Методы машинного обучения. Линейные ансамбли

Воронцов Константин Вячеславович
www.MachineLearning.ru/wiki?title=User:Vokov
вопросы к лектору: voron@forecsys.ru

материалы курса:
github.com/MSU-ML-COURSE/ML-COURSE-22-23
орг.вопросы по курсу: ml.cmc@mail.ru

ВМК МГУ • 22 ноября 2022

Содержание

Определение ансамбля

$X^\ell = (x_i, y_i)_{i=1}^\ell \subset X \times Y$ — обучающая выборка, $y_i = y^*(x_i)$

$a_t\colon X \to Y,\ \ t = 1, \dots, T$ — обучаемые *базовые алгоритмы*

Идея ансамбля: возможно ли из множества плохих алгоритмов a_t построить один хороший?

Декомпозиция базовых алгоритмов $a_t(x) = C(b_t(x))$

$a_t\colon X \xrightarrow{b_t} R \xrightarrow{C} Y$, где R — более удобное *пространство оценок*,

C — *решающее правило*, как правило, весьма простого вида

Ансамбль базовых алгоритмов $b_1, \dots, b_T$:

$$a(x) = C\bigl(F(b_1(x), \dots, b_T(x), x)\bigr),$$

$F\colon R^T \times X \to R$ — *агрегирующая функция* или *мета-алгоритм*

Пространства оценок и решающие правила

- **Пример 1:** классификация, Y — конечное множество, $R = Y$, $C(b) \equiv b$ — решающее правило не используется.
- **Пример 2:** классификация на 2 класса, $Y = \{-1, +1\}$,
$$a(x) = \operatorname{sign}\bigl(b(x)\bigr),$$
$R = \mathbb{R}$, $b\colon X \to \mathbb{R}$ — *real-valued classifier*, $C(b) \equiv \operatorname{sign}(b)$.
- **Пример 3:** классификация на M классов $Y = \{1, \dots, M\}$,
$$a(x) = \arg\max_{y \in Y} b_y(x),$$
$R = \mathbb{R}^M$, $b\colon X \to \mathbb{R}^M$, $C(b_1, \dots, b_M) \equiv \arg\max_{y \in Y} b_y$.
- **Пример 4:** регрессия, $Y = R = \mathbb{R}$, $C(b) \equiv b$ — решающее правило не нужно.

Агрегирующие (корректирующие) функции

Общие требования к агрегирующей функции:

- $F(b_1, \dots, b_T, x) \in \bigl[\min_t b_t, \max_t b_t\bigr]$ — среднее по Коши $\forall x$
- $F(b_1, \dots, b_T, x)$ монотонно не убывает по всем b_t

Примеры агрегирующих функций:

- простое голосование (simple voting):
$$F(b_1, \dots, b_T) = \frac{1}{T} \sum_{t=1}^{T} b_t$$
- взвешенное голосование (weighted voting):
$$F(b_1, \dots, b_T) = \sum_{t=1}^{T} \alpha_t b_t, \quad \sum_{t=1}^{T} \alpha_t = 1, \quad \alpha_t \geqslant 0$$
- смесь алгоритмов (mixture of experts)
с функциями компетентности (gating function) $g_t \colon X \to \mathbb{R}$
$$F(b_1, \dots, b_T, x) = \sum_{t=1}^{T} g_t(x) b_t(x)$$

Проблема разнообразия (diversity) базовых алгоритмов

Измерение с.в. ξ по независимым наблюдениям $\{\xi_t\}$:

- $\mathsf{E}\frac{1}{T}(\xi_1 + \cdots + \xi_T) = \mathsf{E}\xi$ — матожидание среднего
- $\mathsf{D}\frac{1}{T}(\xi_1 + \cdots + \xi_T) = \frac{1}{T}\mathsf{D}\xi$ — дисперсия $\to 0$ при $T \to \infty$

Но базовые алгоритмы не являются независимыми с.в.:

- решают одну и ту же задачу
- настраиваются на один целевой вектор (y_i)
- обычно выбираются из одной и той же модели

Способы повышения *разнообразия* базовых алгоритмов:

- обучение по различным (случайным) подвыборкам
- обучение по различным (случайным) наборам признаков
- обучение из разных параметрических моделей
- обучение с использованием рандомизации
- (иногда даже) обучение по зашумлённым данным

Методы стохастического ансамблирования

Способы повышения разнообразия с помощью рандомизации:

- bagging (bootstrap aggregating) — подвыборки обучающей выборки «с возвращением», в каждую выборку попадает $1 - \left(1 - \frac{1}{\ell}\right)^{\ell} \;\to\; 1 - \frac{1}{e} \;\approx\; 63.2\%$ объектов, при $\ell \to \infty$
- pasting — случайные обучающие подвыборки
- random subspaces — случайные подмножества признаков
- random patches — случ. подмн-ва и объектов, и признаков
- cross-validated committees — выборка разбивается на k блоков (k-fold) и делается k обучений без одного блока

Пусть $\mu\colon (G, U) \mapsto b$ — метод обучения по подвыборке $U \subseteq X^{\ell}$, использующий только признаки из $G \subseteq F^n = \{f_1, \ldots, f_n\}$

Tin Kam Ho. The random subspace method for constructing decision forests. 1998.
Leo Breiman. Bagging predictors // Machine Learning. 1996.

Методы стохастического ансамблирования в одном псевдо-коде

Вход: обучающая выборка X^ℓ; параметры: T,
ℓ' — объём обучающих подвыборок,
n' — размерность признаковых подпространств,
ε_1 — порог качества базовых алгоритмов на обучении,
ε_2 — порог качества базовых алгоритмов на контроле;

Выход: базовые алгоритмы b_t, $t = 1, \dots, T$;

для всех $t = 1, \dots, T$:
- $U_t :=$ случайная подвыборка объёма ℓ' из X^ℓ;
- $G_t :=$ случайное подмножество мощности n' из F^n;
- $b_t := \mu(G_t, U_t)$;
- **если** $Q(b_t, U_t) > \varepsilon_1$ **то** не включать b_t в ансамбль;
- **если** $Q(b_t, X^\ell \setminus U_t) > \varepsilon_2$ **то** не включать b_t в ансамбль;

Ансамбль — простое голосование: $b(x) = \frac{1}{T} \sum\limits_{t=1}^{T} b_t(x)$

Несмещённая оценка ошибок

Out-of-bag — несмещённая оценка ансамбля на объекте:

$$\mathrm{OOB}(x_i) = \frac{1}{|T_i|} \sum_{t \in T_i} b_t(x_i), \qquad T_i = \{t \colon x_i \notin U_t\}$$

Несмещённая оценка ошибки ансамбля на обучающей выборке:

$$\mathrm{OOB}(X^\ell) = \sum_{i=1}^{\ell} \mathscr{L}\bigl(\mathrm{OOB}(x_i), y_i\bigr),$$

где $\mathscr{L}\bigl(b(x_i), y_i\bigr)$ — значение функции потерь на объекте x_i.

Оценивание важности признаков f_j, $j = 1, \dots, n$:

$$\mathrm{importance}_j = \frac{\mathrm{OOB}^j(X^\ell) - \mathrm{OOB}(X^\ell)}{\mathrm{OOB}(X^\ell)} \cdot 100\%,$$

где при вычислении $b_t(x_i)$ для OOB^j значения признака f_j случайным образом перемешиваются на всех объектах $x_i \neq U_t$.

Преобразование простого голосования во взвешенное

- **Линейная модель** над готовыми признаками $b_t(x)$:

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

- **Обучение:** МНК для регрессии, LR для классификации:

$$Q(\alpha, X^\ell) = \sum_{i=1}^{\ell} \mathscr{L}\bigl(b(x_i), y_i\bigr) \to \min_{\alpha}.$$

Регуляризация: $\alpha_t \geqslant 0$ либо LASSO: $\sum_{t=1}^{T} |\alpha_t| \leqslant \varkappa$.

- **Наивный байесовский классификатор** предполагает независимость с.в. $b_t(x)$ и даёт аналитическое решение:

$$\alpha_t = \ln \frac{1 - p_t}{p_t}, \quad t = 1, \dots, T,$$

p_t — оценка вероятности ошибки базового алгоритма b_t.

Случайный лес (Random Forest)

Обучение случайного леса:

- бэггинг над решающими деревьями, без pruning
- признак в каждой вершине дерева выбирается из случайного подмножества k из n признаков. По умолчанию $k = \lfloor n/3 \rfloor$ для регрессии, $k = \lfloor \sqrt{n} \rfloor$ для классификации

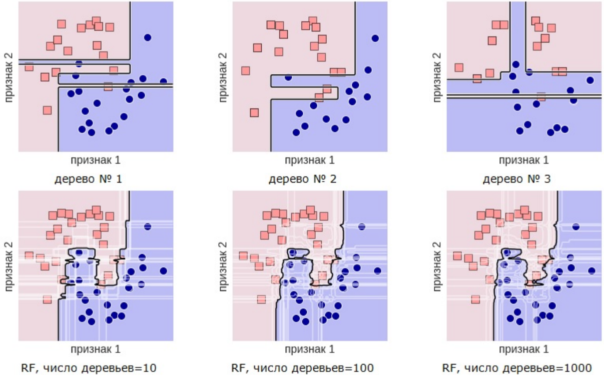
Параметры, которые можно настраивать (в частности, по OOB):

- число T деревьев
- число k случайно выбираемых признаков
- максимальная глубина деревьев
- минимальное число объектов в расщепляемой подвыборке
- минимальное число объектов в листьях
- критерий расщепления: MSE для регрессии, энтропийный или Джини для классификации

Breiman L. Random Forests. Machine Learning, 2001.

Постепенное сглаживание разделяющей поверхности

Пример разделения выборки с помощью отдельных деревьев (показаны соответствующие бутстреп-подвыборки) и случайного леса с числом деревьев 10, 100, 1000:



---

https://dyakonov.org/2019/04/19/ансамбли-в-машинном-обучении

Разновидности решающих лесов

- Случайный лес (Random Forest)
- Использование большого числа простых решающих деревьев в качестве признаков, в любом классификаторе.
- Oblique Random Forest, Rotation Forest
  $f_v(x)$ — линейные комбинации признаков, выбираемые по энтропийному критерию информативности.
- Решающий список из решающих деревьев:
  — при образовании статистически ненадёжного листа этот лист заменяется переходом к следующему дереву;
  — следующее дерево строится по объединению подвыборок, прошедших через ненадёжные листы предыдущего дерева.

https://en.wikipedia.org/wiki/Random_forest

Преимущества и ограничения стохастического ансамблирования

Преимущества:

- метод-обёртка (envelop) над базовым методом обучения
- подходит для классификации, регрессии и других задач
- простая реализация и простое распараллеливание
- возможность получения несмещённых оценок OOB
- возможность оценивания важности признаков
- RF — один из лучших универсальных методов в ML

Ограничения:

- требуется ооооочень много базовых алгоритмов
- трудно агрегировать устойчивые базовые методы обучения

---

https://dyakonov.org/2016/11/14/случайный-лес-random-forest

Бустинг для задачи классификации с двумя классами

Возьмём $Y = \{\pm 1\}$, $b_t \colon X \to \{-1, 0, +1\}$, $C(b) = \operatorname{sign}(b)$.
$b_t(x) = 0$ — отказ (лучше промолчать, чем соврать).

Взвешенное голосование:

$$a(x) = \operatorname{sign}\left(\sum_{t=1}^{T} \alpha_t b_t(x)\right), \quad x \in X.$$

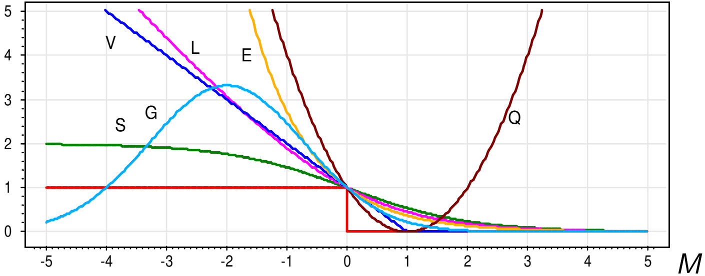
Функционал качества композиции — число ошибок на X^ℓ:

$$Q_T = \sum_{i=1}^{\ell} \left[y_i \sum_{t=1}^{T} \alpha_t b_t(x_i) < 0 \right].$$

Две основные эвристики бустинга:

- фиксация $\alpha_1 b_1(x), \ldots, \alpha_{t-1} b_{t-1}(x)$ при добавлении $\alpha_t b_t(x)$;
- гладкая аппроксимация пороговой функции потерь $[M \leqslant 0]$.

Гладкие аппроксимации пороговой функции потерь $[M < 0]$



$E(M) = e^{-M}$ — экспоненциальная (AdaBoost);
$L(M) = \log_2(1 + e^{-M})$ — логарифмическая (LogitBoost);
$Q(M) = (1 - M)^2$ — квадратичная (GentleBoost);
$G(M) = \exp\bigl(-cM(M + s)\bigr)$ — гауссовская (BrownBoost);
$S(M) = 2(1 + e^{M})^{-1}$ — сигмоидная;
$V(M) = (1 - M)_+$ — кусочно-линейная (из SVM);

Экспоненциальная аппроксимация пороговой функции потерь

Оценка функционала качества Q_T сверху:

$$Q_T \leqslant \widetilde{Q}_T = \sum_{i=1}^{\ell} \underbrace{\exp\Bigl(-y_i \sum_{t=1}^{T-1} \alpha_t b_t(x_i)\Bigr)}_{w_i} \exp\bigl(-y_i \alpha_T b_T(x_i)\bigr)$$

Нормированные веса: $\widetilde{W}^\ell = (\tilde{w}_1, \ldots, \tilde{w}_\ell)$, $\tilde{w}_i = w_i \bigm/ \sum_{j=1}^{\ell} w_j$.

Взвешенная доля ошибочных (negative) и правильных (positive) классификаций с нормированными весами $U^\ell = (u_1, \ldots, u_\ell)$:

$$N(b, U^\ell) = \sum_{i=1}^{\ell} u_i \bigl[b(x_i) = -y_i\bigr]; \quad P(b, U^\ell) = \sum_{i=1}^{\ell} u_i \bigl[b(x_i) = y_i\bigr].$$

$1 - N - P$ — взвешенная доля отказов от классификации.

Основная теорема бустинга (для AdaBoost)

Пусть $\mathscr{B}$ — *достаточно богатое* семейство базовых алгоритмов.

Теорема (Freund, Schapire, 1996)

Пусть для любого нормированного вектора весов U^ℓ существует алгоритм $b \in \mathscr{B}$, классифицирующий выборку хотя бы немного лучше, чем наугад: $P(b; U^\ell) > N(b; U^\ell)$.

Тогда минимум функционала $\widetilde{Q}_T$ достигается при

$$b_T = \arg\max_{b \in \mathscr{B}} \sqrt{P(b; \widetilde{W}^\ell)} - \sqrt{N(b; \widetilde{W}^\ell)}.$$

$$\alpha_T = \frac{1}{2} \ln \frac{P(b_T; \widetilde{W}^\ell)}{N(b_T; \widetilde{W}^\ell)}.$$

Доказательство (шаг 1 из 2)

Воспользуемся тождеством $\forall\alpha \in \mathbb{R},\ \ \forall b \in \{-1, 0, +1\}$:
$e^{-\alpha b} = e^{-\alpha}[b{=}1] + e^{\alpha}[b{=}{-1}] + [b{=}0]$.

Положим для краткости $\alpha = \alpha_T$ и $b_i = b_T(x_i)$. Тогда

$$\widetilde{Q}_T = \Bigl(e^{-\alpha} \underbrace{\sum_{i=1}^{\ell} \tilde{w}_i [b_i{=}y_i]}_{P} + e^{\alpha} \underbrace{\sum_{i=1}^{\ell} \tilde{w}_i [b_i{=}{-y_i}]}_{N} + \underbrace{\sum_{i=1}^{\ell} \tilde{w}_i [b_i{=}0]}_{1-P-N}\Bigr) \underbrace{\sum_{i=1}^{\ell} w_i}_{\widetilde{Q}_{T-1}}$$

$$= \bigl(e^{-\alpha} P + e^{\alpha} N + (1 - P - N)\bigr)\, \widetilde{Q}_{T-1} \to \min_{\alpha, b}.$$

$$\frac{\partial}{\partial\alpha} \widetilde{Q}_T = \bigl(-e^{-\alpha} P + e^{\alpha} N\bigr)\, \widetilde{Q}_{T-1} = 0 \ \Rightarrow\ e^{-\alpha} P = e^{\alpha} N \ \Rightarrow\ e^{2\alpha} = \frac{P}{N}.$$

Получили требуемое: $\boxed{\alpha_T = \frac{1}{2} \ln \frac{P}{N}}$.

Доказательство (шаг 2 из 2)

Подставим оптимальное значение $\alpha = \frac{1}{2}\ln\frac{P}{N}$ обратно в $\widetilde{Q}_T$:

$$\begin{aligned}
\widetilde{Q}_T &= \bigl(e^{-\alpha}P + e^{\alpha}N + (1 - P - N)\bigr)\widetilde{Q}_{T-1} = \\
&= \Bigl(1 + \sqrt{\tfrac{N}{P}}P + \sqrt{\tfrac{P}{N}}N - P - N\Bigr)\widetilde{Q}_{T-1} = \\
&= \Bigl(1 - \bigl(\sqrt{P} - \sqrt{N}\bigr)^2\Bigr)\widetilde{Q}_{T-1} \to \min_b .
\end{aligned}$$

Поскольку $\widetilde{Q}_{T-1}$ не зависит от α_T и b_T, минимизация $\widetilde{Q}_T$ эквивалентна либо максимизации $\sqrt{P} - \sqrt{N}$ при $P > N$, либо максимизации $\sqrt{N} - \sqrt{P}$ при $P < N$, однако второй случай исключён условием теоремы.

Получили $\boxed{b_T = \arg\max_b \sqrt{P} - \sqrt{N}}$. Теорема доказана.

Следствие 1. Сходимость

Теорема

Если на каждом шаге семейство $\mathscr{B}$ и метод обучения обеспечивают построение базового алгоритма b_t такого, что

$$\sqrt{P(b_t; \widetilde{W}^\ell)} - \sqrt{N(b_t; \widetilde{W}^\ell)} = \gamma_t > \gamma$$

при некотором $\gamma > 0$, то за конечное число шагов будет построен корректный алгоритм $a(x)$.

Доказательство. Q_T сходится к нулю со скоростью геометрической прогрессии:

$$Q_{T+1} \leqslant \widetilde{Q}_{T+1} = \widetilde{Q}_T(1-\gamma^2) \leqslant \cdots \leqslant \widetilde{Q}_1(1-\gamma^2)^T.$$

Наступит момент, когда $\widetilde{Q}_T < 1$.
Но тогда $Q_T = 0$, поскольку $Q_T \in \{0, 1, \ldots, \ell\}$.

Следствие 2. Исходный (классический) вариант AdaBoost

Пусть отказов нет, $b_t\colon X \to \{\pm 1\}$. Тогда $P = 1 - N$.

Теорема (Freund, Schapire, 1995)

Пусть для любого нормированного вектора весов U^ℓ существует алгоритм $b \in \mathscr{B}$, классифицирующий выборку хотя бы немного лучше, чем наугад: $N(b; U^\ell) < \frac{1}{2}$.

Тогда минимум функционала $\widetilde{Q}_T$ достигается при

$$b_T = \arg\min_{b\in\mathscr{B}} N(b; \widetilde{W}^\ell).$$

$$\alpha_T = \frac{1}{2}\ln\frac{1 - N(b_T; \widetilde{W}^\ell)}{N(b_T; \widetilde{W}^\ell)}.$$

Алгоритм AdaBoost (в исходном варианте)

Вход: обучающая выборка X^ℓ; параметр T;
Выход: базовые алгоритмы и их веса $\alpha_t b_t$, $t = 1, \dots, T$;

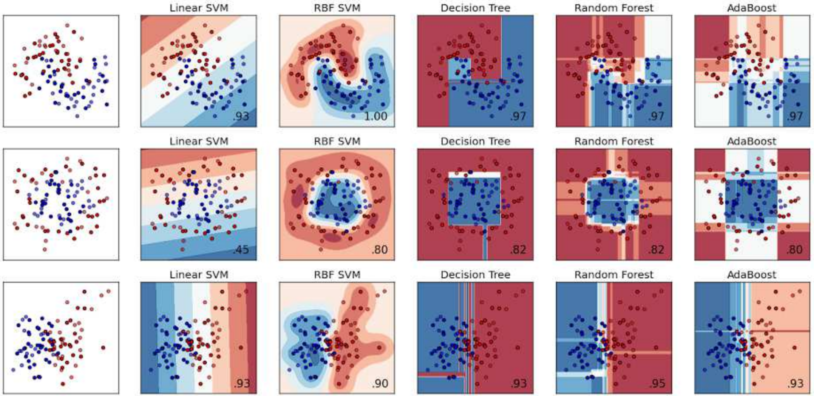
инициализировать веса объектов: $w_i := 1/\ell$, $i = 1, \dots, \ell$;
для всех $t = 1, \dots, T$:
- обучить базовый алгоритм:
$$b_t := \arg\min_b N(b; W^\ell);$$
$$\alpha_t := \frac{1}{2} \ln \frac{1 - N(b_t; W^\ell)}{N(b_t; W^\ell)};$$
- обновить веса объектов:
$$w_i := w_i \exp\bigl(-\alpha_t y_i b_t(x_i)\bigr), \quad i = 1, \dots, \ell;$$
- нормировать веса объектов:
$$w_0 := \textstyle\sum_{j=1}^{\ell} w_j;$$
$$w_i := w_i / w_0, \quad i = 1, \dots, \ell;$$

Эвристики и рекомендации

- **Базовые классификаторы (weak classifiers):**
  — решающие деревья — используются чаще всего;
  — пороговые правила, т.н. «решающие пни» (data stumps)
  $$\mathscr{B} = \Bigl\{ b(x) = \bigl[f_j(x) \lessgtr \theta \bigr] \Bigm| j = 1, \ldots, n,\ \theta \in \mathbb{R} \Bigr\};$$
  — для SVM бустинг не эффективен.
- **Отсев шума:** отбросить объекты с наибольшими w_i.
- **Модификация формулы для α_t на случай $N = 0$:**
  $$\alpha_t := \frac{1}{2} \ln \frac{1 - N(b_t; W^\ell) + \frac{1}{\ell}}{N(b_t; W^\ell) + \frac{1}{\ell}};$$
- **Дополнительный критерий остановки:**
  увеличение частоты ошибок на контрольной выборке.

Случайный лес и бустинг в сравнении с другими методами

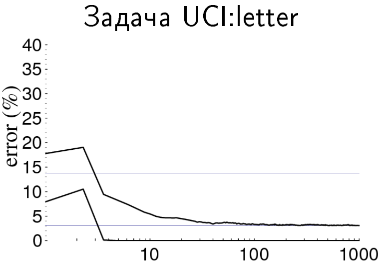
Эксперименты на трёх двумерных модельных выборках:

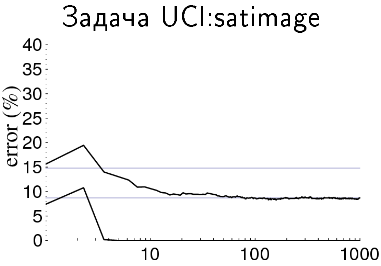


Решения могут выглядеть странно... тем не менее, RF и бустинг — одни из самых сильных универсальных методов в ML

Эксперименты с алгоритмом классификации AdaBoost

Удивительное отсутствие переобучения вплоть до $T = 1000$ (нижняя кривая — обучение, верхняя – тест):



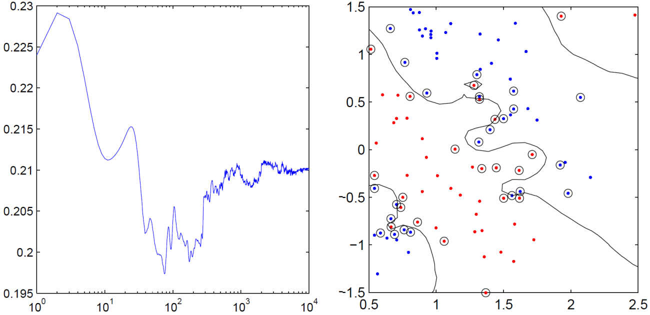


До этих экспериментов считалось, что увеличение числа параметров неизбежно приводит к переобучению

Schapire, Freund, Lee, Bartlett. Boosting the margin: a new explanation for the effectiveness of voting methods // Annals of Statistics, 1998.

Иногда AdaBoost всё же переобучается...

... но не сильно, и на тысячах базовых классификаторах.
Слева: зависимость ошибки на тестовой выборке от $|T|$.
Справа: разделяющая поверхность при переобучении.



G.Rätsch, T.Onoda, K.R.Müller. An improvement of AdaBoost to avoid overfitting. 1998.

Обоснование бустинга (случай классификации на 2 класса)

Усиленная *частота ошибок* классификатора $\operatorname{sign} b(x)$, $\; b \in \mathscr{B}$:

$$\nu_\theta(b, X^\ell) = \frac{1}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} \bigl[b(x_i) y_i \leqslant \theta\bigr], \quad \theta > 0.$$

Обычная частота ошибок $\nu_0(b, X^\ell) \leqslant \nu_\theta(b, X^\ell)$ при $\theta > 0$.

Теорема (Freund, Schapire, Bartlett, 1998)

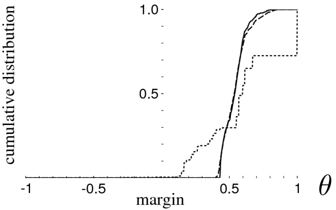
Если $|\mathscr{B}| < \infty$, то $\forall \theta > 0, \;\; \forall \eta \in (0, 1)$ с вероятностью $1 - \eta$

$$\mathsf{P}[ya(x) < 0] \leqslant \nu_\theta(a, X^\ell) + C \sqrt{\frac{\ln |\mathscr{B}| \ln \ell}{\ell \theta^2} + \frac{1}{\ell} \ln \frac{1}{\eta}}$$

Основной вывод: оценка зависит от $|\mathscr{B}|$, но не от T.
Голосование не увеличивает сложность семейства базовых алгоритмов, а лишь усредняет их ответы.

Обоснование бустинга: что же всё-таки происходит?

Распределение отступов:
доля объектов, имеющих отступ меньше заданного θ после 5, 100, 1000 итераций (Задача UCI:vehicle)

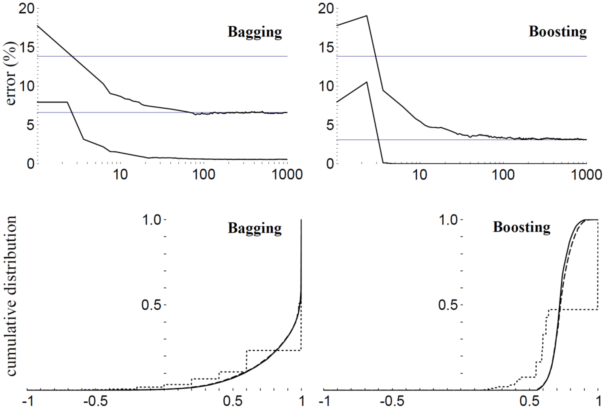


- С ростом T распределение отступов сдвигается вправо, то есть бустинг «раздвигает» классы в пространстве векторов растущей размерности $\bigl(b_1(x), \ldots, b_T(x)\bigr)$
- Значит, в оценке можно уменьшать второй член, увеличивая θ при неизменной $\nu_\theta(a, X^\ell) = \nu_0(a, X^\ell)$.
- Можно уменьшить второй член, если уменьшить $|\mathscr{B}|$, то есть взять простое семейство базовых алгоритмов.

Schapire R., Freund Y., Lee W. S., Bartlett P. Boosting the margin: a new explanation for the effectiveness of voting methods. 1998.

Бэггинг не столь успешно раздвигает классы

Ошибки на обучении и тесте. Снизу распределение отступов.



Schapire R., Freund Y., Lee W. S., Bartlett P. Boosting the margin: a new explanation for the effectiveness of voting methods. 1998.

Недостатки AdaBoost

- Чрезмерная чувствительность к выбросам из-за e^{-M}
- Неинтерпретируемое нагромождение из сотен алгоритмов
- Не удаётся строить короткие композиции из «сильных» алгоритмов типа SVM (только длинные из «слабых»)
- Требуются достаточно большие обучающие выборки (бэггинг обходится более короткими)

Способы устранения:

- Отсев выбросов по критерию увеличения веса w_i
- Градиентный бустинг с произвольными функциями потерь
- Явная оптимизация распределения отступов

Несколько эмпирических наблюдений:

- Веса алгоритмов не столь важны для выравнивания отступов
- Веса объектов не столь важны для обеспечения различности

Оптимизация распределения отступов на каждом шаге

Идея: явно управлять распределением отступов, максимизируя различность базовых алгоритмов и минимизируя их число.

Возьмём $Y = \{\pm 1\}$, $b(x) = \frac{1}{T}\sum_{t=1}^{T} b_t(x)$, $C(b) = \operatorname{sign}(b)$.

Критерий качества ансамбля — число ошибок на обучении:

$$Q(a, X^\ell) = \sum_{i=1}^{\ell} \bigl[y_i a(x_i) < 0\bigr] = \sum_{i=1}^{\ell} \Bigl[\underbrace{y_i b_1(x_i) + \dots + y_i b_T(x_i)}_{M_{iT}} < 0\Bigr],$$

$M_{it} = y_i b_1(x_i) + \dots + y_i b_t(x_i)$ — *отступ* (margin) объекта x_i.

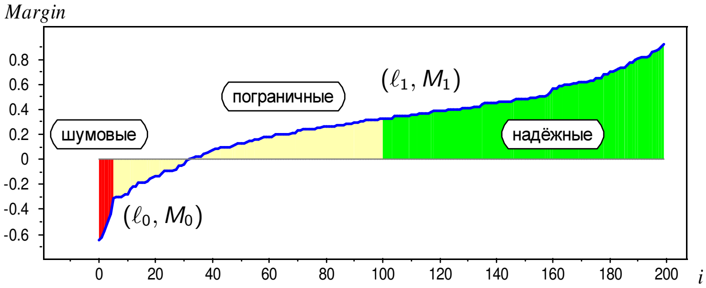
Эвристика: b_t компенсирует ошибки ансамбля,

$$Q(b_t, U_t) = \sum_{x_i \in U_t} \bigl[y_i b_t(x_i) < 0\bigr] \to \min_{b_t},$$

$U_t = \bigl\{x_i \colon M_0 < M_{i,t-1} \leqslant M_1\bigr\}$, M_0, M_1 — параметры метода

Формирование выборки для обучения базового алгоритма

Упорядочим объекты по возрастанию отступов $M_{i,t-1}$:



Принцип максимизации и выравнивания отступов.

Два случая, когда b_t на объекте x_i обучать не надо:

$M_{i,t-1} < M_0$, $i < \ell_0$ — объект x_i шумовой;

$M_{i,t-1} > M_1$, $i > \ell_1$ — объект x_i надёжно классифицируется.

Алгоритм ComBoost (Committee Boosting)

Вход: обучающая выборка X^ℓ; параметры $T, \ell_0, \ell_1, \ell_2, \Delta\ell$;
Выход: $b_1, \ldots, b_T$;

$b_1 := \arg\min\limits_b Q(b, X^\ell)$; отступы $M_i = y_i b_1(x_i)$, $i = 1, \ldots, \ell$;

для всех $t = 2, \ldots, T$:
- упорядочить выборку X^ℓ по возрастанию отступов M_i;
- **для всех** $k = \ell_1, \ldots, \ell_2$ с шагом $\Delta\ell$:
  - $U_t = \bigl\{x_i \in X^\ell \colon \ell_0 \leqslant i \leqslant k\bigr\}$;
  - $b_{tk} := \arg\min\limits_b Q(b, U_t)$ — инкрементное обучение;
- выбрать наилучший $b_t \in \{b_{tk}\}$ по критерию Q;
- обновить отступы: $M_i := M_i + y_i b_t(x_i)$, $i = 1, \ldots, \ell$;
- опция: скорректировать значения параметров $\ell_0, \ell_1, \Delta\ell$;

пока Q существенно улучшается.

Результаты эксперимента на 4 задачах из репозитория UCI

По 50 случайным разбиениям «обучение : контроль» = 4 : 1

	ionoshere	pima	bupa	votes
SVM	12,9	24,2	42	4,6
AdaBoost [SVM]	15	22,7	**30,6**	4
AdaBoost [SVM], $\lvert T \rvert$ =	(65)	(18)	(15)	(8)
ComBoost [SVM]	**12,3**	**22,5**	30,9	**3,8**
ComBoost [SVM], $\lvert T \rvert$ =	(5)	**(2)**	(5)	(3)

- При одинаковом критерии остановки $|T|$ существенно меньше у ComBoost по сравнению с AdaBoost
- ComBoost способен строить ансамбли из небольшого числа сильных и устойчивых базовых алгоритмов

Маценов А. А. Комитетный бустинг: минимизация числа базовых алгоритмов при простом голосовании. ММРО-13, 2007.

Обобщение для задач с произвольным числом классов

Пусть теперь $Y = \{1, \ldots, M\}$.

Композиция — простое голосование, причём
каждый базовый алгоритм b_{yt} голосует только за свой класс y:

$$a(x) = \arg\max_{y \in Y} \Gamma_y(x); \qquad \Gamma_y(x) = \frac{1}{|T_y|} \sum_{t \in T_y} b_{yt}(x).$$

В алгоритме только два изменения:
— изменится определение отступа M_i:

$$M_i = \Gamma_{y_i}(x_i) - \max_{y \in Y \setminus \{y_i\}} \Gamma_y(x_i).$$

— в алгоритме ComBoost на шаге 3 придётся решать,
за какой класс строить очередной базовый алгоритм,
кроме того, немного изменится шаг 7 (пересчёт отступов).

Резюме

- Ансамбли позволяют решать сложные задачи, которые плохо решаются отдельными базовыми алгоритмами
- Обычно ансамбль строится *алгоритмом-обёрткой* (envelop): базовые алгоритмы обучаются готовыми методами
- Базовые алгоритмы: компромисс качество/различность
- Две основные эвристики бустинга (и не только AdaBoost):
  — обучать базовые алгоритмы по одному
  — использовать гладкую замену пороговой функции потерь
- Важное открытие середины 90-х: обобщающая способность бустинга не ухудшается с ростом сложности T
- Практическое сравнение бустинга и бэггинга:
  — бустинг лучше для классов с границами сложной формы
  — бэггинг лучше для коротких обучающих выборок
  — бэггинг легче распараллеливается