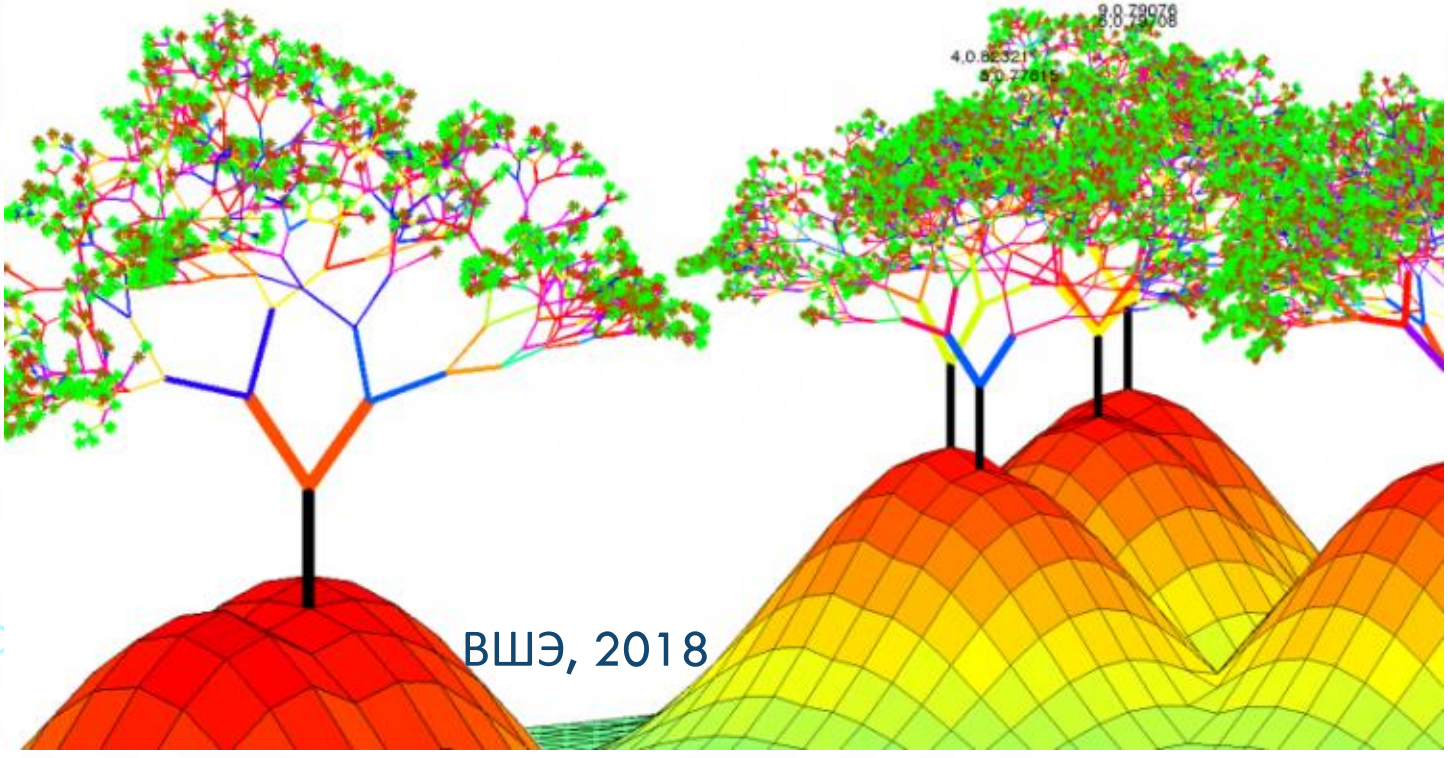
Композиции алгоритмов. Часть 1.

Кантонистова Е.О.

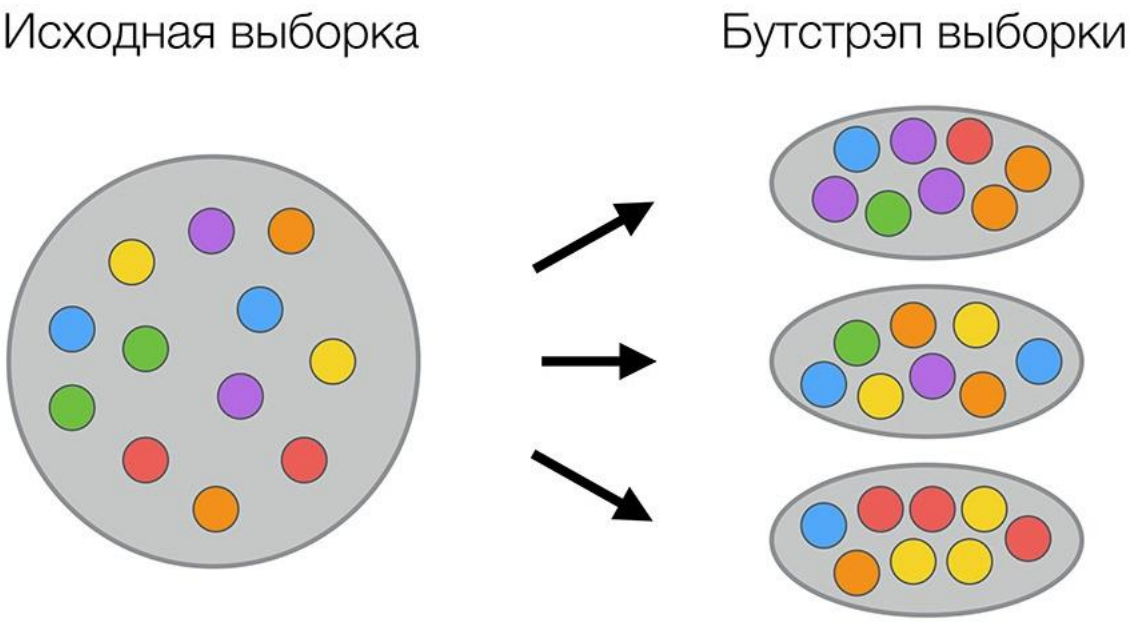


ВШЭ, 2018

БУТСТРЭП

Дана выборка X. Решаем задачу регрессии.

- **Бутстрэп:** равномерно возьмем из выборки X l объектов с возвращением (т.е. в новой выборке будут повторяющиеся объекты). Получим выборку X_1.
- Повторяем процедуру N раз, получаем выборки $X_1, \dots, X_N$.



БЭГГИНГ (BOOTSTRAP AGGREGATION)

С помощью бутстрэпа мы получили выборки $X_1, \dots, X_N$.

- Обучим по каждой из них линейную модель регрессии – получим базовые алгоритмы $b_1(x), \dots, b_N(x)$.
- Построим новую функцию регрессии:

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

БЭГГИНГ (BOOTSTRAP AGGREGATION)

С помощью бутстрэпа мы получили выборки $X_1, \dots, X_N$.

- Обучим по каждой из них линейную модель регрессии – получим базовые алгоритмы $b_1(x), \dots, b_N(x)$.
- Построим новую функцию регрессии:

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

Утверждение. *Если алгоритмы $b_1(x), \dots, b_N(x)$ некоррелированы, то среднеквадратичная ошибка алгоритма $a(x)$, полученного при помощи бэггинга, в N раз меньше среднеквадратичной ошибки исходных алгоритмов $b_j(x)$.*

МЕРА ОШИБКИ АЛГОРИТМА

- Дана обучающая выборка $X = (x_i, y_i)_{i=1}^{l}, y_i \in \mathbb{R}$ и задано распределение $p(x, y)$ на пространстве всех объектов и ответов $\mathbb{X} \times \mathbb{Y}$.
- Пусть функция потерь – квадратичная:

$$L(y, a) = (y - a(x))^2$$

Среднеквадратичный риск:

$$\boldsymbol{R(a) = \mathbb{E}_{x,y}\left[\left(y - a(x)\right)^2\right] = \int_{\mathbb{X}} \int_{\mathbb{Y}} p(x, y)\left(y - a(x)\right)^2 dx dy}$$

Среднеквадратичный риск $R(a)$ – это мера качества модели a на всех возможных объектах (а не только на обучающей выборке).

СРЕДНЕКВАДРАТИЧНЫЙ РИСК

Утверждение. Минимум среднеквадратичного риска достигается на функции, возвращающей условное матожидание ответа при фиксированном объекте:

$$a_*(x) = \mathbb{E}[y|x] = \int_{\mathbb{Y}} yp(y|x)dy = \operatorname*{argmin}_a R(a)$$

ОШИБКА МЕТОДА ОБУЧЕНИЯ

Пусть дан метод обучения $\mu: (\mathbb{X} \times \mathbb{Y})^l \to A$, который каждой обучающей выборке X ставит в соответствие некоторый алгоритм $a \in A$.

Ошибка метода обучения – усредненный по всем выборкам среднеквадратичный риск алгоритма, выбранного методом μ по выборке:

$$\boldsymbol{L(\mu) = \mathbb{E}_X[L(\mu(X)] = \mathbb{E}_X\,[\mathbb{E}_{x,y}[(y - \mu(X)(x))^2]]}$$

РАЗЛОЖЕНИЕ ОШИБКИ (BIAS-VARIANCE DECOMPOSITION)

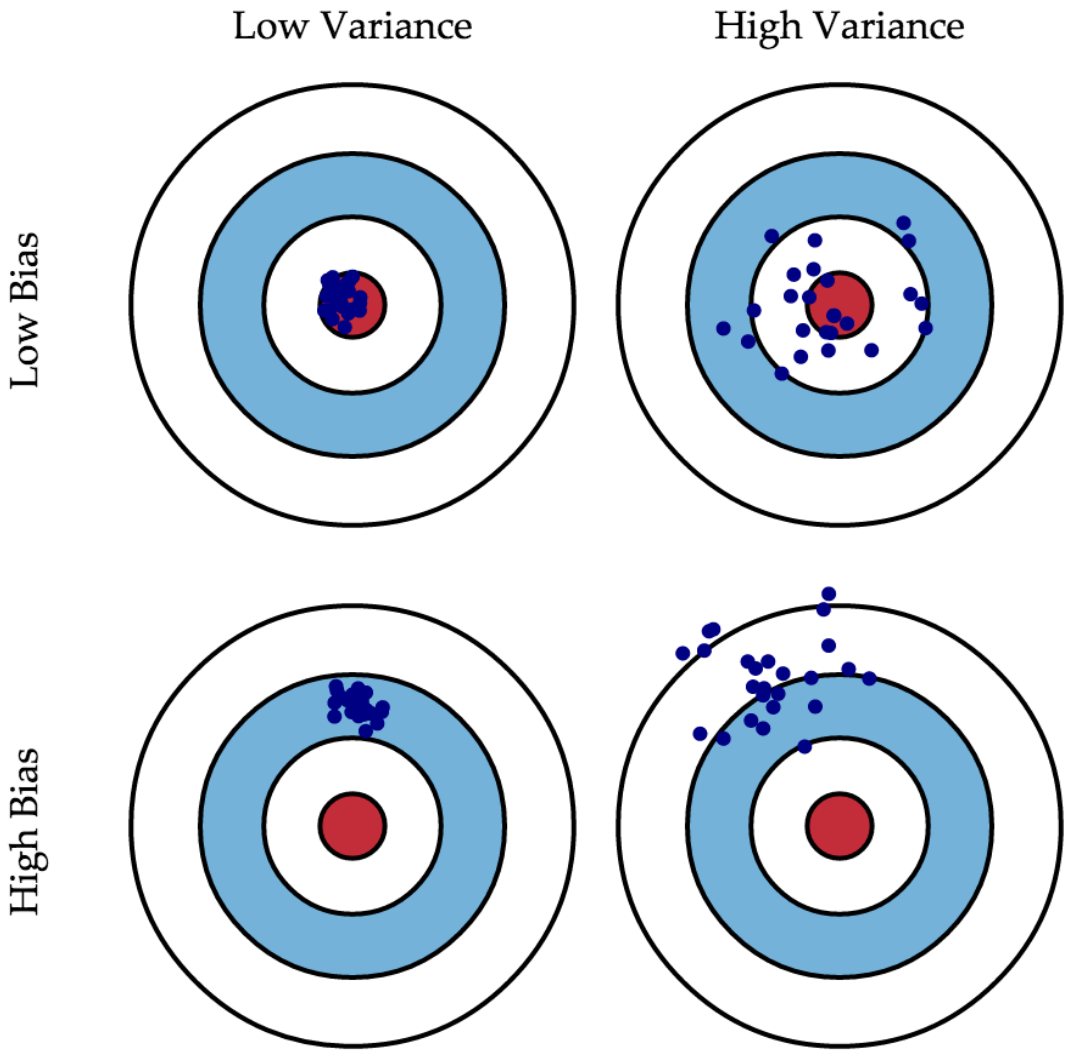
Утверждение.

$$L(\mu) = \mathbb{E}_{x,y}\left[(y - \mathbb{E}[y|x])^2\right] \text{ (шум)}$$

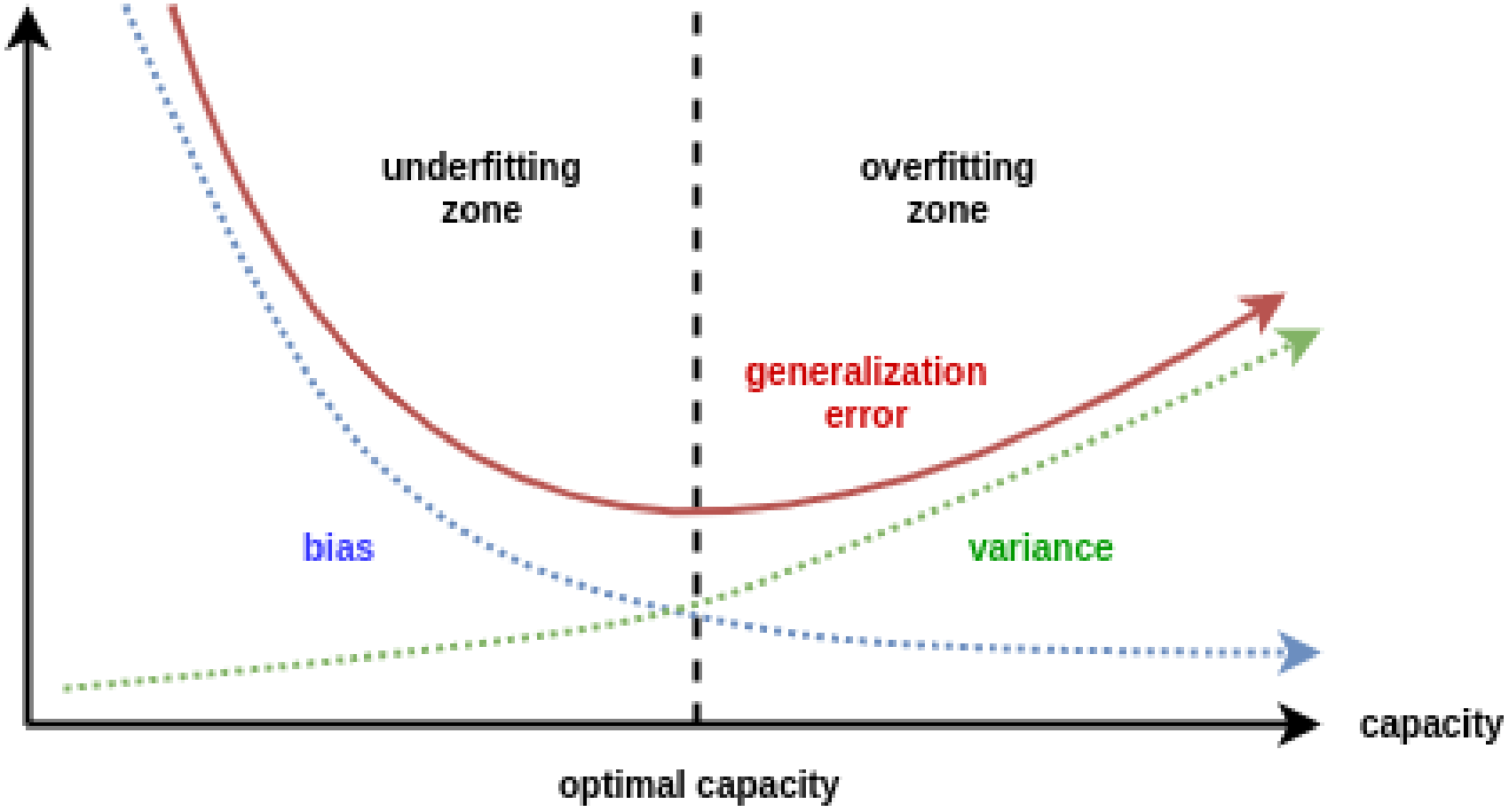
$$+\mathbb{E}_{x,y}\left[(\mathbb{E}_X[\mu(X)] - \mathbb{E}[y|x])^2\right] \text{ (смещение)}$$

$$+\mathbb{E}_{x,y}\left[\mathbb{E}_X[(\mu(X) - \mathbb{E}_X[\mu(X)])^2]\right] \text{ (разброс)}$$

СМЕЩЕНИЕ И РАЗБРОС



BIAS-VARIANCE TRADEOFF



СМЕЩЕНИЕ И РАЗБРОС У БЭГГИНГА

Бэггинг: $a_N(x) = \frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N} b_n(x) = \frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N} \tilde{\mu}(X)\,(x)$

(здесь $\tilde{\mu}(X) = \mu(\tilde{X})$ – алгоритм, обученный на подвыборке $\tilde{X}$)

Утверждение.

1) ***Бэггинг не ухудшает смещенность модели****, т.е. смещение $a_N(x)$ равно смещению одного базового алгоритма.*

2) Если базовые алгоритмы некоррелированы, то ***дисперсия бэггинга $a_N(x)$ в N раз меньше дисперсии отдельных базовых алгоритмов.***

СЛУЧАЙНЫЙ ЛЕС (RANDOM FOREST)

- Возьмем в качестве базовых алгоритмов для бэггинга ***решающие деревья***, т.е. каждое случайное дерево $b_i(x)$ построено по своей подвыборке X_i.
- В каждой вершине дерева будем искать ***разбиение не по всем признакам, а по подмножеству признаков***.
- Дерево строится до тех пор, пока в листе не окажется n_{min} объектов.

RANDOM FOREST

Алгоритм 3.1. Random Forest

1: **для** $n = 1, \ldots, N$

2: Сгенерировать выборку $\tilde{X}_n$ с помощью бутстрэпа

3: Построить решающее дерево $b_n(x)$ по выборке $\tilde{X}_n$:

- дерево строится, пока в каждом листе не окажется не более $n_{\min}$ объектов
- при каждом разбиении сначала выбирается m случайных признаков из p, и оптимальное разделение ищется только среди них

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

RANDOM FOREST – ПРАКТИЧЕСКИЕ РЕКОМЕНДАЦИИ

- Если p – количество признаков, то при классификации обычно берут $m = [\sqrt{p}]$, а при регрессии - $m = [\frac{p}{3}]$ признаков
- При классификации обычно дерево строится, пока в листе не окажется $n_{min} = 1$ объект, а при регрессии $n_{min} = 5$

OUT-OF-BAG ОШИБКА

- Каждое дерево в случайном лесе обучается по некоторому подмножеству объектов
- Значит, для каждого объекта есть деревья, которые на этом объекте не обучались.

Out-of-bag ошибка:

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

Утверждение. *При $N \to \infty$ OOB оценка стремится к leave-one-out оценке.*

OOB-SCORE

По графику out-of-bag ошибки можно, например, подбирать количество деревьев в случайном лесе