

# Методы машинного обучения. Продвинутые методы ансамблирования

Воронцов Константин Вячеславович  
[www.MachineLearning.ru/wiki?title=User:Vokov](http://www.MachineLearning.ru/wiki?title=User:Vokov)  
вопросы к лектору: [voron@forecsys.ru](mailto:voron@forecsys.ru)

материалы курса:  
[github.com/MSU-ML-COURSE/ML-COURSE-23-24](https://github.com/MSU-ML-COURSE/ML-COURSE-23-24)  
орг.вопросы по курсу: [ml.cmc@mail.ru](mailto:ml.cmc@mail.ru)

## 1 Взвешенное голосование

- Ещё одно теоретическое обоснование ансамблей
- Градиентный бустинг
- Варианты градиентного бустинга

## 2 Алгоритм CatBoost

- Упорядоченный бустинг
- Категориальные признаки
- Небрежные решающие деревья

## 3 Нелинейное ансамблирование

- Стэкинг
- Линейный стэкинг, взвешенный по признакам
- Смеси с функциями компетентности

## Напоминание. Определение ансамбля

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

$a_t: X \rightarrow Y$ ,  $t = 1, \dots, T$  — обучаемые базовые алгоритмы

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

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

$a_t: X \xrightarrow{b_t} R \xrightarrow{C} Y$ , где  $R$  — более удобное пространство оценок,  $C$  — решающее правило, как правило, весьма простого вида

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

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

$F: R^T \times X \rightarrow R$  — агрегирующая функция или мета-алгоритм

## Напоминание. Агрегирующие (корректирующие) функции

Общие требования к агрегирующей функции:

- $F(b_1, \dots, b_T, x) \in [\min_t b_t, \max_t b_t]$  — 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):

$$F(b_1, \dots, b_T) = \sum_{t=1}^T \alpha_t b_t, \quad \sum_{t=1}^T \alpha_t = 1, \quad \alpha_t \geq 0$$

- смесь алгоритмов (mixture of experts)

с функциями компетентности (gating function)  $g_t: X \rightarrow \mathbb{R}$

$$F(b_1, \dots, b_T, x) = \sum_{t=1}^T g_t(x) b_t(x)$$

## Анализ смещения–разброса (bias–variance)

Задача регрессии:  $Y = \mathbb{R}$

Квадратичная функция потерь:  $\mathcal{L}(a, y) = (a(x) - y)^2$

Вероятностная постановка:  $X^\ell = (x_i, y_i)_{i=1}^\ell \sim p(x, y)$

Метод обучения:  $\mu: 2^X \rightarrow A$ , т.е. выборка  $\mapsto$  алгоритм

Задача минимизации среднеквадратичного риска:

$$R(a) = E_{x,y}(a(x) - y)^2 = \int_X \int_Y (a(x) - y)^2 p(x, y) dx dy \rightarrow \min_a$$

Идеальный минимизатор среднеквадратичного риска:

$$a^*(x) = E(y|x) = \int_Y y p(y|x) dy$$

Основная мера качества метода обучения  $\mu$ :

$$Q(\mu) = E_{X^\ell} R(\mu(X^\ell)) = E_{X^\ell} E_{x,y} (\mu(X^\ell)(x) - y)^2$$

## Разложение ошибки на шум, смещение и разброс

$a^*(x) = E(y|x)$  — неизвестная идеальная зависимость  $y$  от  $x$

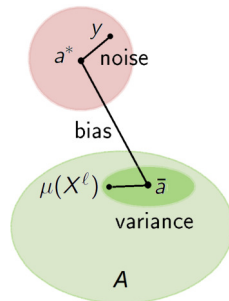
$y(x) \sim p(y|x)$  — наблюдаемый ответ на объекте  $x$

$a = \mu(X^\ell)$  — аппроксимация, выбранная по  $X^\ell$  из семейства  $A$

$\bar{a}(x) = E_{X^\ell}(a(x))$  — средний ответ обученного алгоритма

**Теорема.** При квадратичной функции потерь для любого  $\mu$

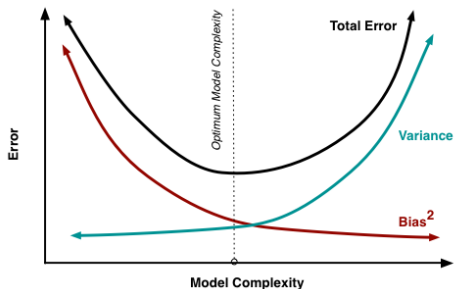
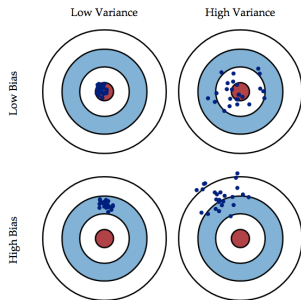
$$\begin{aligned} Q(\mu) = & \underbrace{E_{x,y}(a^*(x) - y)^2}_{\text{шум (noise)}} + \\ & + \underbrace{E_{x,y}(\bar{a}(x) - a^*(x))^2}_{\text{смещение (bias)}} + \\ & + \underbrace{E_{x,y} E_{X^\ell}(\mu(X^\ell)(x) - \bar{a}(x))^2}_{\text{разброс (variance)}} \end{aligned}$$



## Разложение ошибки на шум, смещение и разброс

Качественное понимание: по мере роста сложности модели

- смещение (bias) уменьшается
- разброс (variance) увеличивается



## Анализ смещения–разброса для простого голосования

Обучение базовых алгоритмов по случайным подвыборкам:

$$b_t = \mu(X_t^k), \quad X_t^k \sim X^\ell, \quad t = 1, \dots, T$$

Ансамбль — простое голосование:  $a_T(x) = \frac{1}{T} \sum_{t=1}^T b_t(x)$

**Смещение** ансамбля совпадает со смещением отдельного базового алгоритма:

$$\text{bias} = E_{x,y} (a^*(x) - E_{X^\ell} b_t(x))^2$$

**Разброс** состоит из дисперсии и различности (ковариации):

$$\begin{aligned} \text{variance} = & \frac{1}{T} E_{x,y} E_{X^\ell} (b_t(x) - E_{X^\ell} b_t(x))^2 + \\ & + \frac{T-1}{T} E_{x,y} E_{X^\ell} (b_t(x) - E_{X^\ell} b_t(x)) (b_s(x) - E_{X^\ell} b_s(x)) \end{aligned}$$



## Почему сложные ансамбли не переобучаются?

### С позиций анализа отступов:

- ансамблирование не увеличивает сложность модели
- но с каждой итерацией увеличивает зазор между классами

### С позиций анализа смещения–разброса:

- разнообразие базовых алгоритмов уменьшает разброс
- бэггинг уменьшает только разброс
- бустинг уменьшает и смещение, и разброс

### Практическое сравнение: boosting / bagging / RSM

- бустинг лучше для классов с границами сложной формы
- бэггинг и RSM лучше для коротких обучающих выборок
- RSM лучше, когда много неинформативных признаков
- бэггинг параллельно обучает базовые алгоритмы  $b_t$
- бустинг обучает каждый  $b_t$  параллельно по частям выборки

## Градиентный бустинг для произвольной функции потерь

Линейный ансамбль базовых алгоритмов  $b_t$  из семейства  $\mathcal{B}$ :

$$a_T(x) = \sum_{t=1}^T \alpha_t b_t(x), \quad x \in X, \quad b_t: X \rightarrow \mathbb{R}, \quad \alpha_t \in \mathbb{R}_+$$

**Эвристика:** обучаем  $\alpha_T, b_T$  при фиксированных предыдущих.  
Критерий качества с заданной гладкой функцией потерь  $\mathcal{L}(b, y)$ :

$$Q(\alpha, b; X^\ell) = \sum_{i=1}^{\ell} \mathcal{L} \left( \underbrace{\sum_{t=1}^{T-1} \alpha_t b_t(x_i)}_{a_{T-1,i}} + \alpha b(x_i), y_i \right) \rightarrow \min_{\alpha, b}.$$

$\underbrace{\hspace{10em}}_{a_{T,i}}$

$(a_{T-1,i})_{i=1}^{\ell}$  — вектор текущего приближения

$(a_{T,i})_{i=1}^{\ell}$  — вектор следующего приближения

---

*G.Friedman.* Greedy function approximation: a gradient boosting machine. 1999.

## Параметрическая аппроксимация градиентного шага

Градиентный метод минимизации  $Q(f) \rightarrow \min, f \in \mathbb{R}^\ell$ :

$a_{0,i} :=$  начальное приближение;

$a_{T,i} := a_{T-1,i} - \alpha g_i, \quad i = 1, \dots, \ell;$

$g_i = \mathcal{L}'_f(a_{T-1,i}, y_i)$  — компоненты вектора градиента,  
 $\alpha$  — градиентный шаг.

Это очень похоже на добавление одного базового алгоритма:

$a_{T,i} := a_{T-1,i} + \alpha b(x_i), \quad i = 1, \dots, \ell$

Идея: будем искать такой базовый алгоритм  $b_T \in \mathcal{B}$ , чтобы вектор  $(b_T(x_i))_{i=1}^\ell$  приближал вектор антиградиента  $(-g_i)_{i=1}^\ell$ :

$$b_T := \arg \min_{b \in \mathcal{B}} \sum_{i=1}^{\ell} (b(x_i) + g_i)^2$$

## Алгоритм градиентного бустинга (Gradient Boosting)

**Вход:** обучающая выборка  $X^\ell$ ; **параметр**  $T$ ;

**Выход:** базовые алгоритмы и их веса  $\alpha_t b_t$ ,  $t = 1, \dots, T$ ;

инициализация:  $a_{0,i} := 0$ ,  $i = 1, \dots, \ell$ ;

**для всех**  $t = 1, \dots, T$

базовый алгоритм, приближающий антиградиент:

$$b_t := \arg \min_{b \in \mathcal{B}} \sum_{i=1}^{\ell} (b(x_i) + \mathcal{L}'(a_{t-1,i}, y_i))^2;$$

задача одномерной минимизации:

$$\alpha_t := \arg \min_{\alpha > 0} \sum_{i=1}^{\ell} \mathcal{L}(a_{t-1,i} + \alpha b_t(x_i), y_i);$$

обновление вектора значений на объектах выборки:

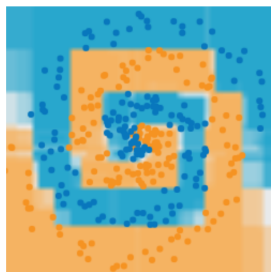
$$a_{t,i} := a_{t-1,i} + \alpha_t b_t(x_i); \quad i = 1, \dots, \ell;$$

Каждый следующий базовый алгоритм обучается так, чтобы по возможности исправить ошибки предыдущих алгоритмов.

## Пример. Классификация синтетической выборки

100 деревьев глубины 5

Prediction:

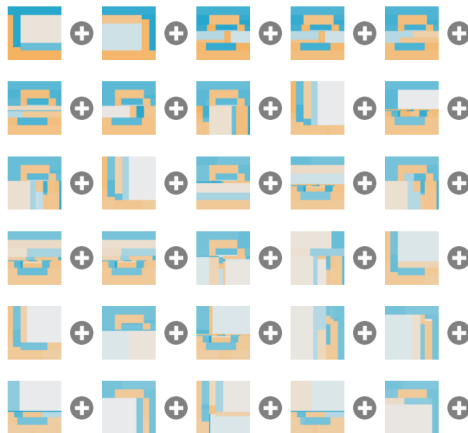


↑  
predictions of GB (all 100 trees)

train loss: 0.022      test loss: 0.218



Decision functions of first 30 trees

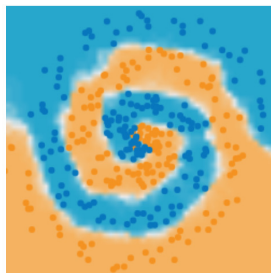


[http://arogozhnikov.github.io/2016/07/05/gradient\\_boosting\\_playground.html](http://arogozhnikov.github.io/2016/07/05/gradient_boosting_playground.html)

## Пример. Классификация синтетической выборки

100 деревьев глубины 5, с подбором вращения каждого дерева

Prediction:

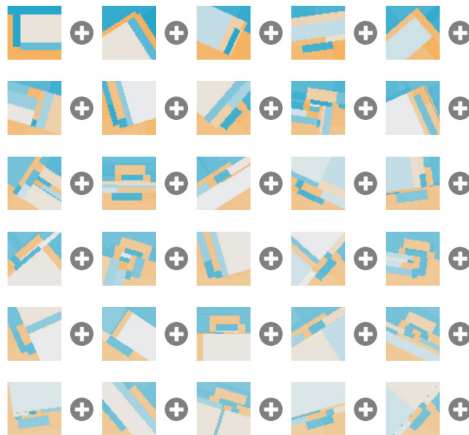


↑  
predictions of GB (all 100 trees)

train loss: 0.013      test loss: 0.092



Decision functions of first 30 trees



[http://arogozhnikov.github.io/2016/07/05/gradient\\_boosting\\_playground.html](http://arogozhnikov.github.io/2016/07/05/gradient_boosting_playground.html)

## Стохастический градиентный бустинг (SGB)

**Идея:** при оптимизации  $b_t$  и  $\alpha_t$  использовать не всю выборку  $X^\ell$ , а случайную подвыборку, по аналогии с бэггингом

**Преимущества:**

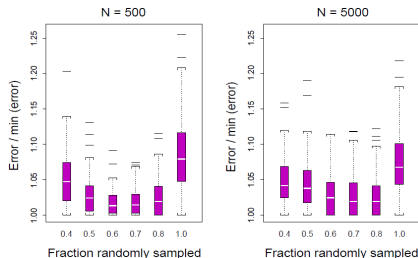
- улучшается сходимость, уменьшается время обучения
- улучшается обобщающая способность ансамбля
- можно использовать несмещённые оценки out-of-bag

**Эксперименты:**

относительная ошибка при  
различном объёме выборки  $N$

**Вывод:**

оптимально сэмплировать  
около 60–80% выборки



*Friedman G. Stochastic Gradient Boosting. 1999.*

## Частные случаи GB: регрессия, AdaBoost и другие

Регрессия:  $\mathcal{L}(b, y) = (b - y)^2$

- $b_T(x)$  обучается на разностях  $y_i - \sum_{t=1}^{T-1} \alpha_t b_t(x_i)$
- если регрессии  $b_t$  линейные, то  $\alpha_t$  можно не обучать.

Классификация:  $\mathcal{L}(b, y) = e^{-by}$ ,  $b_t \in \{-1, 0, +1\}$

- GB в точности совпадает с AdaBoost [Freund, 1995]

Классификация:  $\mathcal{L}(b, y) = \mathcal{L}(-by)$ ,  $b_t \in \mathbb{R}$

- GB совпадает с AnyBoost [Mason, 2000]

---

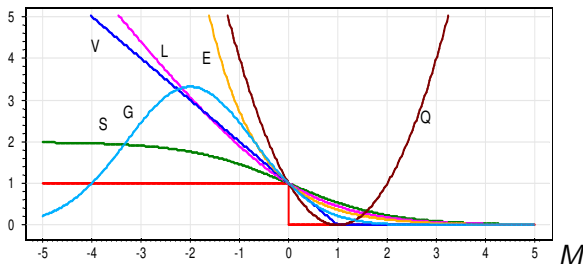
*Y. Freund, R. Schapire.* A decision-theoretic generalization of online learning and an application to boosting. 1995.

*L. Mason et al.* Boosting algorithms as gradient descent. 2000.



## Варианты бустинга для двухклассовой классификации

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);

$G(M) = \exp(-cM(M + s))$  — гауссовская (BrownBoost);

$S(M) = 2(1 + e^M)^{-1}$  — сигмоидная;

$V(M) = (1 - M)_+$  — кусочно-линейная (из SVM);

## XGBoost: популярная и быстрая реализация GB над деревьями

Деревья регрессии и классификации (CART):

$$b(x, w) = \sum_{k \in K} w_k B_k(x)$$

где  $B_k(x)$  — бинарный индикатор [ $x$  попадает в лист  $k$ ],  
 $w_k$  — значение в листе  $k$ ,  $K$  — множество листьев дерева.  
Для любого  $x$  одно и только одно слагаемое не равно нулю.

Критерий качества с суммой  $L_0$  и  $L_2$  регуляризаторов:

$$Q(w) = \sum_{i=1}^{\ell} \mathcal{L}(a(x_i) + b(x_i, w), y_i) + \gamma |K| + \frac{\lambda}{2} \sum_{k \in K} w_k^2 \rightarrow \min_w,$$

где  $a(x_i) = \sum_{t=1}^{T-1} \alpha_t b_t(x_i)$  — ранее построенная часть ансамбля.

В некоторых случаях задача имеет аналитическое решение.

## XGBoost: приближённое аналитическое решение для $w_j$

Приближим  $\mathcal{L}(a + b, y) \approx \mathcal{L}(a, y) + b\mathcal{L}'(a, y) + \frac{b^2}{2}\mathcal{L}''(a, y)$ :

$$\Phi(w) = \sum_{i=1}^{\ell} \left( g_i b_i + \frac{1}{2} h_i b_i^2 \right) + \gamma |K| + \frac{\lambda}{2} \sum_{k \in K} w_k^2 \rightarrow \min_w,$$

где  $b_i^p = \sum_k w_k^p B_k(x_i)$ ,  $g_i = \mathcal{L}'(a(x_i), y_i)$ ,  $h_i = \mathcal{L}''(a(x_i), y_i)$ .

Из условий  $\frac{\partial \Phi(w)}{\partial w_k} = 0$  находим оптимальное значение листа  $k$ :

$$w_k = - \frac{\sum_i g_i B_k(x_i)}{\lambda + \sum_i h_i B_k(x_i)}$$

Подставляя  $w_k$  обратно в  $\Phi(w)$ , выводим критерий ветвления:

$$\Phi(B_1, \dots, B_k) = - \frac{1}{2} \sum_{k \in K} \frac{(\sum_i g_i B_k(x_i))^2}{\lambda + \sum_i h_i B_k(x_i)} + \gamma |K| \rightarrow \min$$

## XGBoost и другие варианты GB

### Преимущества XGBoost (eXtreme Gradient Boosting):

- $L_2$  регуляризация сокращает переобучение
- $L_0$  регуляризация упрощает деревья (pruning)
- как и общий GB, допускает произвольные функции потерь
- очень быстрая реализация за счёт аналитических формул
- имеет механизм обработки пропущенных значений

### Что ещё бывает:

- Light GBM — для обучения на сверхбольших данных
- Яндекс.MatrixNet — GB над Oblivious Decision Tree
- Яндекс.CatBoost — для категориальных признаков

## Основные мотивации CatBoost

### Две проблемы:

- Надо обрабатывать категориальные признаки с большим числом редких значений (пользователь, регион, город, реклама, рекламодатель, товар, документ, автор, и т.д.)
- Переобучение (смещённость, target leakage) в градиентах:  $g_i = \mathcal{L}'(a_{t-1}(x_i), y_i)$  вычисляются в тех же точках  $x_i$ , по которым ансамбль  $a_{t-1}(x)$  обучался аппроксимировать  $y_i$

### Приём, похожий на Out-Of-Bag и на онлайнные методы:

- для получения несмещённых оценок на объекте  $x_i$  хранить и дообучать ансамбль на выборках без этого объекта
- как сделать, чтобы этих выборок было  $O(\log \ell)$ , а не  $O(\ell)$ ?
- как сделать, чтобы они не сильно перекрывались?

---

*L.Prokhorenkova et al.* CatBoost: unbiased boosting with categorical features. 2019.

## Упорядоченный бустинг (ordered boosting)

### Идеи:

- вычислять  $g_i$  по модели  $a_{t-1}$ , которая не обучалась на  $x_i$
- строить обучающие подвыборки удваивающейся длины
- построить много таких случайно перемешанных выборок

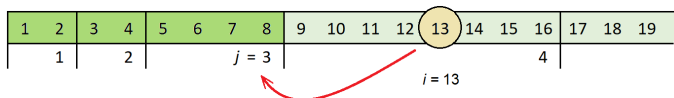
### Обозначения:

$\sigma_1, \dots, \sigma_s$  — случайные перестановки выборки  $X^\ell$

$X^{rj}$  — подвыборка первых  $2^j$  объектов из  $\sigma_r(X^\ell)$

$a_t^{rj}(x)$  — ансамбль-полуфабрикат, обученный по  $X^{rj}$

$g_{ti}^r = -\mathcal{L}'(a_{t-1}^{rj}(x_i), y_i)$  — антиградиент в точке  $(x_i, y_i)$  для ансамбля  $a_{t-1}^{rj}$ , который по ней не обучался,  $j = \lfloor \log_2(i-1) \rfloor$



L.Prokhorenkova et al. CatBoost: unbiased boosting with categorical features. 2019.

## Модификация градиентного бустинга

сгенерировать случайные перестановки  $\sigma_0, \sigma_1, \dots, \sigma_s$ ;

**для всех**  $t = 1, \dots, T$ :

выбрать перестановку  $\sigma_r$  случайно из  $\sigma_1, \dots, \sigma_s$ ;

$g_{ti}^r := -\mathcal{L}'(a_{t-1}^{rj}(x_i), y_i)$  — несмещённый антиградиент;

$b_t := \arg \min_b \sum_{i=1}^{\ell} (b(x_i) - g_{ti}^r)^2$ ;

**для всех** деревьев  $b_t^{rj}$ ,  $r = 1, \dots, s$ ,  $2^j \leq \ell$ :

скопировать общую для них структуру дерева из  $b_t$ ;

вычислить в листьях  $b_t^{rj}$  средние по  $\{g_{ti}^r: x_i \in X^{rj}\}$ ;

вычислить в листьях  $b_t$  средние по  $\{g_{ti}^0: x_i \in X^{0j}\}$ ;

GB: вычислить  $\alpha_t$  и обновить  $a_{t,i} := a_{t-1,i} + \alpha_t b_t(x_i)$ ;

## Способы обработки категориальных признаков

Пусть  $V$  — множество (словарь) значений признака  $f(x)$

**Стандартные методы** либо громоздкие, либо переобучаются:

- бинаризация (one-hot encoding):  $b_v(x) = [f(x) = v]$
- группирование (кластеризация) значений (LightGBM)
- статистика по целевому признаку (target statistics, TS):

$$\tilde{f}(x_i) = \frac{\sum_{k=1}^{\ell} [f(x_k) = f(x_i)] y_k + \gamma p}{\sum_{k=1}^{\ell} [f(x_k) = f(x_i)] + \gamma}$$

**CatBoost:**

- статистика TS вычисляется по перестановкам  $X^{rj}$ :

$$\tilde{f}(x_i) = \frac{\sum_{x_k \in X^{rj}} [f(x_k) = f(x_i)] y_k + \gamma p}{\sum_{x_k \in X^{rj}} [f(x_k) = f(x_i)] + \gamma}, \quad j = \lfloor \log_2(i - 1) \rfloor$$

- конъюнкции категориальных признаков создаются «налету» в процессе построения деревьев



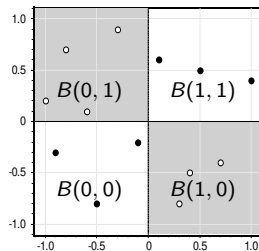
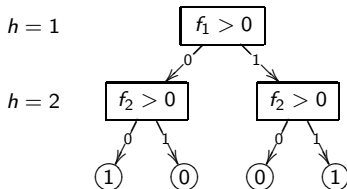
## Небрежные решающие деревья (Oblivious Decision Tree, ODT)

**Решающая таблица:** дерево глубины  $H$ ,  $D_v = \{0, 1\}$ ;  
 для всех узлов уровня  $h$  условие ветвления  $f_h(x)$  одинаково;  
 на уровне  $h$  ровно  $2^{h-1}$  вершин;  $X$  делится на  $2^H$  ячеек.

Классификатор задаётся таблицей решений  $B: \{0, 1\}^H \rightarrow Y$ :

$$a(x) = B(f_1(x), \dots, f_H(x)).$$

**Пример:** задача XOR,  $H = 2$ .



*R.Kohavi, C.-H.Li. Oblivious decision trees, graphs, and top-down pruning. 1995.*

## Алгоритм обучения ODT

**Вход:** выборка  $X^\ell$ ; множество признаков  $F$ ; глубина дерева  $H$ ;

**Выход:** признаки  $f_h$ ,  $h = 1, \dots, H$ ; таблица  $B: \{0, 1\}^H \rightarrow Y$ ;

**для всех**  $h = 1, \dots, H$

    предикат с максимальным выигрышем определённости:

$$f_h := \arg \max_{f \in \text{bin}\{F\}} \text{Gain}(f_1, \dots, f_{h-1}, f);$$

$B(\beta) := \Phi(U_{H\beta})$ , где  $\Phi(U) = \text{avg}\{g_{ti}^r: x_i \in U\}$ ;

$U_{h\beta} = \{x_i \in X^\ell: f_s(x_i) = \beta_s, s = 1..h\}$  — выборка объектов  $x_i$ , дошедших до вершины  $\beta = (\beta_1, \dots, \beta_h) \in \{0, 1\}^h$

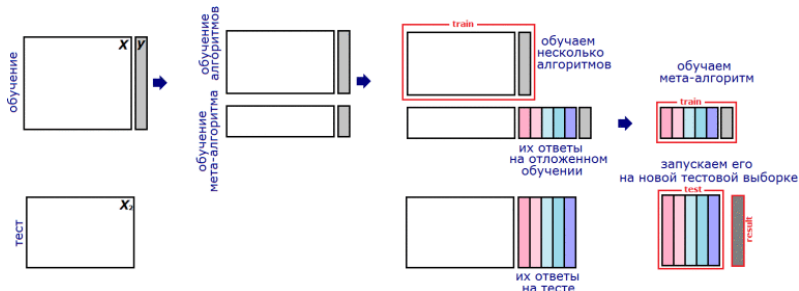
Выигрыш от ветвления на уровне  $h$  по всей выборке  $X^\ell$ :

$$\text{Gain}(f_1, \dots, f_h) = \Phi(X^\ell) - \sum_{\beta \in \{0, 1\}^h} \frac{|U_{h\beta}|}{\ell} \Phi(U_{h\beta})$$

## Блендинг (Blending) — смешивание базовых алгоритмов

**Идея:** базовые алгоритмы  $b_t(x)$  как (мета)признаки подаём на вход любому ML алгоритму, не обязательно линейному.

**Проблема:** этот (мета)алгоритм нельзя обучать на тех же данных, что и базовые  $b_t(x)$ , будет переобучение!

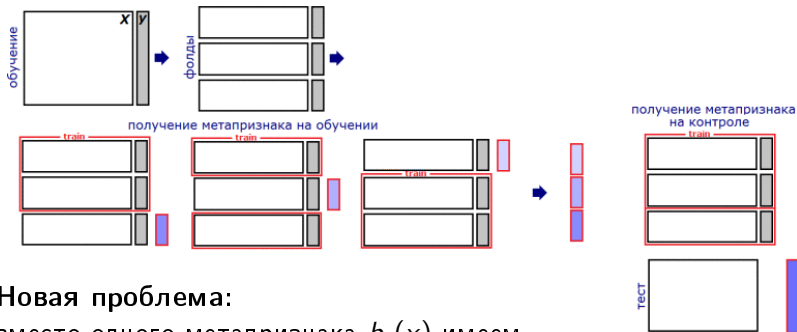


**Новая проблема:** для обучения используется не вся выборка.

<https://dyakonov.org/2017/03/10/стекинг-stacking-и-блендинг-blending>

## Классический стэкинг (Stacking)

Решение проблемы: разбиение выборки на  $k$  блоков ( $k$ -fold)



**Новая проблема:**

вместо одного метапризнака  $b_t(x)$  имеем  $k$  похожих, но разных  $b_{tj}(x)$ ,  $j = 1, \dots, k$ .

**Вариант решения:** усреднение метапризнаков  $b_t(x) = \frac{1}{k} \sum_{j=1}^k b_{tj}(x)$

David H. Wolpert. Stacked generalization // Neural networks. 1992

## Линейный взвешенный стэкинг (Feature-Weighted Linear Stacking)

$b(x) = \sum_{t=1}^T \alpha_t b_t(x)$  — линейный стэкинг (ридж-регрессия)

$\alpha_t(x) = \sum_{j=1}^L v_{tj} f_j(x)$  — теперь веса  $\alpha_t$  зависят от  $x$  через  $f_j(x)$

Критерий оптимизации — ридж-регрессия:

$$Q(v) = \sum_{i=1}^{\ell} \left( \sum_{t=1}^T \sum_{j=1}^L v_{tj} f_j(x_i) b_t(x_i) - y_i \right)^2 + \frac{\lambda}{2} \sum_{t=1}^T \sum_{j=1}^L v_{tj}^2 \rightarrow \min_v$$

Метапризнаки  $f_j$  могут быть как фиксированными, так и обучаемыми (задача симметрична относительно  $b_t$  и  $f_j$ )

FWLS использовался командой #2 в конкурсе NetflixPrize

---

Joseph Sill et al. Feature-Weighted Linear Stacking. 2009.

## Квазилинейный ансамбль (смесь алгоритмов)

Смесь алгоритмов (Mixture of Experts)

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

$b_t: X \rightarrow \mathbb{R}$  — базовый алгоритм,

$g_t: X \rightarrow \mathbb{R}$  — функция компетентности, шлюз (gate).

Чем больше  $g_t(x)$ , тем выше доверие к ответу  $b_t(x)$ .

Условие нормировки:  $\sum_{t=1}^T g_t(x) = 1$  для любого  $x \in X$ .

Нормировка «мягкого максимума» SoftMax:  $\mathbb{R}^T \rightarrow \mathbb{R}^T$ :

$$\tilde{g}_t(x) = \text{SoftMax}_t(g_1(x), \dots, g_T(x); \gamma) = \frac{e^{\gamma g_t(x)}}{e^{\gamma g_1(x)} + \dots + e^{\gamma g_T(x)}}.$$

При  $\gamma \rightarrow \infty$  SoftMax выделяет максимальную из  $T$  величин.

## Вид функций компетентности

Функции компетентности выбираются из содержательных соображений и могут определяться:

- признаком  $f(x)$ :

$$g(x; \alpha, \beta) = \sigma(\alpha f(x) + \beta), \quad \alpha, \beta \in \mathbb{R};$$

- неизвестным направлением  $\alpha \in \mathbb{R}^n$ :

$$g(x; \alpha, \beta) = \sigma(x^\top \alpha + \beta), \quad \alpha \in \mathbb{R}^n, \beta \in \mathbb{R};$$

- расстоянием до неизвестной точки  $\alpha \in \mathbb{R}^n$ :

$$g(x; \alpha, \beta) = \exp(-\beta \|x - \alpha\|^2), \quad \alpha \in \mathbb{R}^n, \beta \in \mathbb{R};$$

где  $\alpha, \beta \in \mathbb{R}$  — параметры, *частично* обучаемые по выборке,  
 $\sigma(z) = \frac{1}{1+e^{-z}}$  — сигмоидная функция.

## Выпуклые функции потерь

Функция потерь  $\mathcal{L}(b, y)$  называется *выпуклой* по  $b$ , если  $\forall y \in Y, \forall b_1, b_2 \in R, \forall g_1, g_2 \geq 0: g_1 + g_2 = 1$ , выполняется

$$\mathcal{L}(g_1 b_1 + g_2 b_2, y) \leq g_1 \mathcal{L}(b_1, y) + g_2 \mathcal{L}(b_2, y).$$

**Интерпретация:** потери растут не медленнее, чем величина отклонения от правильного ответа  $y$ .

**Примеры** выпуклых функций потерь:

$$\mathcal{L}(b, y) = \begin{cases} (b - y)^2 & \text{— квадратичная (МНК-регрессия);} \\ e^{-by} & \text{— экспоненциальная (AdaBoost);} \\ \log_2(1 + e^{-by}) & \text{— логарифмическая (LR);} \\ (1 - by)_+ & \text{— кусочно-линейная (SVM).} \end{cases}$$

**Пример** невыпуклой функции потерь:  $\mathcal{L}(b, y) = [by < 0]$ .



## Основная идея применения выпуклых функций потерь

Пусть  $\forall x \sum_{t=1}^T g_t(x) = 1$  и функция потерь  $\mathcal{L}$  выпукла.

Тогда  $Q(a)$  распадается на  $T$  независимых критериев  $Q_t$ :

$$Q(a) = \sum_{i=1}^{\ell} \mathcal{L} \left( \sum_{t=1}^T g_t(x_i) b_t(x_i), y_i \right) \leq \sum_{t=1}^T \underbrace{\sum_{i=1}^{\ell} g_t(x_i) \mathcal{L}(b_t(x_i), y_i)}_{Q_t(g_t, b_t)}$$

Итерационный процесс, аналогичный ЕМ-алгоритму:

начальное приближение функций компетентности  $g_t$ ;

**повторять**

    М-шаг:  $b_t := \arg \min_b Q_t(g_t, b)$  при фиксированных  $g_t$ ;

    Е-шаг: оценить все  $g_t$  при фиксированных  $b_t$ ;

**пока** значения компетентностей  $g_t(x_i)$  не стабилизируются;

## Алгоритм МЕ (Mixture of Experts): обучение смеси алгоритмов

Итерационный процесс, аналогичный ЕМ-алгоритму:

**Вход:** выборка  $X^\ell$ , начальные  $(g_t)_{t=1}^T$ , **параметры**  $T, \delta, \gamma$ ;

**Выход:**  $g_t(x), b_t(x), t = 1, \dots, T$ ;

**повторять**

$(\tilde{g}_1(x_i), \dots, \tilde{g}_T(x_i)) := \text{SoftMax}(g_1(x_i), \dots, g_T(x_i); \gamma)$ ;

$\tilde{g}_t^0 := \tilde{g}_t$  для всех  $t = 1, \dots, T$ ;

**М-шаг:** при фиксированных  $g_t$  обучить все  $b_t$ :

$b_t := \arg \min_b \sum_{i=1}^{\ell} \tilde{g}_t(x_i) \mathcal{L}(b(x_i), y_i), \quad t = 1, \dots, T$ ;

**Е-шаг:** при фиксированных  $b_t$  оценить все  $g_t$ :

$g_t := \arg \min_{g_t} \sum_{i=1}^{\ell} \mathcal{L}\left(\sum_{s=1}^T \tilde{g}_s(x_i) b_s(x_i), y_i\right), \quad t = 1, \dots, T$ ;

**пока**  $\max_{t,i} |\tilde{g}_t(x_i) - \tilde{g}_t^0(x_i)| > \delta$ ;

## Обучение смеси с автоматическим определением числа $T$

Очередную компоненту обучаем на наиболее трудных объектах:

**Вход:** выборка  $X^\ell$ , **параметры**  $\ell_0$ ,  $\mathcal{L}_0$ ,  $\delta$ ,  $\gamma$ ;

**Выход:**  $T$ ,  $g_t(x)$ ,  $b_t(x)$ ,  $t = 1, \dots, T$ ;

начальное приближение:

$$b_1 := \arg \min_b \sum_{i=1}^{\ell} \mathcal{L}(b(x_i), y_i), \quad g_1(x_i) := 1, \quad i = 1, \dots, \ell;$$

**для всех**  $t = 2, \dots, T$

множество «наиболее трудных» объектов:

$$X_t := \{x_i: \mathcal{L}(a_{t-1}(x_i), y_i) > \mathcal{L}_0\};$$

**если**  $|X_t| \leq \ell_0$  **то выход**;

$$b_t := \arg \min_b \sum_{x_i \in X_t} \mathcal{L}(b(x_i), y_i);$$

$$g_t := \arg \min_{g_t} \sum_{i=1}^{\ell} \mathcal{L}\left(\sum_{s=1}^t g_s(x_i) b_s(x_i), y_i\right);$$

$$(g_s, b_s)_{s=1}^t := \text{ME}(X^\ell, (g_s)_{s=1}^t, t, \delta, \gamma);$$

- Ансамбли позволяют решать сложные задачи, которые плохо решаются отдельными базовыми алгоритмами.
- Важное открытие середины 90-х: обобщающая способность бустинга не ухудшается с ростом сложности  $T$ .
- Градиентный бустинг — наиболее общий из всех бустингов:
  - произвольная функция потерь
  - произвольное пространство оценок  $R$
  - подходит для регрессии, классификации, ранжирования
- Чаще всего GB применяется к решающим деревьям
- RF и SGB — универсальные модели машинного обучения
- CatBoost — для категориальных признаков, без переобучения
- FWLS и ME — квазилинейные ансамбли,  $\alpha_t(x)$
- Смеси алгоритмов нужна хорошая модель компетентности