

Introduction aux méthodes ensemblistes

Table of contents

1 Le <i>boosting</i>	1
1.1 Introduction	1
1.2 Les premières approches du <i>boosting</i>	2
1.2.1 Le <i>boosting</i> par repondération: Adaboost	2
1.2.2 L'invention du <i>boosting</i> : la <i>Gradient Boosting Machine</i>	3
2 La mécanique du <i>gradient boosting</i>	3
2.1 Le modèle à entraîner	4
2.2 Isoler le k -ième arbre	4
2.3 Faire apparaître le gradient	5
2.4 Calculer les poids optimaux	5
2.5 Construire le k -ième arbre	6
2.6 Choisir les <i>splits</i>	6
2.7 La suite	7
2.7.1 Les moyens de lutter contre l' <i>overfitting</i> :	7
2.7.2 Les hyperparamètres	7
2.7.3 La préparation des données	8
2.7.4 Les fonctions de perte	9
2.8 Comparaison RF-GBDT	9
2.9 Liste des hyperparamètres d'une RF	9
Bibliography	9

1 Le *boosting*

1.1 Introduction

Le fondement théorique du *boosting* est un article de 1990 (R. Shapire [1]) qui a démontré théoriquement que, sous certaines conditions, il est possible de transformer un modèle prédictif peu performant en un modèle prédictif très performant. Plus précisément, un modèle ayant un pouvoir prédictif arbitrairement élevé (appelé *strong learner*) peut être construit en combinant des modèles simples dont les prédictions ne sont que légèrement meilleures que le hasard (appelé *weak learners*). Le *boosting* est donc une méthode qui combine une approche ensembliste reposant sur un grand nombre de modèles simples avec un entraînement séquentiel: chaque modèle simple (souvent des arbres de décision peu profonds) tâche d'améliorer la prédiction globale en corrigeant les erreurs des prédictions précédentes à chaque étape. Bien qu'une approche de *boosting* puisse en théorie mobiliser différentes classes de *weak learners*, en pratique les *weak learners* utilisés par les algorithmes de *boosting* sont presque toujours des arbres de décision.

S'il existe plusieurs variantes, les algorithmes de *boosting* suivent la même logique :

- Un premier modèle simple et peu performant est entraîné sur les données.
- Un deuxième modèle est entraîné de façon à corriger les erreurs du premier modèle (par exemple en pondérant davantage les observations mal prédites);
- Ce processus est répété en ajoutant des modèles simples, chaque modèle corrigeant les erreurs commises par l'ensemble des modèles précédents;
- Tous ces modèles sont finalement combinés (souvent par une somme pondérée) pour obtenir un modèle complexe et performant.

En termes plus techniques, les algorithmes de *boosting* partagent trois caractéristiques communes:

- Ils visent à **trouver une approximation** \hat{F} d'une fonction inconnue $F^* : \mathbf{x} \mapsto y$ à partir d'un ensemble d'entraînement $(y_i, \mathbf{x}_i)_{i=1, \dots, n}$
- Ils supposent que la fonction F^* peut être approchée par une **somme pondérée de modèles simples** f de paramètres θ :

$$F(\mathbf{x}) = \sum_{m=1}^M \beta_m f(\mathbf{x}, \theta_m) \quad (1)$$

- ils reposent sur une **modélisation additive par étapes**, qui décompose l'entraînement de ce modèle complexe en une **séquence d'entraînements de petits modèles**. Chaque étape de l'entraînement cherche le modèle simple f qui améliore la puissance prédictive du modèle complet, sans modifier les modèles précédents, puis l'ajoute de façon incrémentale à ces derniers:

$$F_m(\mathbf{x}) = F_{m-1}(\mathbf{x}) + \hat{\beta}_m f(\mathbf{x}_i, \hat{\theta}_m) \quad (2)$$

METTRE ICI UNE FIGURE EN UNE DIMENSION, avec des points et des modèles en escalier qui s'affinent.

1.2 Les premières approches du *boosting*

1.2.1 Le *boosting* par repondération: Adaboost

Dans les années 1990, de nombreux travaux ont tâché de proposer des mise en application du *boosting* (L. Breiman [2], A. J. Grove and D. Schuurmans [3]) et ont comparé les mérites des différentes approches. Deux approches ressortent particulièrement de cette littérature: Adaboost (Adaptive Boosting, Y. Freund and R. E. Schapire [4]) et la *Gradient Boosting Machine* (J. H. Friedman [5]). Ces deux approches reposent sur des principes très différents.

Le principe d'Adaboost consiste à pondérer les erreurs commises à chaque itération en donnant plus d'importance aux observations mal prédites, de façon à obliger les modèles simples à se concentrer sur les observations les plus difficiles à prédire. Voici une esquisse du fonctionnement d'AdaBoost:

- Un premier modèle simple est entraîné sur un jeu d'entraînement dans lequel toutes les observations ont le même poids.
- A l'issue de cette première itération, les observations mal prédites reçoivent une pondération plus élevée que les observations bien prédites, et un deuxième modèle est entraîné sur ce jeu d'entraînement pondéré.

- Ce deuxième modèle est ajouté au premier, puis on répond à nouveau les observations en fonction de la qualité de prédiction de ce nouveau modèle.
- Cette procédure est répétée en ajoutant de nouveaux modèles et en ajustant les pondérations.

L'algorithme Adaboost a été au coeur de la littérature sur le *boosting* à la fin des années 1990 et dans les années 2000, en raison de ses performances sur les problèmes de classification binaire. Il a toutefois été progressivement remplacé par les algorithmes de *gradient boosting* inventé quelques années plus tard.

1.2.2 L'invention du *boosting* : la *Gradient Boosting Machine*

La *Gradient Boosting Machine* (GBM) propose une approche assez différente: elle introduit le *gradient boosting* en reformulant le *boosting* sous la forme d'un problème de descente de gradient. Voici une esquisse du fonctionnement de la *Gradient Boosting Machine*:

- Un premier modèle simple est entraîné sur un jeu d'entraînement, de façon à minimiser une fonction de perte qui mesure l'écart entre la variable à prédire et la prédiction du modèle.
- A l'issue de cette première itération, on calcule la dérivée partielle (*gradient*) de la fonction de perte par rapport à la prédiction en chaque point de l'ensemble d'entraînement. Ce gradient indique dans quelle direction et dans quelle ampleur la prédiction devrait être modifiée afin de réduire la perte.
- A la deuxième itération, on ajoute un deuxième modèle qui va tâcher d'améliorer le modèle complet en prédisant le mieux possible l'opposé de ce gradient.
- Ce deuxième modèle est ajouté au premier, puis on recalcule la dérivée partielle de la fonction de perte par rapport à la prédiction de ce nouveau modèle.
- Cette procédure est répétée en ajoutant de nouveaux modèles et en recalculant le gradient à chaque étape.

L'approche de *gradient boosting* proposée par J. H. Friedman [5] présente deux grands avantages. D'une part, elle peut être utilisée avec n'importe quelle fonction de perte différentiable, ce qui permet d'appliquer le *gradient boosting* à de multiples problèmes (régression, classification binaire ou multiclasse, *learning-to-rank*...). D'autre part, elle offre souvent des performances comparables ou supérieures aux autres approches de *boosting*. Le *gradient boosting* d'arbres de décision (*Gradient boosted Decision Trees* - GBDT) est donc devenue l'approche de référence en matière de *boosting*. En particulier, les implémentations modernes du *gradient boosting* comme XGBoost, LightGBM, et CatBoost sont des extensions et améliorations de la *Gradient Boosting Machine*.

2 La mécanique du *gradient boosting*

Depuis la publication de J. H. Friedman [5], la méthode de *gradient boosting* a connu de multiples développements et raffinements, parmi lesquels XGBoost (T. Chen and C. Guestrin [6]), LightGBM (G. Ke *et al.* [7]) et CatBoost (L. Prokhorenkova, G. Gusev, A. Vorobev, A. V. Dorogush, and A. Gulin [8]). S'il existe quelques différences entre ces implémentations, elles partagent néanmoins la même mécanique d'ensemble, que la section qui suit va présenter en détail en s'appuyant sur l'implémentation proposée par XGBoost.[6, .]

Choses importantes à mettre en avant:

- Le boosting est fondamentalement différent des forêts aléatoires. See ESL, chapitre 10.
- Toute la mécanique est indépendante de la fonction de perte choisie. En particulier, elle est applicable indifféremment à des problèmes de classification et de régression.
- Les poids sont calculés par une formule explicite, ce qui rend les calculs extrêmement rapides.
- Comment on interprète le gradient et la hessienne: cas avec une fonction de perte quadratique.
- Le boosting est fait pour overfitter; contrairement aux RF, il n'y a pas de limite à l'overfitting. Donc lutter contre le surapprentissage est un élément particulièrement important de l'usage des algorithmes de boosting.

2.1 Le modèle à entraîner

On veut entraîner un modèle comprenant K arbres de régression ou de classification:

$$\hat{y}_i = \phi(\mathbf{x}_i) = \sum_{k=1}^K f_k(\mathbf{x}_i)$$

Chaque arbre f est défini par trois paramètres:

- sa structure qui est une fonction $q : \mathbb{R}^m \rightarrow \{1, \dots, T\}$ qui à un vecteur d'inputs \mathbf{x} de dimension m associe une feuille terminale de l'arbre);
- son nombre de feuilles terminales T ;
- les valeurs figurant sur ses feuilles terminales $\mathbf{w} \in \mathbb{R}^T$ (appelées poids ou *weights*).

Le modèle est entraîné avec une **fonction-objectif** constituée d'une **fonction de perte** l et d'une **fonction de régularisation** Ω . La fonction de perte mesure la distance entre la prédiction $\hat{y}(y)$ et la vraie valeur y et présente généralement les propriétés suivantes: elle est convexe et dérivable deux fois, et atteint son minimum lorsque $\hat{y}(y) = y$. La fonction de régularisation pénalise la complexité du modèle. Dans le cas présent, elle pénalise les arbres avec un grand nombre de feuilles (T élevé) et les arbres avec des poids élevés (w_t élevés en valeur absolue).

$$\mathcal{L}(\phi) = \underbrace{\sum_i l(\hat{y}_i, y_i)}_{\text{Perte sur les observations}} + \underbrace{\sum_k \Omega(f_k)}_{\text{Fonction de régularisation}} \quad \text{avec} \quad \Omega(f) = \gamma T + \frac{1}{2} \lambda \sum_{t=1}^T w_t^2 \quad (3)$$

2.2 Isoler le k -ième arbre

La fonction-objectif introduite précédemment est très complexe et ne peut être utilisée directement pour entraîner le modèle, car il faudrait entraîner tous les arbres en même temps. On va donc reformuler donc cette fonction objectif de façon à isoler le k -ième arbre, qui pourra ensuite être entraîné seul, une fois que les $k - 1$ arbres précédents auront été entraînés. Pour cela, on note $\hat{y}_i^{(k)}$ la prédiction à l'issue de l'étape k : $\hat{y}_i^{(k)} = \sum_{j=1}^k f_j(\mathbf{x}_i)$, et on écrit la fonction-objectif $\mathcal{L}^{(k)}$ au moment de l'entraînement du k -ième arbre:

$$\begin{aligned}
\mathcal{L}^{(k)} &= \sum_{i=1}^n l(y_i, \hat{y}_i^{(k)}) + \sum_{j=1}^k \Omega(f_j) \\
&= \sum_{i=1}^n l\left(y_i, \hat{y}_i^{(k-1)} + \underbrace{f_k(\mathbf{x}_i)}_{k\text{-ième arbre}}\right) + \sum_{j=1}^{k-1} \Omega(f_j) + \Omega(f_k)
\end{aligned} \tag{4}$$

2.3 Faire apparaître le gradient

Une fois isolé le k -ième arbre, on fait un développement limité d'ordre 2 de $l(y_i, \hat{y}_i^{(k-1)} + f_k(\mathbf{x}_i))$ au voisinage de $\hat{y}_i^{(k-1)}$, en considérant que la prédiction du k -ième arbre $f_k(\mathbf{x}_i)$ est

$$\mathcal{L}^{(k)} \approx \underbrace{\sum_{i=1}^n [l(y_i, \hat{y}_i^{(k-1)}) + g_i f_k(\mathbf{x}_i)]}_{(A)} + \underbrace{\frac{1}{2} h_i f_k^2(\mathbf{x}_i)}_{(B)} + \sum_{j=1}^{k-1} \Omega(f_j) + \Omega(f_k) \tag{5}$$

$$\text{avec } g_i = \frac{\partial l(y_i, \hat{y}_i^{(k-1)})}{\partial \hat{y}_i^{(k-1)}} \quad \text{et} \quad h_i = \frac{\partial^2 l(y_i, \hat{y}_i^{(k-1)})}{\partial (\hat{y}_i^{(k-1)})^2} \tag{6}$$

Il est important de noter que les termes (A) et (B) sont constants car les $k - 1$ arbres précédents ont déjà été entraînés et ne sont pas modifiés par l'entraînement du k -ième arbre. On peut donc retirer ces termes pour obtenir la fonction-objectif simplifiée qui sera utilisée pour l'entraînement du k -ième arbre.

$$\tilde{\mathcal{L}}^{(k)} = \sum_{i=1}^n [g_i f_k(\mathbf{x}_i) + \frac{1}{2} h_i f_k^2(\mathbf{x}_i)] + \gamma T + \frac{1}{2} \lambda \sum_{j=1}^T w_j^2 \tag{7}$$

Cette expression est importante car elle montre qu'on est passé d'un problème complexe où il fallait entraîner un grand nombre d'arbres simultanément (équation 3) à un problème beaucoup plus simple dans lequel il n'y a qu'un seul arbre à entraîner.

2.4 Calculer les poids optimaux

A partir de l'expression précédente, il est possible de faire apparaître les poids w_j du k -ième arbre. Pour une structure d'arbre donnée ($q : \mathbb{R}^m \rightarrow \{1, \dots, T\}$), on définit $I_j = \{i \mid q(\mathbf{x}_i) = j\}$ l'ensemble des observations situées sur la feuille j puis on réorganise $\tilde{\mathcal{L}}^{(k)}$:

$$\begin{aligned}
\tilde{\mathcal{L}}^{(k)} &= \sum_{j=1}^T \sum_{i \in I_j} \left[g_i f_k(\mathbf{x}_i) + \frac{1}{2} h_i f_k^2(\mathbf{x}_i) \right] + \gamma T + \frac{1}{2} \lambda \sum_{j=1}^T w_j^2 \\
&= \sum_{j=1}^T \sum_{i \in I_j} \left[g_i w_j + \frac{1}{2} h_i w_j^2 \right] + \gamma T + \frac{1}{2} \lambda \sum_{j=1}^T w_j^2 \\
&= \sum_{j=1}^T \left[w_j \left(\sum_{i \in I_j} g_i \right) + \frac{1}{2} w_j^2 \left(\sum_{i \in I_j} h_i + \lambda \right) \right] + \gamma T
\end{aligned} \tag{8}$$

Dans la dernière expression, on voit que la fonction de perte simplifiée se reformule comme une combinaison quadratique des poids w_j , dans laquelle les dérivées première et seconde de la fonction de perte interviennent sous forme de pondérations. Tout l'enjeu de l'entraînement devient donc de trouver les poids optimaux w_j qui minimiseront cette fonction de perte, compte tenu de ces opérations.

Il se trouve que le calculs de ces poids optimaux est très simple: pour une structure d'arbre donnée ($q : \mathbb{R}^m \rightarrow \{1, \dots, T\}$), le poids optimal w_j^* de la feuille j est donné par l'équation:

$$w_j^* = -\frac{\sum_{i \in I_j} g_i}{\sum_{i \in I_j} h_i + \lambda} \quad (9)$$

Par conséquent, la valeur optimale de la fonction objectif pour l'arbre q est égale à

$$\tilde{\mathcal{L}}^{(k)}(q) = -\frac{1}{2} \sum_{j=1}^T \frac{\left(\sum_{i \in I_j} g_i\right)^2}{\sum_{i \in I_j} h_i + \lambda} + \gamma T \quad (10)$$

Cette équation est utile car elle permet de comparer simplement la qualité de deux arbres, et de déterminer lequel est le meilleur.

2.5 Construire le k -ième arbre

Dans la mesure où elle permet de comparer des arbres, on pourrait penser que l'équation 10 est suffisante pour choisir directement le k -ième arbre: il suffirait d'énumérer les arbres possibles, de calculer la qualité de chacun d'entre eux, et de retenir le meilleur. Bien que cette approche soit possible théoriquement, elle est inemployable en pratique car le nombre d'arbres possibles est extrêmement élevé. Par conséquent, le k -ième arbre n'est pas défini en une fois, mais construit de façon gloutonne:

REFERENCE A LA PARTIE CART/RF?

- on commence par le noeud racine et on cherche le *split* qui réduit au maximum la perte en séparant les données d'entraînement entre les deux noeuds-enfants.
- pour chaque noeud enfant, on cherche le *split* qui réduit au maximum la perte en séparant en deux la population de chacun de ces noeuds.
- Cette procédure recommence jusqu'à que l'arbre ait atteint sa taille maximale (définie par une combinaison d'hyperparamètres décrits dans la partie **référence à ajouter**).

2.6 Choisir les *splits*

Traduire *split* par critère de partition?

Reste à comprendre comment le critère de partition optimal est choisi à chaque étape de la construction de l'arbre. Imaginons qu'on envisage de décomposer la feuille I en deux nouvelles feuilles I_L et I_R (avec $I = I_L \cup I_R$), selon une condition logique reposant sur une variable et une valeur de cette variable (exemple: $x_6 > 11$). Par application de l'équation 10, le gain potentiel induit par ce critère de partition est égal à:

$$\text{Gain}_{\text{split}} = \frac{1}{2} \left[\frac{\left(\sum_{i \in I_L} g_i \right)^2}{\sum_{i \in I_L} h_i + \lambda} + \frac{\left(\sum_{i \in I_R} g_i \right)^2}{\sum_{i \in I_R} h_i + \lambda} - \frac{\left(\sum_{i \in I} g_i \right)^2}{\sum_{i \in I} h_i + \lambda} \right] - \gamma \quad (11)$$

Cette dernière équation est au coeur de la mécanique du *gradient boosting* car elle permet de comparer les critères de partition possibles. Plus précisément, l'algorithme de détermination des critères de partition (*split finding algorithm*) consiste en une double boucle sur les variables et les valeurs prises par ces variables, qui énumère un grand nombre de critères de partition et mesure le gain associé à chacun d'eux avec l'équation 11. Le critère de partition retenu est simplement celui dont le gain est le plus élevé.

L'algorithme qui détermine les critères de partition est un enjeu de performance essentiel dans le *gradient boosting*. En effet, utiliser l'algorithme le plus simple (énumérer tous les critères de partition possibles, en balayant toutes les valeurs de toutes les variables) s'avère très coûteux dès lors que les données contiennent soit un grand nombre de variables, soit des variables continues prenant un grand nombre de valeurs. C'est pourquoi les algorithmes de détermination des critères de partition ont fait l'objet de multiples améliorations et optimisations visant à réduire leur coût computationnel sans dégrader la qualité des critères de partition.

2.7 La suite

2.7.1 Les moyens de lutter contre l'*overfitting*:

- le *shrinkage*;
- le subsampling des lignes et des colonnes;
- les différentes pénalisations.

2.7.2 Les hyperparamètres

Hyperparamètre	Description	Valeur par défaut
booster	Le type de <i>weak learner</i> utilisé	'gbtree'
learning_rate	Le taux d'apprentissage	0.3
max_depth	La profondeur maximale des arbres	6
max_leaves	Le nombre maximal de feuilles des arbres	0
min_child_weight	Le poids minimal qu'une feuille doit contenir	1
n_estimators	Le nombre d'arbres	100
lambda ou reg_lambda	La pénalisation L2	1
alpha ou reg_alpha	La pénalisation L1	0
gamma	Le gain minimal nécessaire pour ajouter un noeud supplémentaire	0
tree_method	La méthode utilisée pour rechercher les splits	'hist'
max_bin	Le nombre utilisés pour discrétiser les variables continues	0
subsample	Le taux d'échantillonnage des données d'entraînement	1
sampling_method	La méthode utilisée pour échantillonner les données d'entraînement	'uniform'
colsample_bytree colsample_bylevel colsample_bynode	Taux d'échantillonnage des colonnes par arbre, par niveau et par noeud	1, 1 et 1
scale_pos_weight	Le poids des observations de la classe positive (classification uniquement)	1
sample_weight	La pondération des données d'entraînement	1
enable_categorical	Activer le support des variables catégorielles	False
max_cat_to_onehot	Nombre de modalités en-deça duquel XGBoost utilise le <i>one-hot-encoding</i>	A COM- PLETER
max_cat_threshold	Nombre maximal de catégories considérées dans le partitionnement optimal des variables catégorielles	A COM- PLETER

Table 1: Les principaux hyperparamètres d'XGBoost

2.7.3 La préparation des données

- les variables catégorielles:
 - ordonnées: passer en integer;
 - non-ordonnées: OHE ou approche de Fisher.

- les variables continues:
 - inutile de faire des transformations monotones.
 - Utile d'ajouter des transformations non monotones.

2.7.4 Les fonctions de perte

2.8 Comparaison RF-GBDT

Les forêts aléatoires et le *gradient boosting* paraissent très similaires au premier abord: il s'agit de deux approches ensemblistes, qui construisent des modèles très prédictifs performants en combinant un grand nombre d'arbres de décision. Mais en réalité, ces deux approches présentent plusieurs différences fondamentales:

- Les deux approches reposent sur des fondements théoriques différents: la loi des grands nombres pour les forêts aléatoires, la théorie de l'apprentissage statistique pour le *boosting*.
- Les arbres n'ont pas le même statut dans les deux approches. Dans une forêt aléatoire, les arbres sont entraînés indépendamment les uns des autres et constituent chacun un modèle à part entière, qui peut être utilisé, représenté et interprété isolément. Dans un modèle de *boosting*, les arbres sont entraînés séquentiellement, ce qui implique que chaque arbre n'a pas aucun sens indépendamment de l'ensemble des arbres qui l'ont précédé dans l'entraînement.
- Les points d'attention dans l'entraînement ne sont pas les mêmes: arbitrage puissance-corrélation dans la RF, arbitrage puissance-overfitting dans le *boosting*.
- *overfitting*: borne théorique à l'*overfitting* dans les RF, contre pas de borne dans le *boosting*. Deux conséquences: 1/ lutter contre l'*overfitting* est essentiel dans l'usage du *boosting*; 2/ le *boosting* est plus sensible au bruit et aux erreurs sur y que la RF.
- Conditions d'utilisation: la RF peut être utilisée en OOB, pas le *boosting*.
- Complexité d'usage: peu d'hyperparamètres dans les RF, contre un grand nombre dans le *boosting*.

2.9 Liste des hyperparamètres d'une RF

Source: P. Probst, M. N. Wright, and A.-L. Boulesteix [9]

- structure of each individual tree:
 - dudu
 - dudu
 - dudu
- structure and size of the forest:
- The level of randomness (je dirais plutôt :)

Bibliography

[1] R. Shapire, "The strength of weak learning," *Machine Learning*, vol. 5, no. 2, 1990.

- [2] L. Breiman, “Rejoinder: arcing classifiers,” *The Annals of Statistics*, vol. 26, no. 3, pp. 841–849, 1998.
- [3] A. J. Grove and D. Schuurmans, “Boosting in the limit: Maximizing the margin of learned ensembles,” in *AAAI/IAAI*, 1998, pp. 692–699.
- [4] Y. Freund and R. E. Schapire, “A decision-theoretic generalization of on-line learning and an application to boosting,” *Journal of computer and system sciences*, vol. 55, no. 1, pp. 119–139, 1997.
- [5] J. H. Friedman, “Greedy function approximation: a gradient boosting machine,” *Annals of statistics*, pp. 1189–1232, 2001.
- [6] T. Chen and C. Guestrin, “Xgboost: A scalable tree boosting system,” in *Proceedings of the 22nd acm sigkdd international conference on knowledge discovery and data mining*, 2016, pp. 785–794.
- [7] G. Ke *et al.*, “Lightgbm: A highly efficient gradient boosting decision tree,” *Advances in neural information processing systems*, vol. 30, 2017.
- [8] L. Prokhorenkova, G. Gusev, A. Vorobev, A. V. Dorogush, and A. Gulin, “CatBoost: unbiased boosting with categorical features,” *Advances in neural information processing systems*, vol. 31, 2018.
- [9] P. Probst, M. N. Wright, and A.-L. Boulesteix, “Hyperparameters and tuning strategies for random forest,” *Wiley Interdisciplinary Reviews: data mining and knowledge discovery*, vol. 9, no. 3, p. e1301, 2019.