Тверской
государственный
технический
университет

Интеллектуальные информационные системы

Ансамблевые методы

2025 г.

Идея ансамблирования – как из множества по отдельности плохих алгоритмов построить один хороший?

Bias-Variance decomposition

Рассмотрим на примере: *функционал оценки качества работы алгоритма a при использовании квадратичной функции потерь:*

$$\boldsymbol{Q}(\boldsymbol{a}) = \mathbb{E}_{\boldsymbol{x}}\mathbb{E}_{\boldsymbol{X},\boldsymbol{\epsilon}}[\boldsymbol{y}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{\epsilon}) - \boldsymbol{a}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{X})]^{2}$$

$\boldsymbol{X}$ – обучающая выборка

$\boldsymbol{x}$ – объект из тестовой выборки

$\boldsymbol{y} = \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}) + \boldsymbol{\epsilon}$ – целевая зависимость, измеренная с точностью до случайного шума $\boldsymbol{\epsilon}$

$\boldsymbol{a}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{X})$ – значение алгоритма на объекте x

$\mathbb{E}_{\boldsymbol{x}}$ - математическое ожидание по всем объектам тестовой выборки

$\mathbb{E}_{\boldsymbol{X},\boldsymbol{\epsilon}}$ - математическое ожидание по всем обучающим выборка X и случайному шуму $\boldsymbol{\epsilon}$

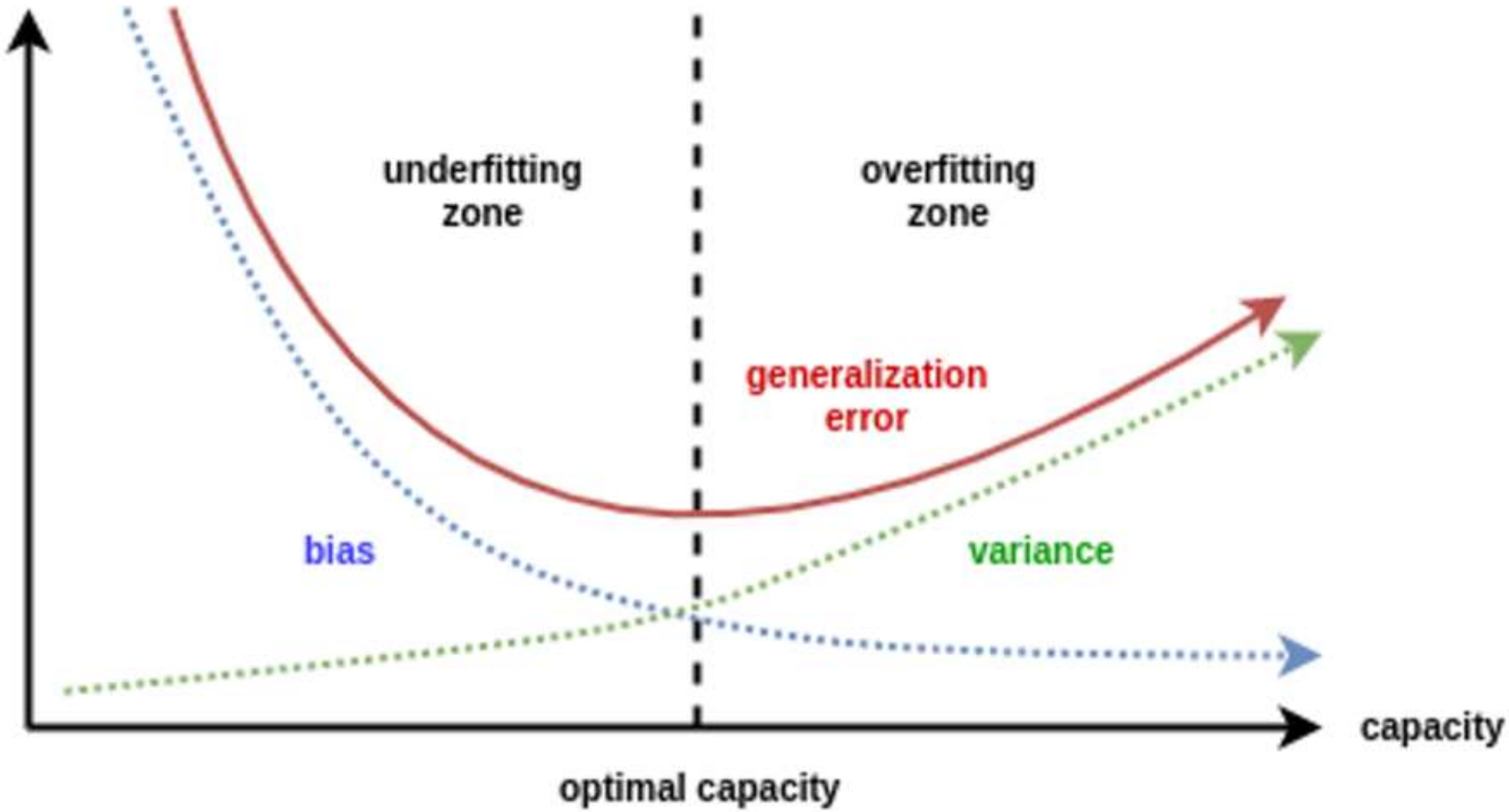
Представим этот же функционал в виде трех составляющих: шум, *смещение (bias)* и *разброс (variance)*

$$\boldsymbol{Q}(\boldsymbol{a}) = \mathbb{E}_{x}\boldsymbol{bias}_{\boldsymbol{X}}^{\boldsymbol{2}}\boldsymbol{a}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{X}) + \mathbb{E}_{\boldsymbol{X}}\mathbb{V}_{\boldsymbol{X}}[\boldsymbol{a}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{X})] + \boldsymbol{\sigma}^{\boldsymbol{2}}$$

$\boldsymbol{bias}_{\boldsymbol{X}}\boldsymbol{a}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{X}) = \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}) - \mathbb{E}_{\boldsymbol{X}}[\boldsymbol{a}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{X})]$ - *смещение* предсказания алгоритма на объекте x, усредненного по всем возможным обучающим выборкам, относительно истинной зависимости f

$\mathbb{V}_{\boldsymbol{X}}[\boldsymbol{a}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{X})] = \mathbb{E}_{\boldsymbol{X}}\big[\boldsymbol{a}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{X}) - \mathbb{E}_{\boldsymbol{X}}[\boldsymbol{a}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{X})]\big]^{\boldsymbol{2}}$- разброс (дисперсия) предсказаний алгоритма в зависимости от обучающей выборки X

$\boldsymbol{\sigma}^{\boldsymbol{2}}$ - шум в данных

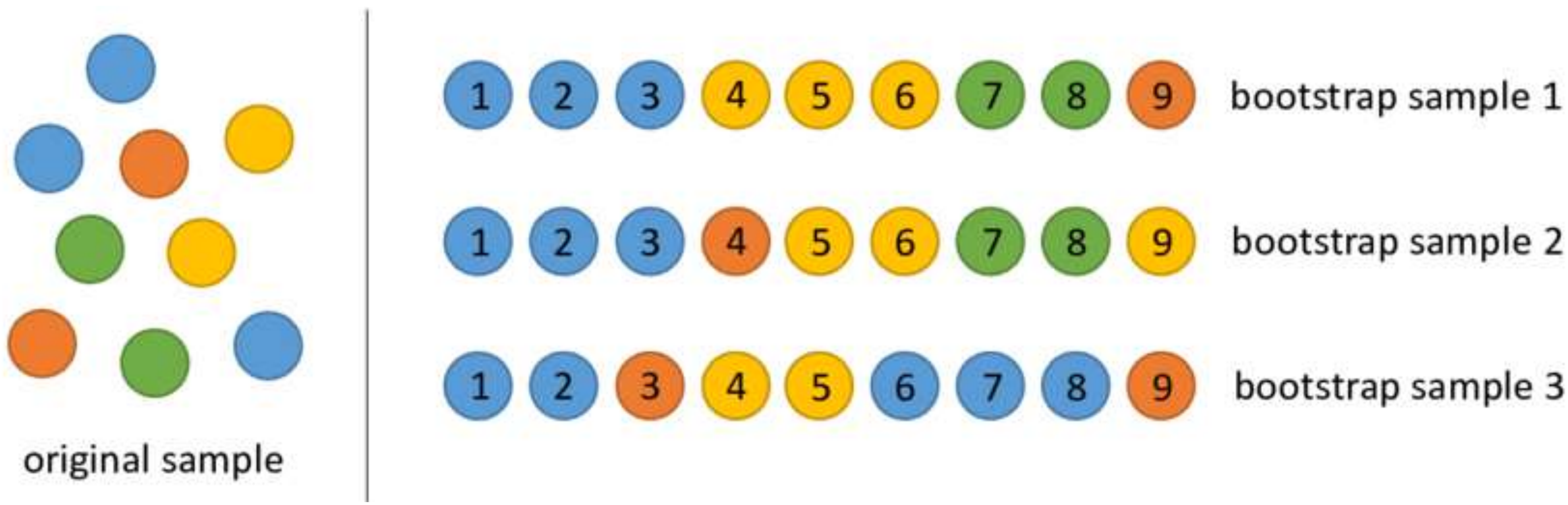

underfitting
zone
overfitting
zone
generalization
error
bias
variance
capacity
optimal capacity

Гипотеза: возможно ли уменьшить одну из компонент ошибки, не увеличивая другую?

Bootstrap

$X = (x_i, y_i)$ – конечная выборка размером ℓ

Сгенерируем N подвыборок $X_1, \ldots, X_N$ размером ℓ с помощью бутстрапа – выбираем ℓ объектов равновероятно с возвращением.



На каждой из подвыборок обучим модель, например, линейной регрессии, получив *базовые алгоритмы* $b_1(x), \ldots, b_N(x)$.
Существуют истинная функция ответа для всех объектов y(x) и задано распределение на объектах p(x). Тогда ошибка каждой функции регрессии:

$$\boldsymbol{\varepsilon_j(x) = b_j(x) - y(x)}, \qquad \boldsymbol{j = 1, \ldots, N}$$

Математическое ожидание среднеквадратичной ошибки:

$$\mathbb{E}_X(\boldsymbol{b_j(x) - y(x)})^{\boldsymbol{2}} = \mathbb{E}_x \boldsymbol{\varepsilon_j^2(x)}$$

Тогда средняя ошибка построенных функций регрессии:

$$E_1 = \frac{1}{N}\sum_{j=1}^{N} \mathbb{E}_x \boldsymbol{\varepsilon_j^2(x)}$$

Предположим, что ошибки несмещены и некоррелированы:

$\mathbb{E}_{\boldsymbol{x}} \boldsymbol{\varepsilon}_{\boldsymbol{j}}(\boldsymbol{x}) = 0$ и $\mathbb{E}_{\boldsymbol{x}} \boldsymbol{\varepsilon}_{\boldsymbol{i}}(\boldsymbol{x}) \boldsymbol{\varepsilon}_{\boldsymbol{j}}(\boldsymbol{x}) = 0, i \neq j$

Тогда новая функция регрессии, которая будет усреднять ответы построенных моделей:

$$a(x) = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^{N} b_j(x)$$

Выведем среднеквадратичную ошибку этой функции:

$$E_N = \mathbb{E}_x \left(\frac{1}{N} \sum_{j=1}^{n} b_j(x) - y(x) \right)^2 = \mathbb{E}_x \left(\frac{1}{N} \sum_{j=1}^{N} \varepsilon_j(x) \right)^2$$

$$= \frac{1}{N^2} \mathbb{E}_x \left(\sum_{j=1}^{N} \varepsilon_j^2(x) + \sum_{i \neq j} \underbrace{\varepsilon_i(x) \varepsilon_j(x)}_{=0} \right) = \boxed{\frac{1}{N} E_1}$$

Ошибка уменьшилась
в N раз !

Предположим, что ошибки ~~несмещены и некоррелированы~~:

~~$\mathbb{E}_x \varepsilon_j(x) = 0$ и $\mathbb{E}_x \varepsilon_i(x)\varepsilon_j(x) = 0, i \neq j$~~

Тогда новая функция регрессии, которая будет усреднять ответы построенных моделей:

$$a(x) = \frac{1}{N}\sum_{j=1}^{N} b_j(x)$$

Выведем среднеквадратичную ошибку этой функции:

$$E_N = \mathbb{E}_x\left(\frac{1}{N}\sum_{j=1}^{n} b_j(x) - y(x)\right)^2 = \mathbb{E}_x\left(\frac{1}{N}\sum_{j=1}^{N} \varepsilon_j(x)\right)^2$$

$$= \frac{1}{N^2}\mathbb{E}_x\left(\sum_{j=1}^{N}\varepsilon_j^2(x) + \underbrace{\sum_{i\neq j}\varepsilon_i(x)\varepsilon_j(x)}_{=0}\right) = \boxed{\frac{1}{N}E_1}$$

Ошибка уменьшилась в ~~N~~ раз !

Bagging = bootstrap aggregating

Bagging – простое (не взвешенное) голосование

Обучаем некоторые число базовых алгоритмов $b_n(x)$ с помощью бутстрапирования выборки и строим итоговую композицию как среднее всех базовых алгоритмов (моделей):

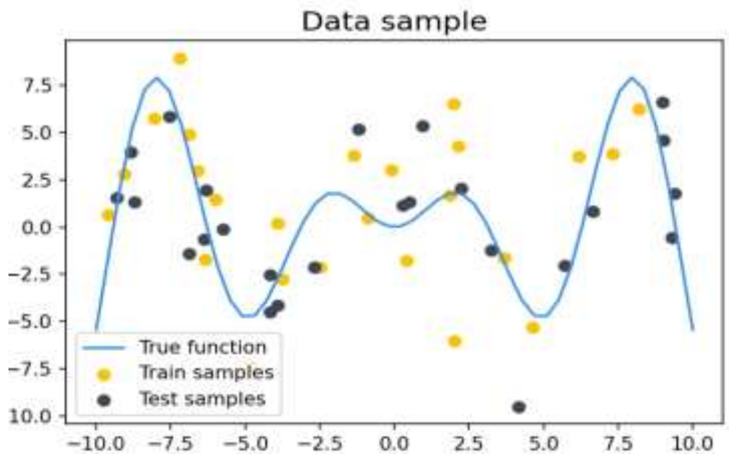
$$a_N(x) = \frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N} b_n(x)$$

Оценим смещение и разброс ансамбля базовых алгоритмов (матожидание оцениваем по всем возможным подвыборкам, получаемым с помощью бутстрапа):

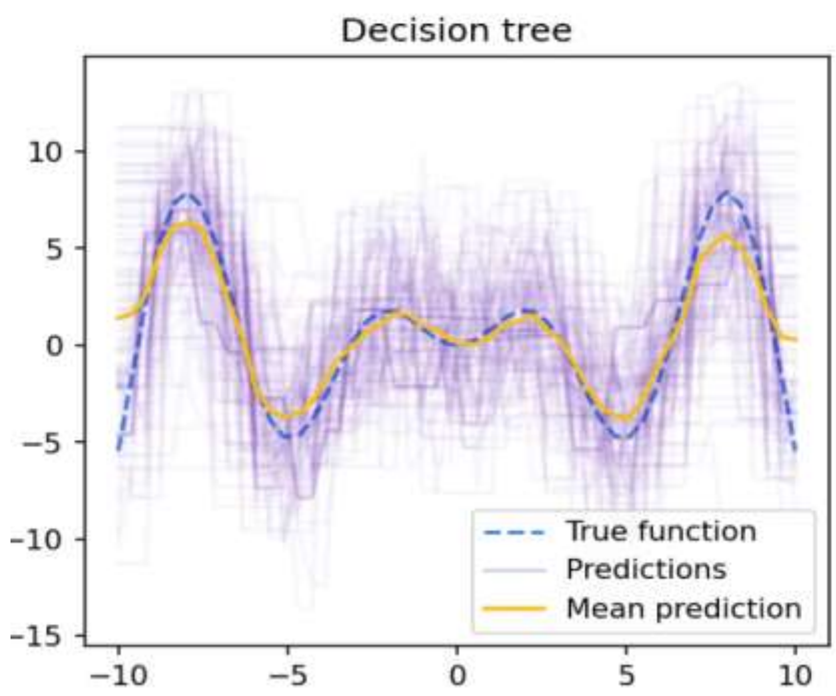
$bias_X a(x,X) = bias_X b(x,X)$ - смещение не изменилось по сравнению со средним смещением отдельных моделей (смещение ансамбля равно смещению одного алгоритма)

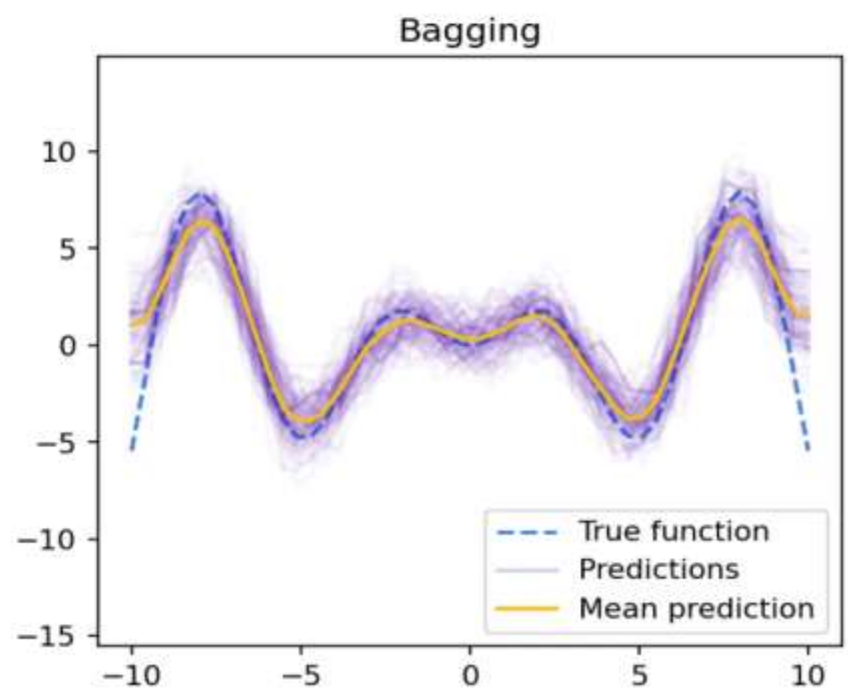
$\mathbb{V}_X[a(x,X)] = \frac{1}{k}\mathbb{V}_X b(x,X)$ – если базовые алгоритмы <u>*некоррелированы*</u>, то дисперсия ансамбля уменьшается в <u>*k*</u> раз

Бэггинг над решающими деревьями

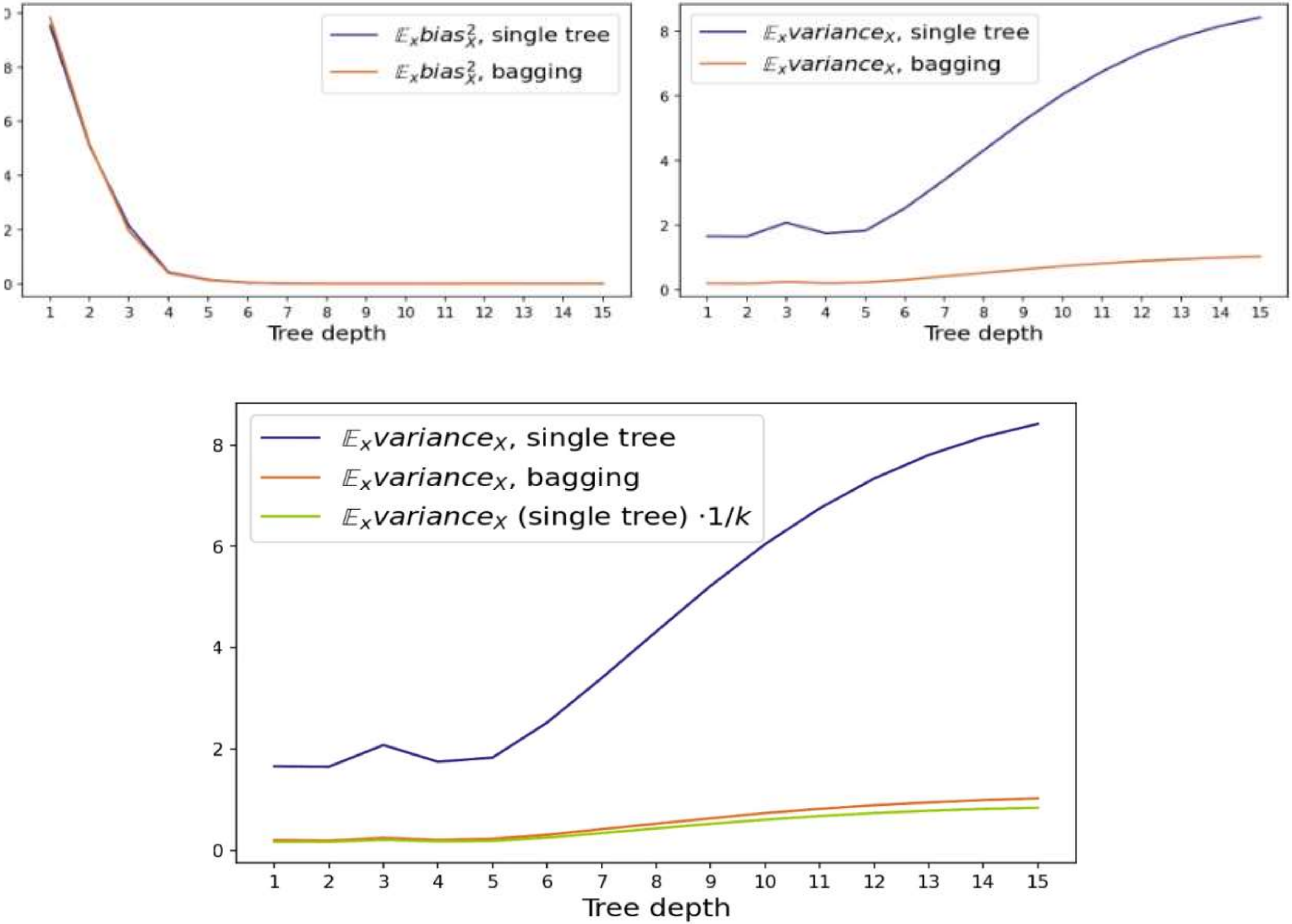


Общая дисперсия предсказаний в зависимости от обучающего множества у бэггинга значительно ниже, чем у отдельных деревьев, а в среднем их предсказания не отличаются





Источник: https://education.yandex.ru/handbook/ml/article/ansambli-v-mashinnom-obuchenii

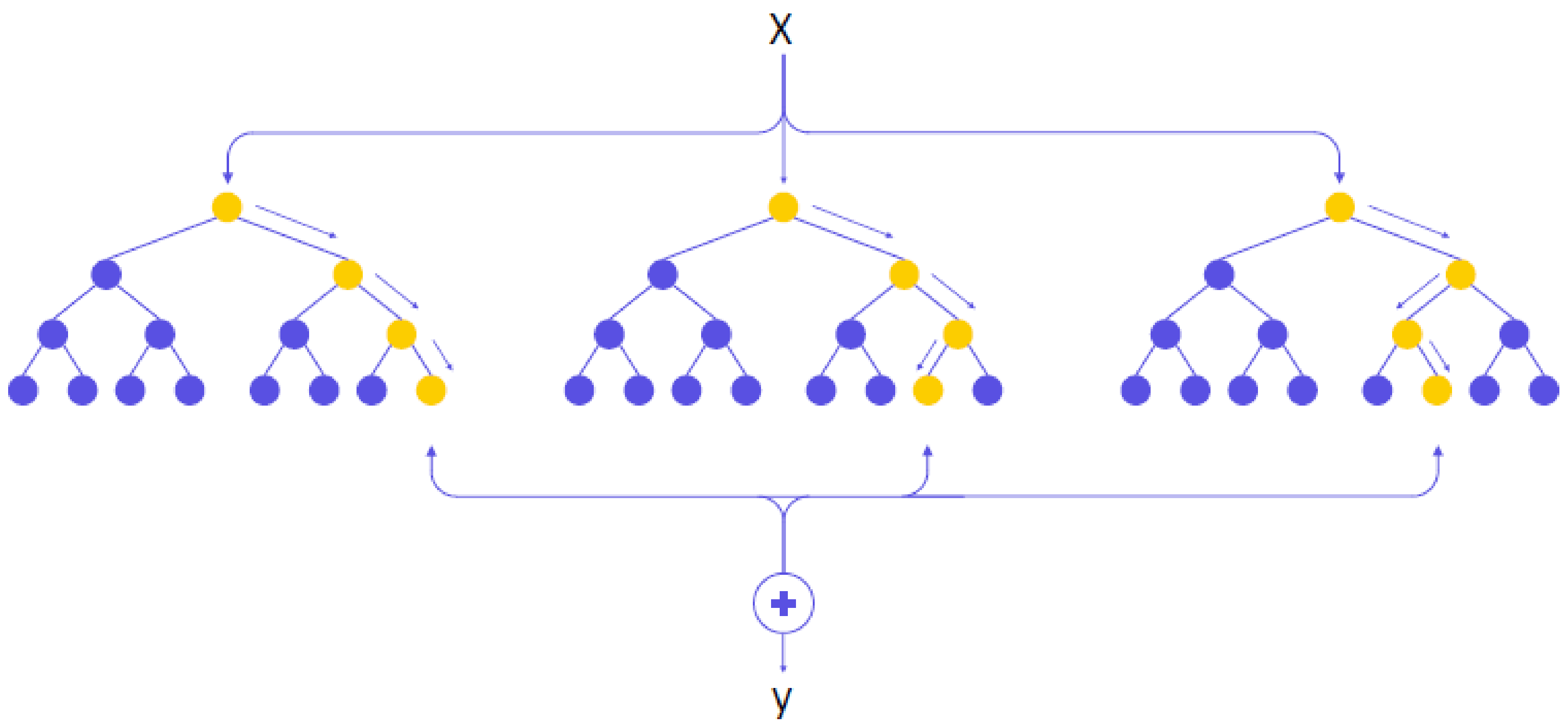


$\mathbb{E}_x bias^2_X$, single tree
$\mathbb{E}_x bias^2_X$, bagging
Tree depth
$\mathbb{E}_x variance_X$, single tree
$\mathbb{E}_x variance_X$, bagging
Tree depth
$\mathbb{E}_x variance_X$, single tree
$\mathbb{E}_x variance_X$, bagging
$\mathbb{E}_x variance_X$ (single tree) $\cdot 1/k$
Tree depth

Random forest

Метод случайных лесов – основан на бэггинге над решающими деревьями и методе случайных подпространств (random subspace method)

Bagging + RSM = Random Forest



1. Для построения *i-го* дерева:

- из обучающей выборки X выбирается с возвращением случайная подвыборка X^i *того же размера, что и X (бэггинг)*

- в процессе обучения каждого дерева в каждой вершине случайно выбираются n < N признаков, где N – полное число признаков (метод случайных подпространств), и среди них ищется оптимальный сплит

2. Получение предсказания ансамбля на тестовом объекте: для регрессии – усредняем отдельные ответы деревьев, для классификации – выбираем самый популярный класс

Out-of-Bag

Объекты, которые не вошли в бустрапированную выборку X_n дерева b_n являются контрольными для данного дерева. Для каждого объекта x_i можно выбрать деревья, которые были обучены без него и вычислить по их ответам несмещенную out-of-bag-ошибку:

$$OOB = \sum_{i=1}^{l} L\left(y_i, \frac{1}{\sum_{n=1}^{N}[x_i \notin X_n]} \sum_{n=1}^{N} [x_i \notin X_n]\, b_n(x_i)\right)$$

По мере увеличения числа деревьев N данная оценка стремится к leave-one-out оценке, но существенно проще для вычисления. По OOB оценке можно настраивать гиперпараметры Random Forest.

Особенности построения Random Forest

- Строим глубокие деревья, потому что у них низкое смещение, а разброс уменьшается за счет бэггинга.
- Чем больше признаков, тем больше корреляция между деревьями. По умолчанию – для регрессии [n/3] признаков, для классификации $\sqrt{n}$
- Количество деревьев в случайном лесе:

 - выбираем исходя из зависимости уменьшения ошибки ансамбля от количества деревьев (строим график и смотрим когда ошибка перестает значимо уменьшаться)

 - ограничиваем исходя из требований к времени работы модели

- Минимальное число объектов в расщепляемой подвыборке
- Минимальное число объектов в листьях
- Критерий расщепления (информативности)

Обобщение ансамблевых методов

Способы повышения разнообразия базовых алгоритмов:

- Обучение по случайным подвыборкам
- Обучение по случайным наборам признаков
- Обучение из разных параметрических моделей
- Обучение с использованием рандомизации:

  1. *Bagging* – в каждую выборку попадает $1 - \left(1 - \frac{1}{l}\right)^l \to 1 - \frac{1}{e} \approx 63.2\%$ объектов при $l \to \infty$
  2. *Pasting* – случайные обучающие подвыборки
  3. *Random subspaces* – случайные подмножества (без возвращения)
  4. *Random patches* – случайные подмножества как объектов так и признаков
  5. *Cross-validated committees* – выборка разбивается на *k* фолдов и делается *k* обучений без одного фолда

Преимущества и недостатки стохастических методов ансамблирования

- ✓ Ансамблирование это *метод обертка* над базовым методом обучения (базовые алгоритмы обучаются готовыми методами)
- ✓ Универсальность – подходит для классификации, регрессии, поиска аномалий и других задач
- ✓ Простая реализация, легкое распараллеливание, т.к. все базовые алгоритмы строятся независимо
- ✓ Возможность получения несмещенных оценок OOB
- ✓ Random Forest – один из лучших универсальных методов, часто используется как baseline-решение с хорошим качеством, которое легко реализовать «из коробки»

- × Требуется большое количество базовых алгоритмов
- × Базовые алгоритмы должны быть разнообразными – необходимо найти компромисс качество/различность
- × Random forest плохо работает с разреженными признаками