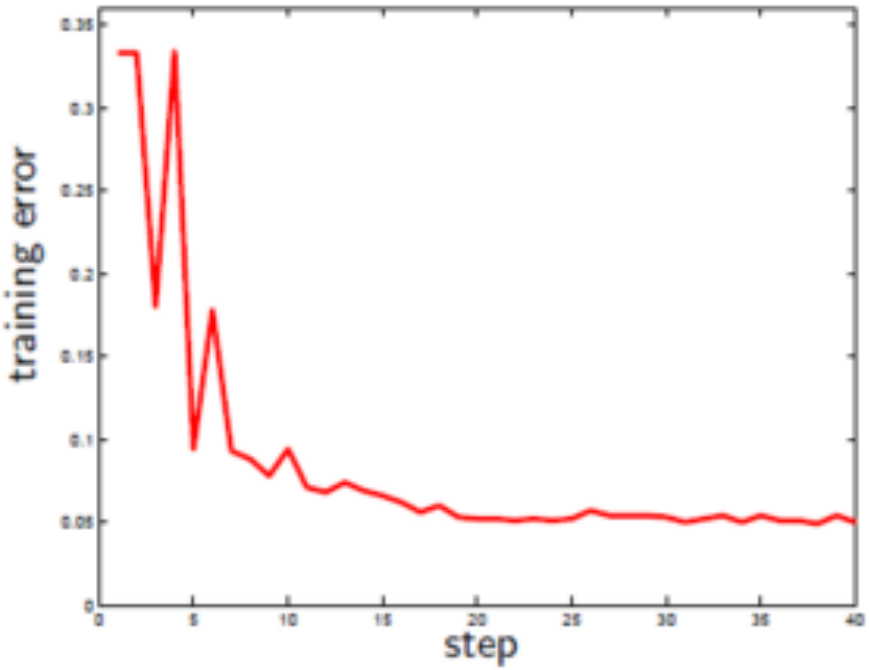
«Слабые» алгоритмы

$h_k(x)$ – как правило, решающие деревья небольшой глубины или линейные модели



Пример: бустинг над линейными классификаторами

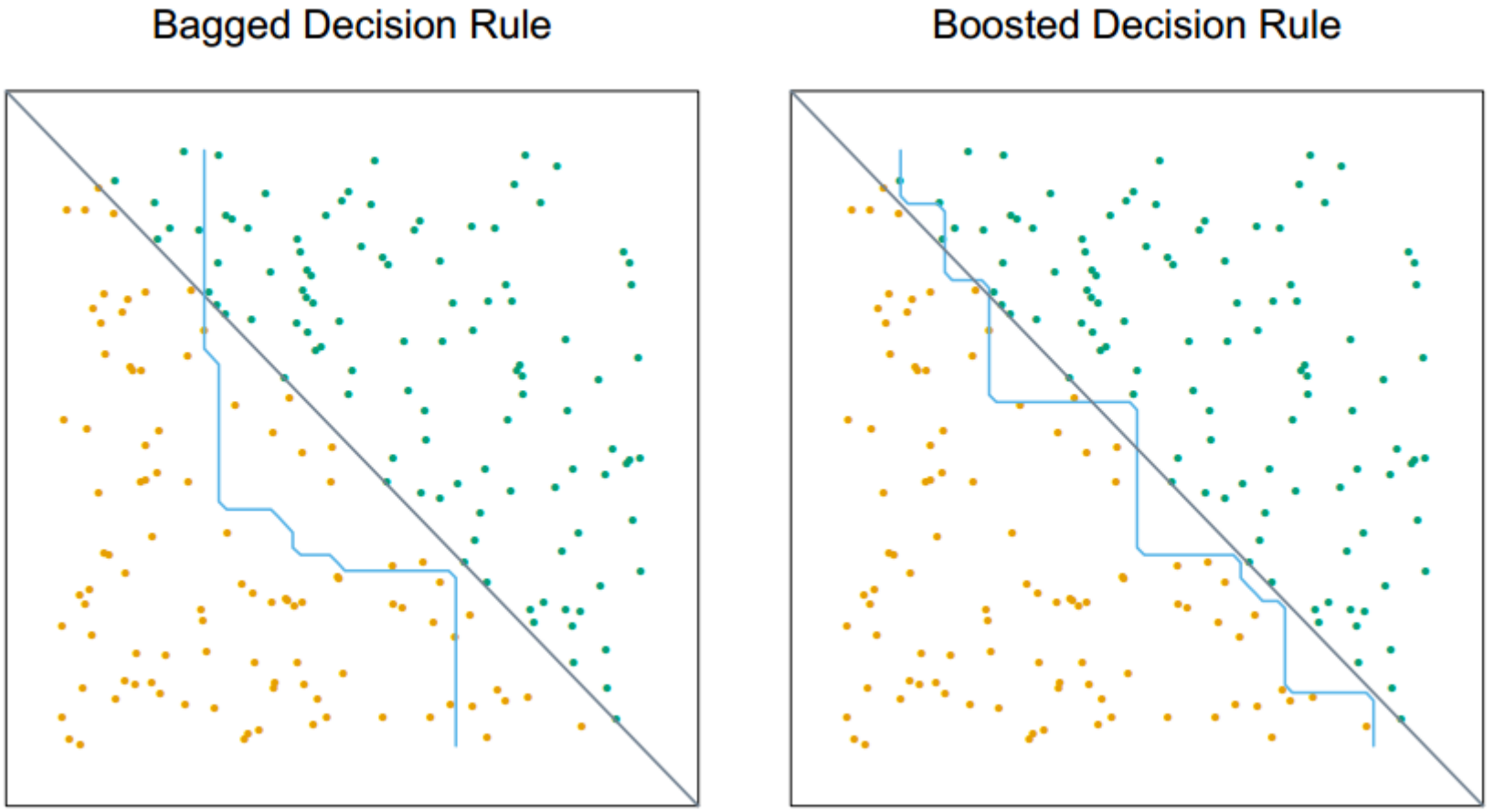




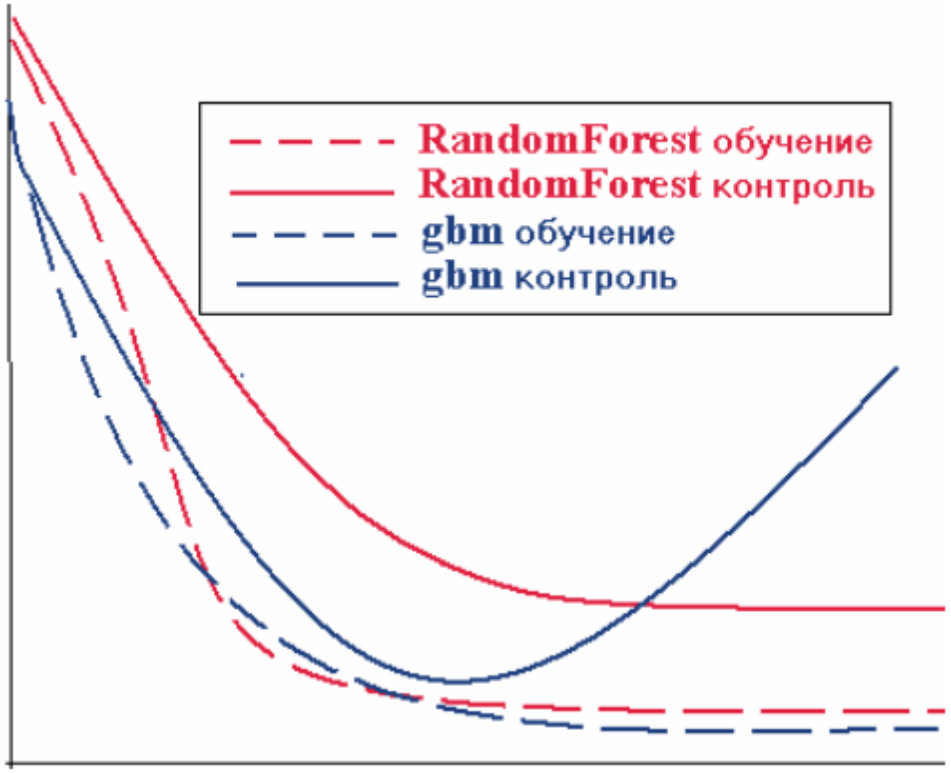
Алгоритмы бустинга

- Основные алгоритмы:
  - Градиентный бустинг
  - Адаптивный бустинг (AdaBoost)
- Вариации AdaBoost:
  - AnyBoost (произвольная функция потерь)
  - BrownBoost
  - GentleBoost
  - LogitBoost
  - ….

Бэггинг и бустинг



Бэггинг и бустинг: переобучение



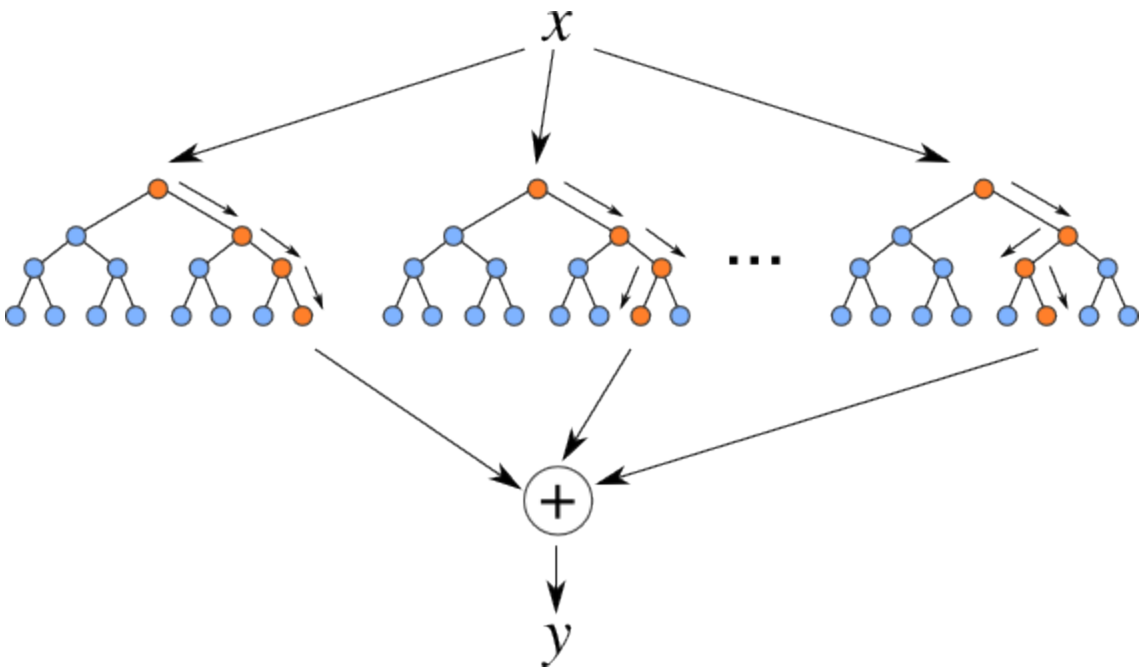
Преимущества и недостатки бустинга

- Позволяет очень точно приблизить восстанавливаемую функцию или разделяющую поверхность классов
- Плохо интерпретируем
- Композиции могут содержать десятки тысяч базовых моделей и долго обучаться
- Переобучение на выбросах при избыточном количестве классификаторов

II. Ансамбли решающих деревьев

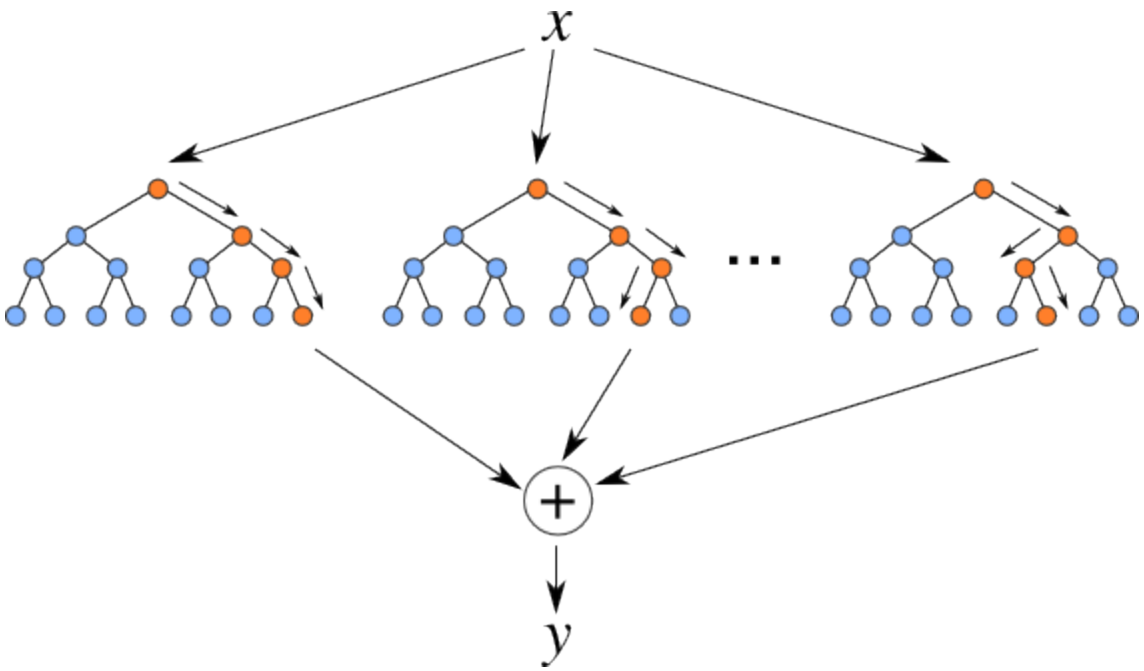
Леса решающих деревьев

Random Forest



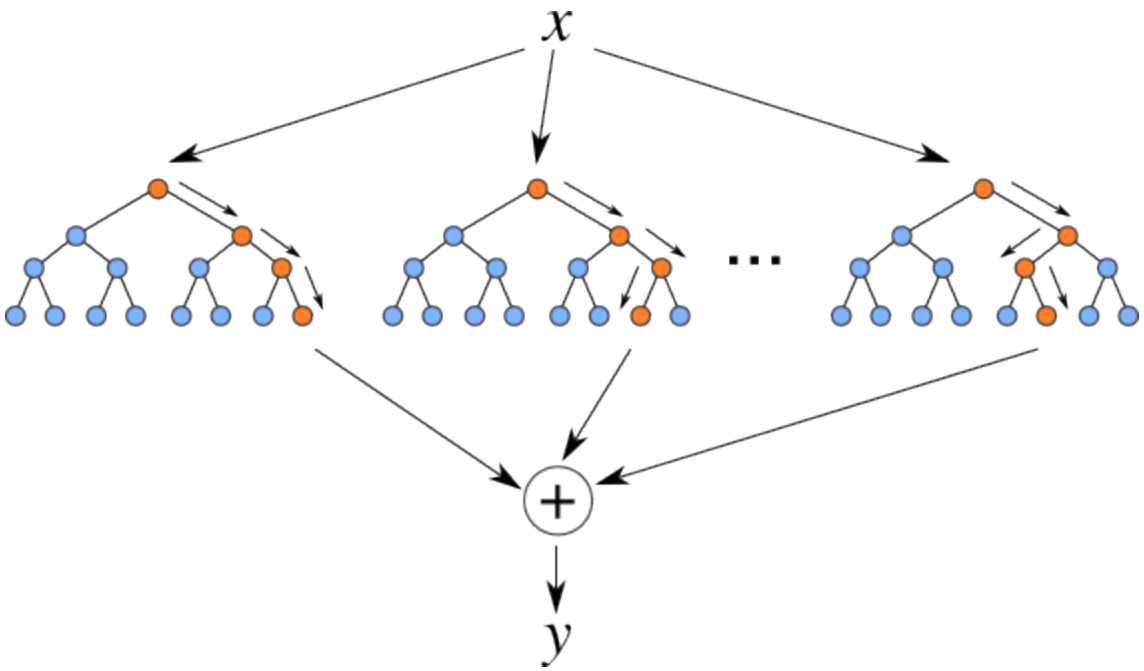
1. Бэггинг над деревьями
2. Рандомизированные разбиения в деревьях: выбираем k случайных признаков и ищем наиболее информативное разбиение по ним

Extreemly Randomized Trees



1. Бэггинг над «сильно рандомизированными» деревьями
2. При разбиении в дереве выбираем k случайных признаков и случайные пороги по ним, затем ищем наиболее информативное из этих разбиений

Extreemly Randomized Trees

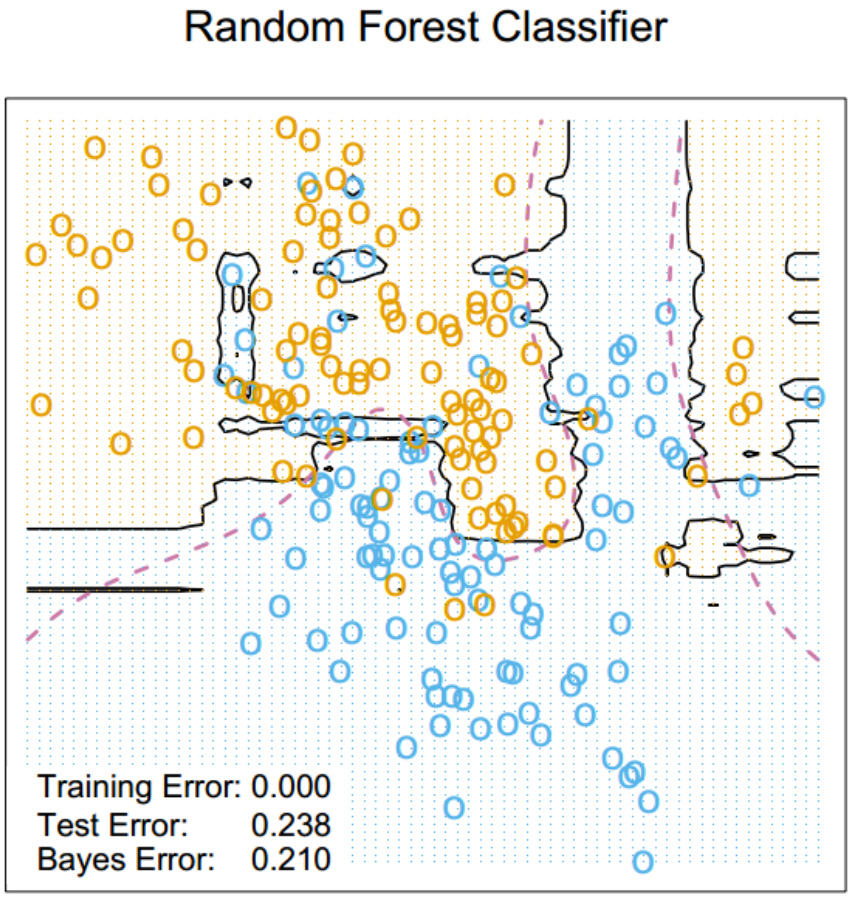


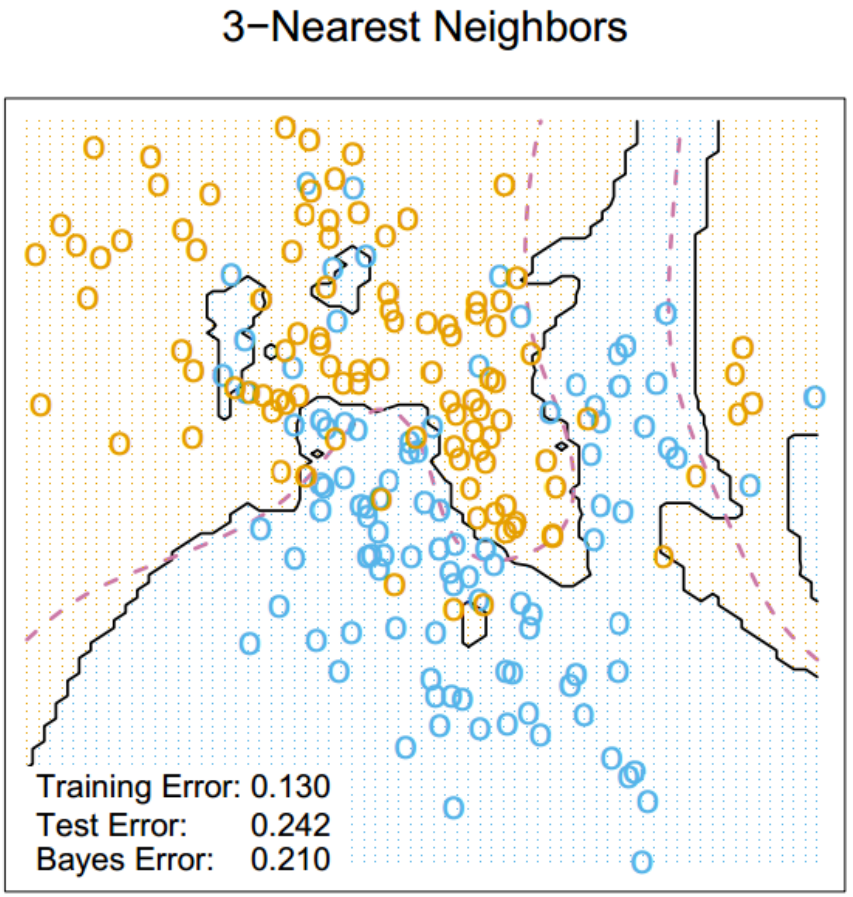
1. Бэггинг над «сильно рандомизированными» деревьями
2. При разбиении в дереве выбираем k случайных признаков и случайные пороги по ним, затем ищем наиболее информативное из этих разбиений

Нестандартные применения случайного леса

- Метрика и поиск похожих объектов
- Преобразование признаков

Может ли *** работать лучше RF

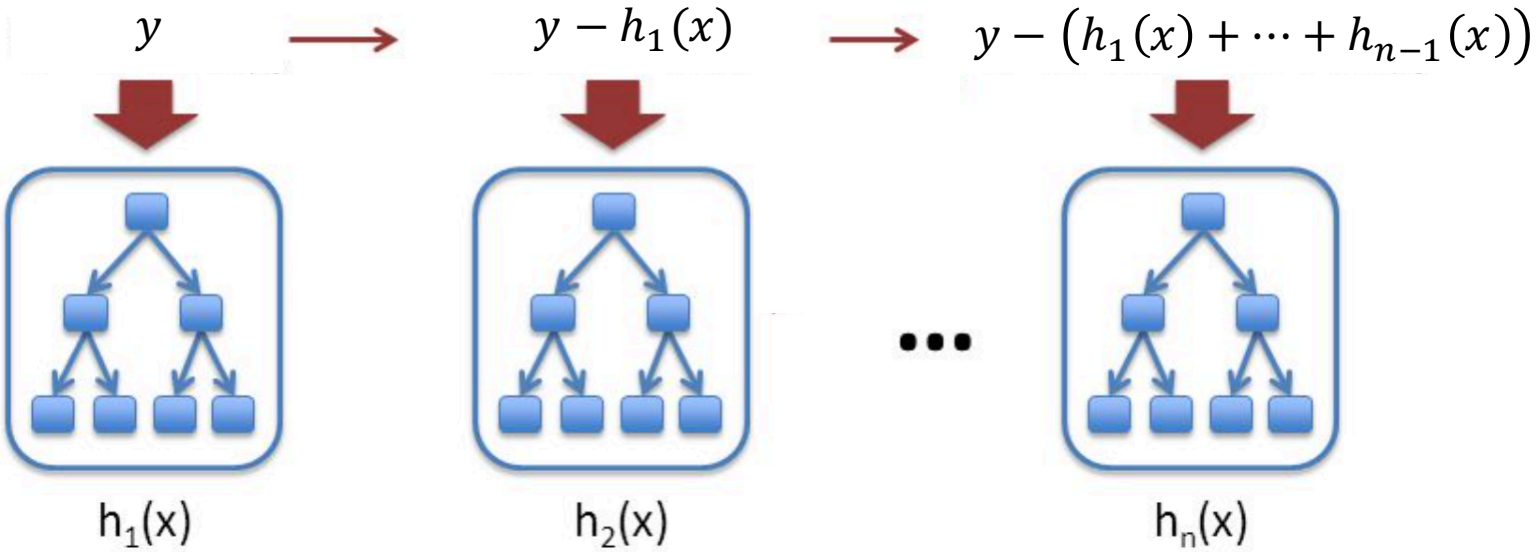




Градиентный бустинг над деревьями

Идея Gradient Boosted Decision Trees (с прошлой лекции)

$$a_n(x) = h_1(x) + \cdots + h_n(x)$$



Аналогия с численной оптимизацией

Нам нужно минимизировать ошибку:

$$Q(\hat{y}, y) = \sum_{i=1}^{l} (\hat{y}_i - y_i)^2 \to min \qquad \hat{y}_i = a(x_i)$$

Аналогия с численной оптимизацией

Нам нужно минимизировать ошибку:

$$Q(\hat{y}, y) = \sum_{i=1}^{l} (\hat{y}_i - y_i)^2 \to min \qquad \hat{y}_i = a(x_i)$$

Если бы мы подбирали ответы $\hat{y}$ итеративно, можно было бы это делать градиентным спуском

Аналогия с численной оптимизацией

Нам нужно минимизировать ошибку:

$$Q(\hat{y}, y) = \sum_{i=1}^{l} (\hat{y}_i - y_i)^2 \to min \qquad \hat{y}_i = a(x_i)$$

Если бы мы подбирали ответы $\hat{y}$ итеративно, можно было бы это делать градиентным спуском

Но нам нужно подобрать не ответы, а функцию $a(x)$

Градиентный бустинг и градиент

В бустинге $$a(x) = \sum_{t=1}^{T} \beta_t h_t(x)$$

Идея: будем каждый следующий алгоритм выбирать так, чтобы он приближал антиградиент ошибки

$$h_t(x) \approx -\frac{\partial Q(\hat{y}, y)}{\partial \hat{y}}$$

Градиентный бустинг и градиент

Если $h_t(x) \approx -\frac{\partial Q(\hat{y}, y)}{\partial \hat{y}}$ и $Q(\hat{y}, y) = \sum_{i=1}^{l} (\hat{y}_i - y_i)^2$

$$h_t(x_i) \approx -\frac{\partial Q(\hat{y}_i, y_i)}{\partial \hat{y}_i} = -2(\hat{y}_i - y_i) \propto y_i - \hat{y}_i$$

GBM с квадратичными потерями

1. Обучаем первый базовый алгоритм h_1, $\beta_1 = 1$
2. Повторяем в цикле по t от 2 до T:

   обучаем h_t на ответы $y_i - a_{t-1}(x_i)$

   выбираем β_t

GBM с квадратичными потерями

1. Обучаем первый базовый алгоритм h_1, $\beta_1 = 1$
2. Повторяем в цикле по t от 2 до T:

   обучаем h_t на ответы $y_i - a_{t-1}(x_i)$

   выбираем β_t

Стратегии выбора β_t:

- всегда равен небольшой константе
- как в методе наискорейшего спуска
- уменьшая с ростом t

GBM с произвольными потерями

1. Обучаем первый базовый алгоритм $h_1,\ \beta_1 = 1$
2. Повторяем в цикле по t от 2 до T:

обучаем h_t на $-\frac{\partial Q(\hat{y}_i, y_i)}{\partial \hat{y}_i} = -\frac{\partial L(\hat{y}_i, y_i)}{\partial \hat{y}_i}$

выбираем β_t

Здесь $Q(\hat{y}, y) = \sum_{i=1}^{l} L(\hat{y}_i, y_i)$ $\qquad \hat{y}_i = a_{t-1}(x_i)$

GBM в наиболее общем виде

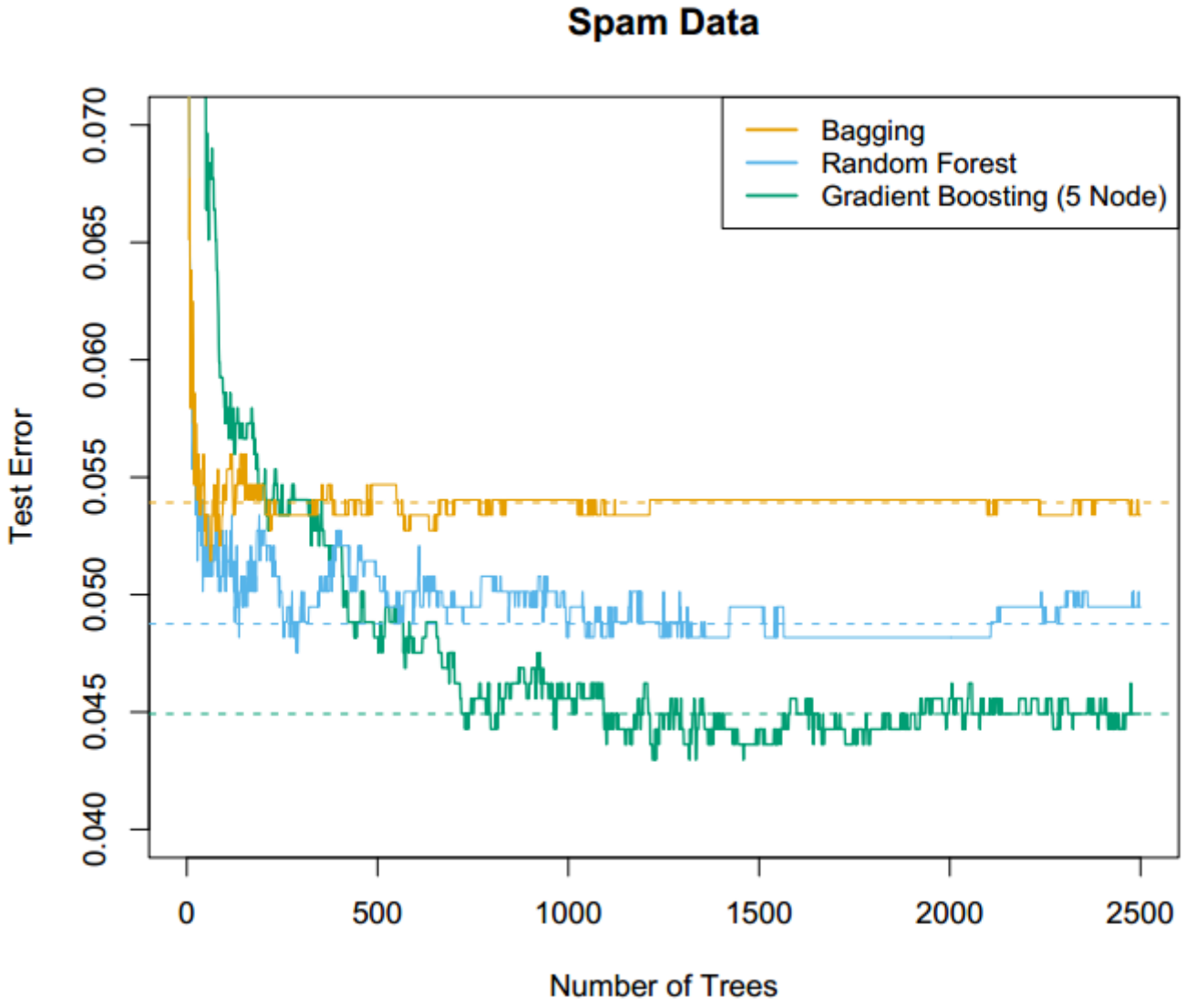
1. Обучаем первый базовый алгоритм $h_1,\ \beta_1 = 1$
2. Повторяем в цикле по t от 2 до T:

$$h_t = \underset{h}{\operatorname{argmin}} \sum_{i=1}^{l} \tilde{L}\left(h(x_i), -\frac{\partial L(\hat{y}_i, y_i)}{\partial \hat{y}_i}\right)$$

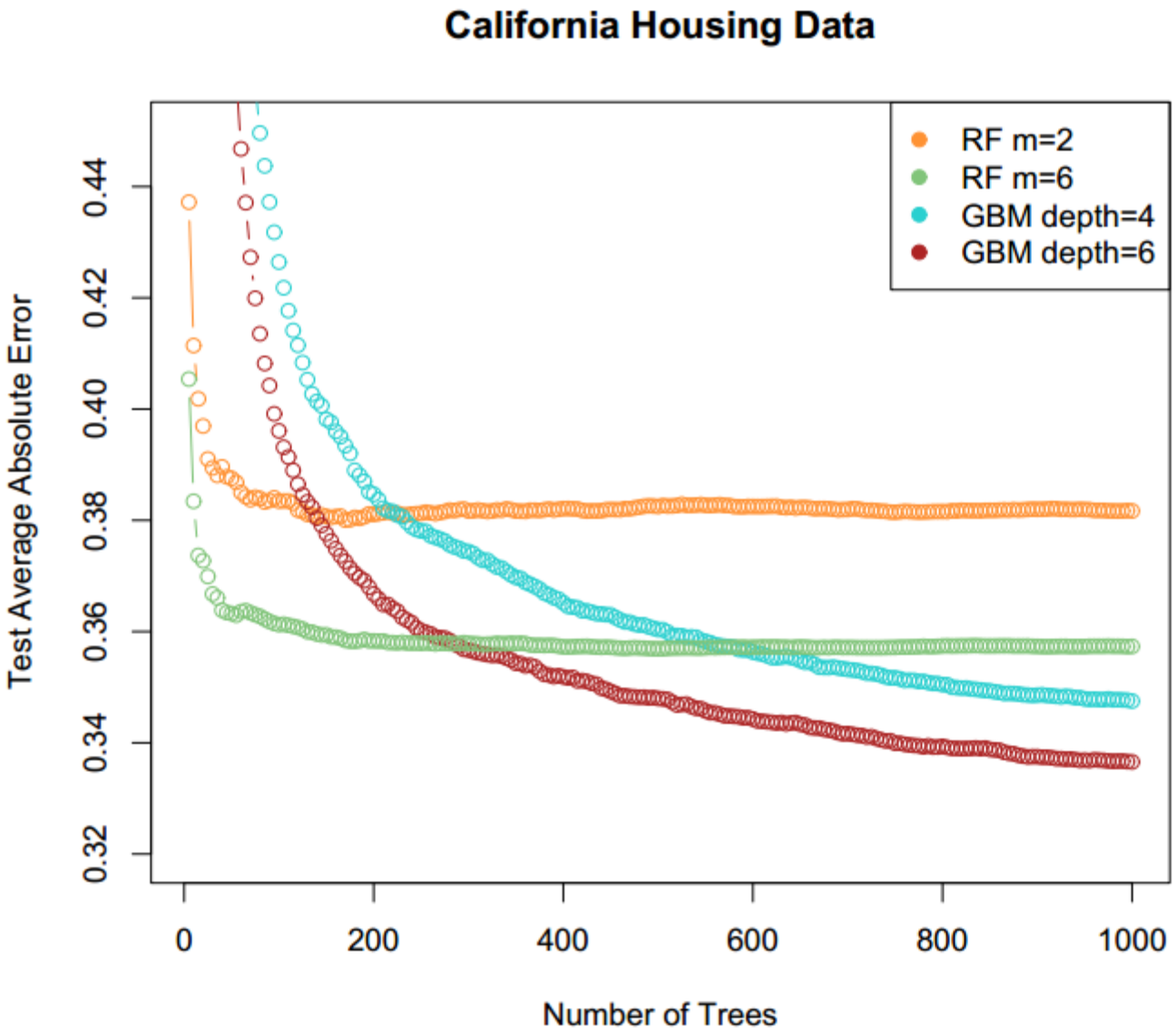
выбираем β_t

Здесь $Q(\hat{y}, y) = \sum_{i=1}^{l} L(\hat{y}_i, y_i)$ $\qquad\qquad$ $\hat{y}_i = a_{t-1}(x_i)$

Bagging, Random Forest, GBDT



GTBM и RF


California Housing Data
RF m=2
RF m=6
GBM depth=4
GBM depth=6
Test Average Absolute Error
0.32
0.34
0.36
0.38
0.40
0.42
0.44
0
200
400
600
800
1000
Number of Trees

Распараллеливание

Вопрос для обсуждения:

Какой из ансамблей деревьев больше подходит для распараллеливания? Как это делать в одном и в другом случае?

Резюме

I. Обзор методов построения композиций
   - Bagging
   - Stacking
   - Blending
   - Boosting

II. Ансамбли решающих деревьев
   - Random Forest
   - Gradient Boosted Decision Trees