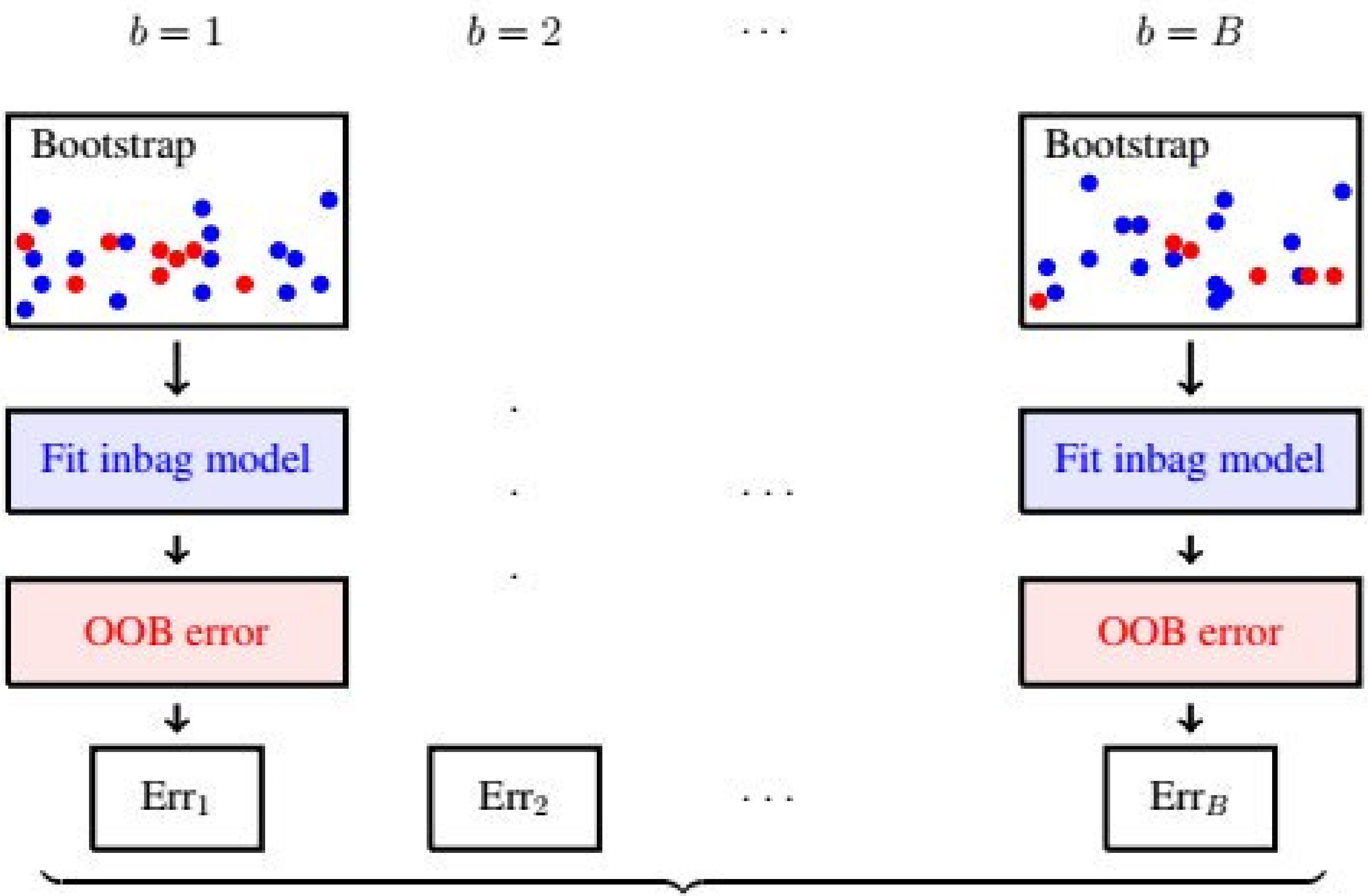
Лекция 10 Композиции алгоритмов. Часть 2.

Кантонистова Е.О.

ВШЭ, 2018

OUT-OF-BAG ОШИБКА



$$\mathrm{Err}_{\mathrm{oob}} = \frac{\mathrm{Err}_1 + \cdots + \mathrm{Err}_B}{B} = \frac{1}{B}\sum_{b=1}^{B} \mathrm{Err}_b$$

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.

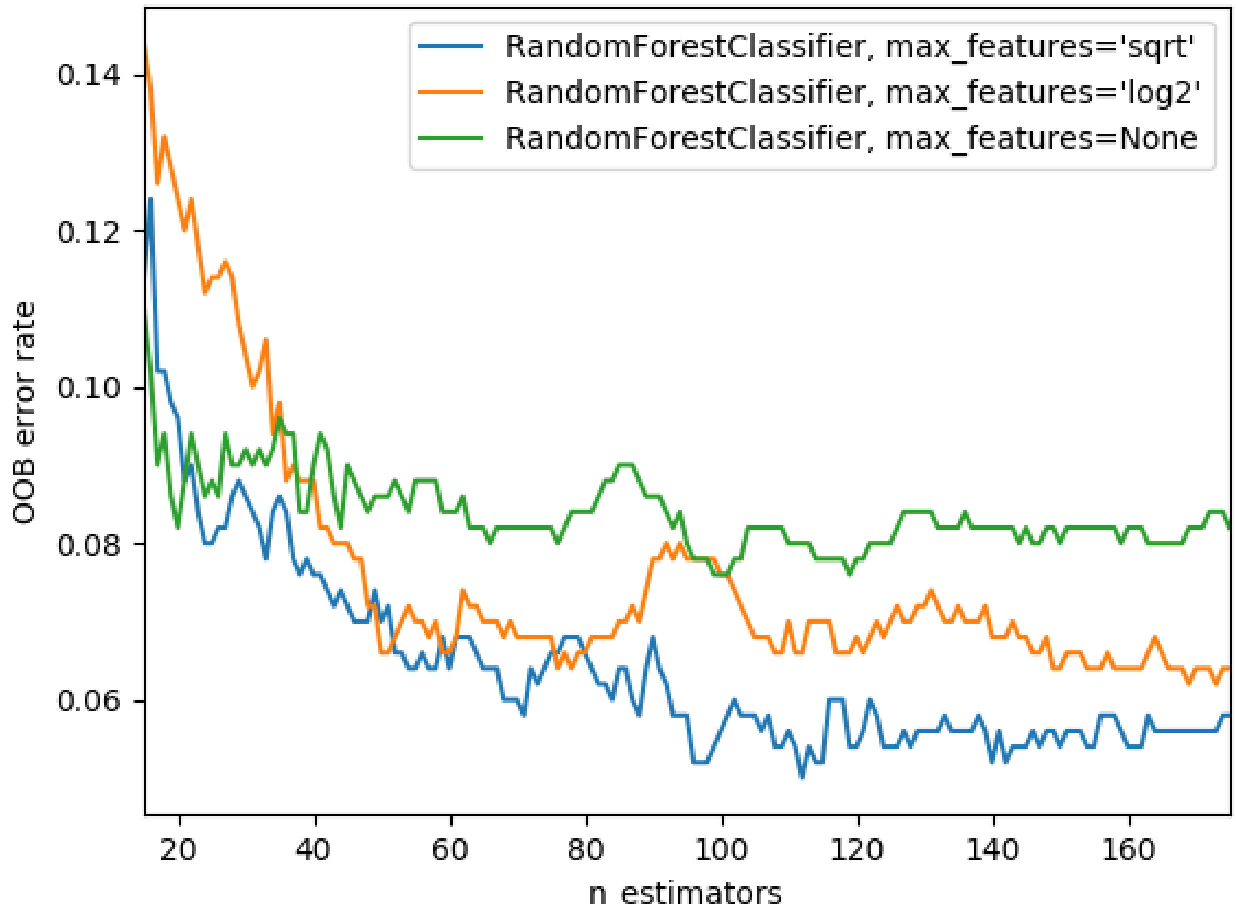
Out-of-bag ошибка:

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

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



ЧАСТЬ 1. БУСТИНГ.

- Бустинг для регрессии с MSE
- Градиентный бустинг

БУСТИНГ

Идея: строим набор алгоритмов, каждый из которых исправляет ошибку предыдущих.

Бустинг в задаче регрессии

Решаем задачу регрессии с минимизацией квадратичной ошибки:

$$\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{l}(a(x_i) - y_i)^2 \to \min_a$$

Ищем алгоритм $a(x)$ в виде суммы N базовых алгоритмов:

$$a(x) = \sum_{n=1}^{N} b_n(x),$$

где базовые алгоритмы $b_n(x)$ принадлежат некоторому семейству A.

БУСТИНГ В ЗАДАЧЕ РЕГРЕССИИ

Шаг 1: Ищем алгоритм $b_1(x)$, минимизирующий ошибку:

$$b_1(x) = \underset{b \in A}{\operatorname{argmin}} \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{l} (b(x_i) - y_i)^2$$

- Ошибка на i-м объекте:

$$s_i^{(1)} = y_i - b_1(x_i)$$

БУСТИНГ В ЗАДАЧЕ РЕГРЕССИИ

Шаг 1: Ищем алгоритм $b_1(x)$, минимизирующий ошибку:

$$b_1(x) = \underset{b \in A}{\operatorname{argmin}} \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{l} (b(x_i) - y_i)^2$$

- Ошибка на i-м объекте:

$$s_i^{(1)} = y_i - b_1(x_i)$$

- Тогда $b_1(x_i) + s_i^{(1)} = y_i$

$\Rightarrow$ следующий алгоритм должен настраиваться на эти ошибки

БУСТИНГ В ЗАДАЧЕ РЕГРЕССИИ

<u>Шаг 1:</u> Ищем алгоритм $b_1(x)$, минимизирующий ошибку:

$$b_1(x) = \underset{b \in A}{\operatorname{argmin}} \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{l} (b(x_i) - y_i)^2$$

- Ошибка на i-м объекте:

$$s_i^{(1)} = y_i - b_1(x_i)$$

- Тогда $b_1(x_i) + s_i^{(1)} = y_i$

$\Rightarrow$ следующий алгоритм должен настраиваться на эти ошибки:

если найдется алгоритм b_2: $b_2(x_i) = s_i^{(1)}$, то алгоритм

$a(x) = b_1(x) + b_2(x)$ будет идеально предсказывать ответ.

БУСТИНГ В ЗАДАЧЕ РЕГРЕССИИ

Шаг 1: Ищем алгоритм $b_1(x)$, минимизирующий ошибку:

$$b_1(x) = \underset{b \in A}{\operatorname{argmin}} \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{l} (b(x_i) - y_i)^2$$

Ошибка на i-м объекте:

$$s_i^{(1)} = y_i - b_1(x_i)$$

Шаг 2: Ищем алгоритм $b_2(x)$, настраивающийся на ошибки s_i первого алгоритма:

$$b_2(x) = \underset{b \in A}{\operatorname{argmin}} \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{l} \left(b(x_i) - s_i^{(1)}\right)^2$$

БУСТИНГ В ЗАДАЧЕ РЕГРЕССИИ

Каждый следующий алгоритм настраиваем на ошибку предыдущих.

<u>Шаг N:</u> Ошибка: $s_i^{(N)} = y_i - \sum_{n=1}^{N-1} b_n(x_i) = y_i - a_{N-1}(x_i)$

Ищем алгоритм $b_N(x)$:

$$b_N(x) = \underset{b \in A}{\operatorname{argmin}} \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{l} \left(b(x_i) - s_i^{(N)} \right)^2$$

БУСТИНГ В ЗАДАЧЕ РЕГРЕССИИ

Каждый следующий алгоритм настраиваем на ошибку предыдущих.

Шаг N: Ошибка: $s_i^{(N)} = y_i - \sum_{n=1}^{N-1} b_n(x_i) = y_i - a_{N-1}(x_i)$

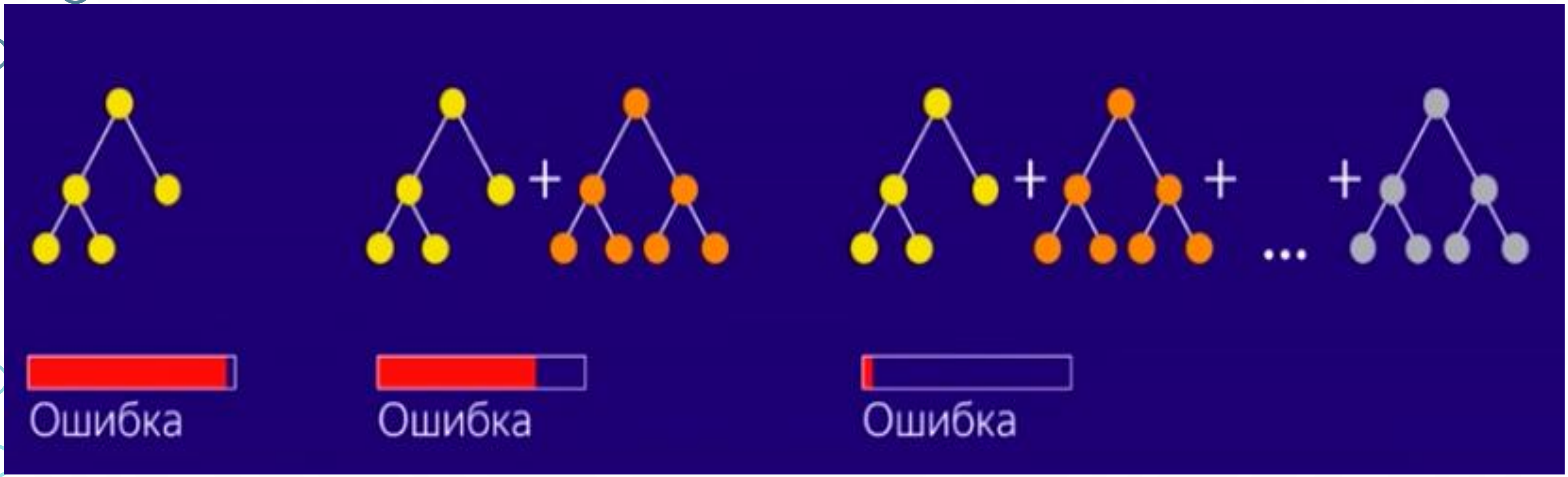
Ищем алгоритм $b_N(x)$:

$$b_N(x) = \underset{b \in A}{\operatorname{argmin}} \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{l} \left(b(x_i) - s_i^{(N)} \right)^2$$

Утверждение. Ошибка на N-м шаге – это антиградиент функции потерь по ответу модели, вычисленный в точке ответа уже построенной композиции:

$$s_i^{(N)} = y_i - a_{N-1}(x_i) = -\frac{\partial}{\partial z} \frac{1}{2} (z - y_i)^2 \Big|_{z = a_{N-1}(x_i)}$$

БУСТИНГ



ГРАДИЕНТНЫЙ БУСТИНГ

Пусть $L(y, z)$ – произвольная дифференцируемая функция потерь.

Строим алгоритм $a_N(x)$ вида

$$\boldsymbol{a_N(x) = \sum_{n=1}^{N} \gamma_n b_n(x)},$$

где на N-м шаге

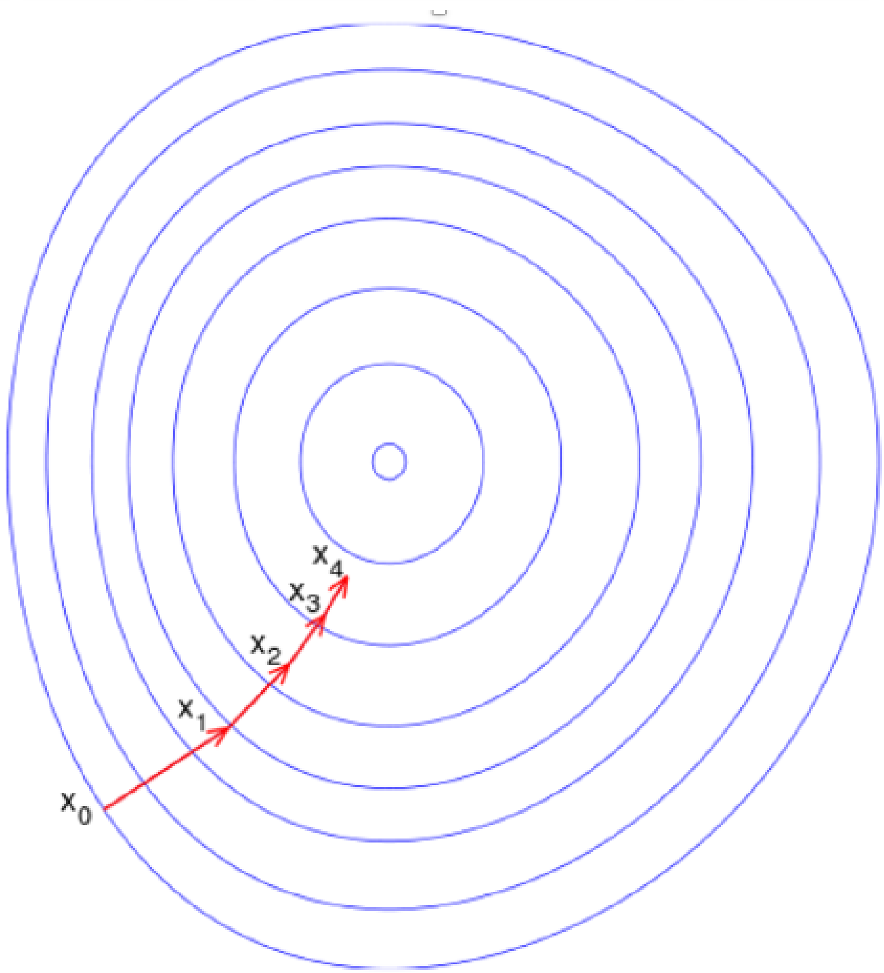
$$\boldsymbol{b_N(x) = \operatorname*{argmin}_{b \in A} \sum_{i=1}^{l} \left(b(x_i) - s_i^{(N)} \right)^2},$$

$$\boldsymbol{s_i^{(N)} = -\frac{\partial L}{\partial z}}$$

Коэффициент γ_N должен минимизировать ошибку:

$$\boldsymbol{\gamma_N = \min_{\gamma \in \mathbb{R}} \sum_{i=1}^{l} L(y_i, a_{N-1}(x_i) + \gamma_N b_N(x_i))}$$

ГРАДИЕНТНЫЙ СПУСК В ПРОСТРАНСТВЕ ФУНКЦИЙ



СОКРАЩЕНИЕ ШАГА (РЕГУЛЯРИЗАЦИЯ)

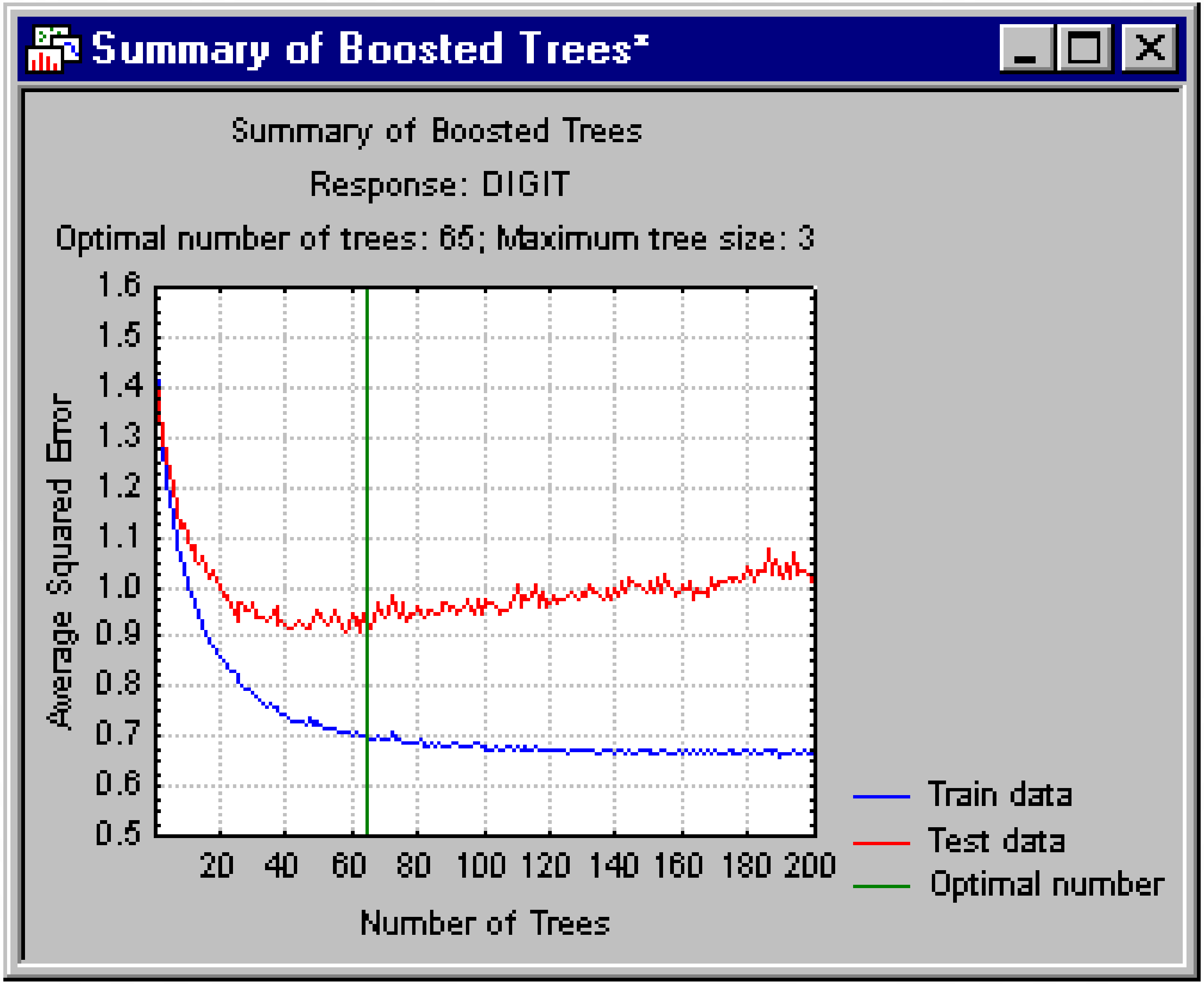
- Если базовые алгоритмы очень простые, то они плохо приближают антиградиент функции потерь, т.е. градиентный бустинг может свестись к случайному блужданию.
- Если базовые алгоритмы сложные, то за несколько шагов бустинг подгонится под обучающую выборку, и получим переобученный алгоритм.

Возможное решение – сокращение шага:

$$a_N(x) = a_{N-1}(x) + \boldsymbol{\eta}\gamma_N b_N(x), \eta \in (0;1]$$

Чем меньше темп обучения η, тем меньше степень доверия к каждому базовому алгоритму, и тем лучше качество итоговой композиции.

КОЛИЧЕСТВО ИТЕРАЦИЙ БУСТИНГА



Стохастический градиентный бустинг

- Будем обучать базовый алгоритм b_N не по всей выборке X, а по случайной подвыборке $X^k \subset X$.

+: снижается уровень шума в данных

+: вычисления становятся быстрее

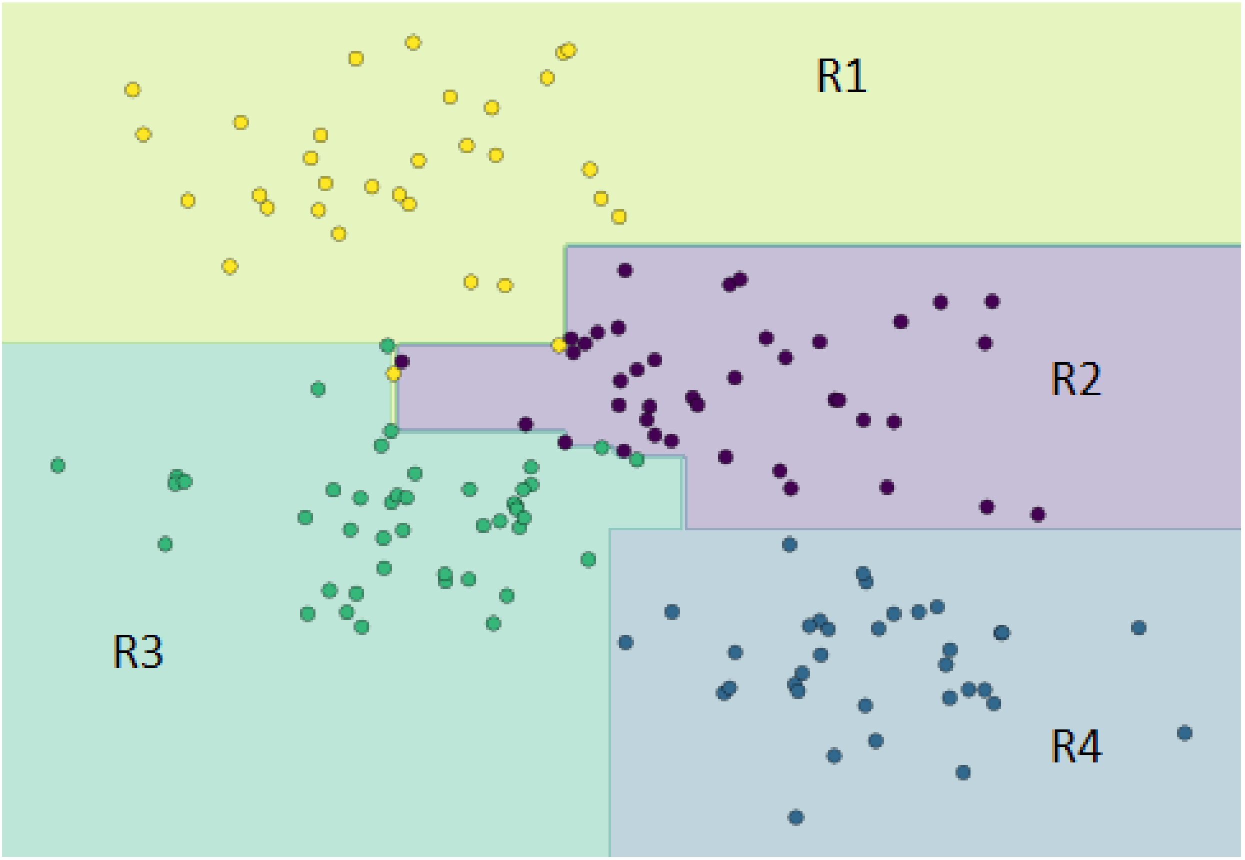
Обычно берут $\left|X^k\right| = \frac{1}{2}|X|$.

ЧАСТЬ 2.
ЧАСТНЫЕ СЛУЧАИ БУСТИНГА

- Бустинг над решающими деревьями
- Бустинг с логистической функцией потерь
- Бустинг с экспоненциальной функцией потерь

ГРАДИЕНТНЫЙ БУСТИНГ НАД ДЕРЕВЬЯМИ

- Решающее дерево разбивает пространство объектов на области, в каждой из который предсказывает некоторый ответ: $$b_n(x) = \sum_{j=1}^{J} b_{nj}[x \in R_j]$$



ГРАДИЕНТНЫЙ БУСТИНГ НАД ДЕРЕВЬЯМИ

- На N-й итерации бустинга:

$$a_N(x) = a_{N-1}(x) + \boldsymbol{\gamma_N \sum_{j=1}^{J_N} b_{Nj}[x \in R_j]},$$

Добавление одного дерева равносильно добавлению J_N предикатов.

ГРАДИЕНТНЫЙ БУСТИНГ НАД ДЕРЕВЬЯМИ

- На N-й итерации бустинга:

$$a_N(x) = a_{N-1}(x) + \gamma_N \sum_{j=1}^{J_N} b_{Nj}[x \in R_j],$$

Добавление одного дерева равносильно добавлению J_N предикатов.

- Улучшим предсказание, подобрав при каждом предикате свой коэффициент:

$$\sum_{i=1}^{l} L(y_i, a_{N-1}(x_i) + \sum_{j=1}^{J_N} \boldsymbol{\gamma_{Nj}}[x \in R_j]) \to \min_{\{\gamma_{Nj}\}}$$

Градиентный бустинг над деревьями

$$\sum_{i=1}^{l} L(y_i, a_{N-1}(x_i) + \sum_{j=1}^{J_N} \gamma_{Nj} [x \in R_j]) \to \min_{\{\gamma_{Nj}\}}$$

- Области R_j не пересекаются, значит, задача разбивается на несколько независимых подзадач:

$$\boldsymbol{\gamma_{Nj} = \operatorname*{argmin}_{\gamma} \sum_{x_i \in R_j} L(y_i, a_{N-1}(x_i) + \gamma)}$$

СМЕЩЕНИЕ И РАЗБРОС

- Бустинг целенаправленно уменьшает ошибку, т.е. смещение у него маленькое.
- Алгоритм получается сложным, поэтому разброс большой.

Значит, чтобы не переобучиться, в качестве базовых алгоритмов надо брать неглубокие деревья (глубины 3-6).

БУСТИНГ С ЛОГИСТИЧЕСКОЙ ФУНКЦИЕЙ ПОТЕРЬ

Логистическая функция потерь:

$$L(y,z) = \log(1+\exp(-yz))$$

$$-\frac{\partial L}{\partial z}(x_i) = -\frac{\partial \log(1+\exp(-yz))}{\partial z} = \frac{y_i}{1+\exp\big(y_i a_{N-1}(x_i)\big)} \Rightarrow$$

$$\boldsymbol{b_N = \operatorname*{argmin}_{b\in A} \sum_{i=1}^{l} \left(b(x_i) - \frac{y_i}{1+\exp\big(y_i a_{N-1}(x_i)\big)}\right)^2}$$

БУСТИНГ С ЛОГИСТИЧЕСКОЙ ФУНКЦИЕЙ ПОТЕРЬ

Логистическая функция потерь:

$$L(y, z) = \log(1 + \exp(-yz))$$

- Ошибка на N-й итерации:

$$Q(a_N) = \sum_{i=1}^{l} \log[1 + \exp\left(-y_i a_N(x_i)\right)] =$$

$$= \sum_{i=1}^{l} \log[1 + \exp\left(-\boldsymbol{y_i a_{N-1}(x_i)}\right) \cdot \exp(-y_i \gamma_N b_N(x_i))]$$

БУСТИНГ С ЛОГИСТИЧЕСКОЙ ФУНКЦИЕЙ ПОТЕРЬ

Логистическая функция потерь:

$$L(y,z) = \log(1 + \exp(-yz))$$

- Ошибка на N-й итерации:

$$Q(a_N) = \sum_{i=1}^{l} \log(1 + \exp(-y_i a_N(x_i))) =$$

$$= \sum_{i=1}^{l} \log[1 + \exp(-\boldsymbol{y_i a_{N-1}(x_i)}) \cdot \exp(-y_i \gamma_N b_N(x_i))]$$

- Если отступ $\boldsymbol{y_i a_{N-1}(x_i)}$ на объекте x_i большой положительный, то $exp(-y_i a_{N-1}(x_i)) \approx 0$, т.е. объект не вносит вклад в ошибку, и можно его исключить на данной итерации.

ADABOOST

- Рассмотрим экспоненциальную функцию потерь:

$$L(y, z) = \exp(-yz)$$

- Функционал ошибки после $N - 1$ шага:

$$L(a, X) = \sum_{i=1}^{l} \exp(-y_i a_{N-1}(x_i)) = \sum_{i=1}^{l} \exp(-y_i \sum_{n=1}^{N-1} \gamma_n b_n(x_i))$$

ADABOOST

- Рассмотрим экспоненциальную функцию потерь:

$$L(y, z) = \exp(-yz)$$

- Функционал ошибки после $N - 1$ шага:

$$L(a, X) = \sum_{i=1}^{l} \exp(-y_i a_{N-1}(x_i))$$

- “Ошибка” после $N - 1$ итерации:

$$s_i = -\frac{\partial L(y_i, z)}{\partial z}\bigg|_{z=a_{N-1}(x_i)} = \boldsymbol{y_i \cdot \exp(-y_i a_{N-1}(x_i))},$$

$$\exp(-y_i a_{N-1}(x_i)) \ - \text{вес объекта } x_i.$$

ADABOOST

- Рассмотрим экспоненциальную функцию потерь:
$$L(y,z) = \exp(-yz)$$
- $L(a,X) = \sum_{i=1}^{l} \exp(-y_i a_{N-1}(x_i))$
- $s_i = -\frac{\partial L(y_i,z)}{\partial z}\Big|_{z=a_{N-1}(x_i)} = \boldsymbol{y_i \cdot \exp(-y_i a_{N-1}(x_i))}$

На N-м шаге базовый алгоритм ищется по правилу

$$b_N(x) = \underset{b\in A}{argmin} \sum_{i=1}^{l} (b(x_i) - \boldsymbol{s_i})^2$$

ADABOOST

- Рассмотрим экспоненциальную функцию потерь:

$$L(y, z) = \exp(-yz)$$

- $L(a, X) = \sum_{i=1}^{l} \exp(-y_i a_{N-1}(x_i))$
- $s_i = -\frac{\partial L(y_i, z)}{\partial z}\Big|_{z=a_{N-1}(x_i)} = \boldsymbol{y_i \cdot \exp(-y_i a_{N-1}(x_i))}$

На N-м шаге базовый алгоритм ищется по правилу

$$b_N(x) = \underset{b \in A}{argmin} \sum_{i=1}^{l} (b(x_i) - \boldsymbol{s_i})^2$$

- если все объекты имеют вес 1, то $s_i = y_i$ - алгоритм настраивается на исходные ответы
- если вес на объекте большой положительный, то $s_i \approx 0$, значит, штраф за любое предсказание $(\pm 1 - 0)^2 = 1$.

ADABOOST (ВЛИЯНИЕ ШУМА)

$$\mathbf{s_i = y_i \cdot exp}(-\boldsymbol{y_i} \cdot \boldsymbol{a_{N-1}}(\boldsymbol{x_i}))$$

- если объект имеет большой отрицательный вес, то следующий базовый алгоритм очень сильно настраивается на этот объект
- получается, что алгоритм настраивается на шумовые объекты

БУСТИНГ С ЛОГИСТИЧЕСКОЙ ФУНКЦИЕЙ ПОТЕРЬ (ВЛИЯНИЕ ШУМА)

$$\mathbf{s_i} = \frac{\boldsymbol{y_i}}{\mathbf{1} + \boldsymbol{exp}\left(\boldsymbol{y_i a_{N-1}}(\boldsymbol{x_i})\right)} = \boldsymbol{y_i} \cdot \color{red}{\frac{\mathbf{1}}{\mathbf{1} + \boldsymbol{exp}\left(\boldsymbol{y_i a_{N-1}}(\boldsymbol{x_i})\right)}}$$

Бустинг с логистической функцией потерь (влияние шума)

$$\mathbf{s_i} = \frac{y_i}{1 + exp\left(y_i a_{N-1}(x_i)\right)} = y_i \cdot \frac{1}{1 + exp\left(y_i a_{N-1}(x_i)\right)}$$

- все веса не больше 1
- если отступ большой отрицательный (шумовой объект), то вес ≈ 1.
- если отступ примерно 0, то вес $\approx \frac{1}{2}$.

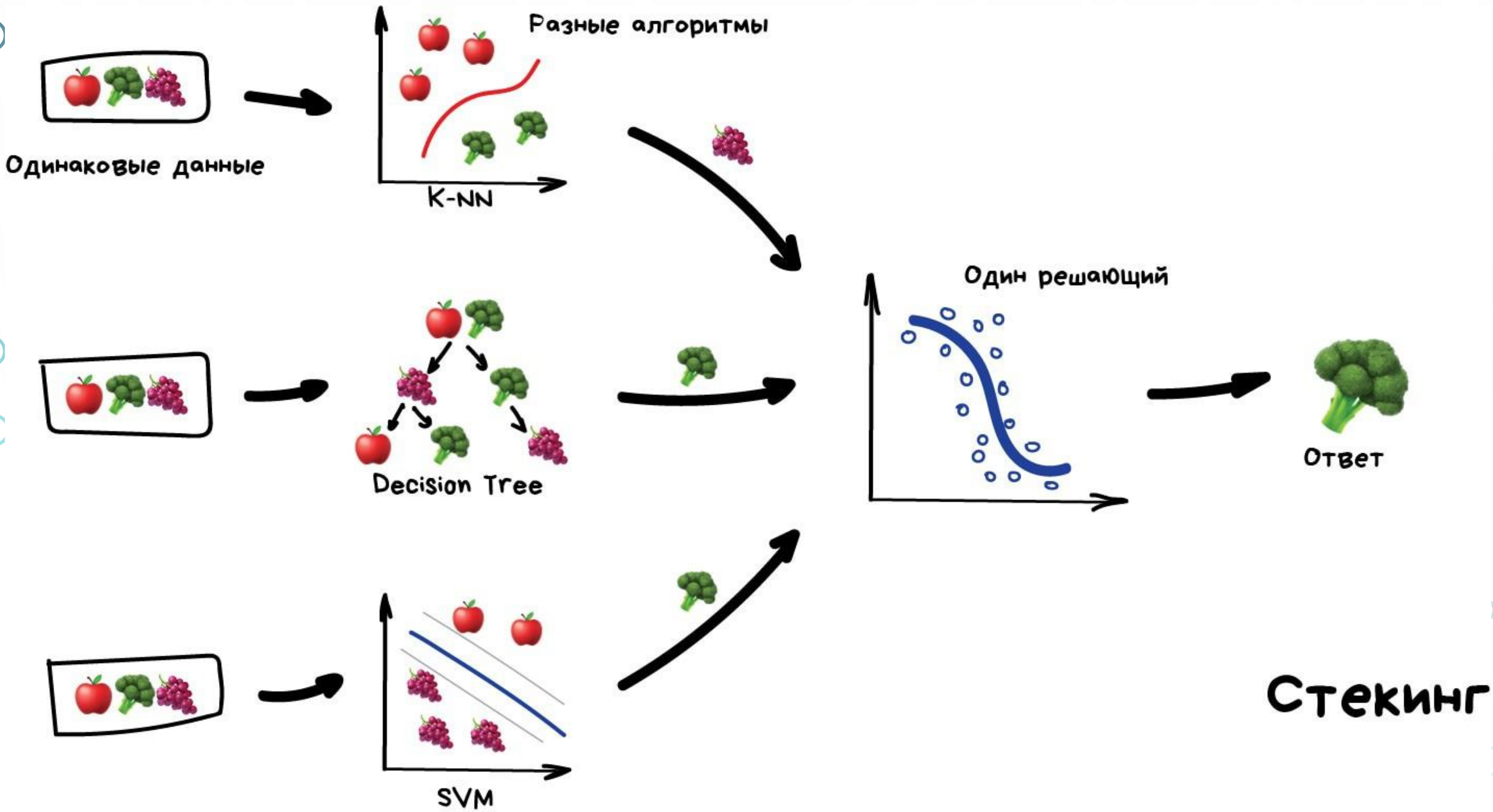
Алгоритм гораздо более устойчив к шумам, чем AdaBoost.

ЧАСТЬ 3. ДРУГИЕ СПОСОБЫ ПОСТРОЕНИЯ КОМПОЗИЦИЙ

- Стекинг (Stacking)
- Блендинг (Blending)

СТЕКИНГ (STACKING)

<u>Идея:</u> обучаем несколько разных алгоритмов и передаём их результаты на вход последнему, который принимает итоговое решение.



Стекинг (Stacking)

- Пусть мы обучили N базовых алгоритмов $b_1(x), b_2(x), \dots, b_N(x)$ на выборке X.
- Обучим теперь мета-алгоритм $a(x)$ на прогнозах этих алгоритмов (т.е. прогнозы алгоритмов – это по сути новые признаки):

$$\sum_{i=1}^{l} L(y_i, \boldsymbol{a}(b_1(x_i), b_2(x_i), \dots, b_N(x_i))) \to \min_{a}$$

- алгоритм $a(x)$ будет больше опираться на предсказание тех алгоритмов, которые сильнее подогнались под обучающую выборку $\Rightarrow$ будет переобучен.

Стекинг (stacking)

Решение: будем обучать базовые алгоритмы и мета-алгоритм на разных выборках.

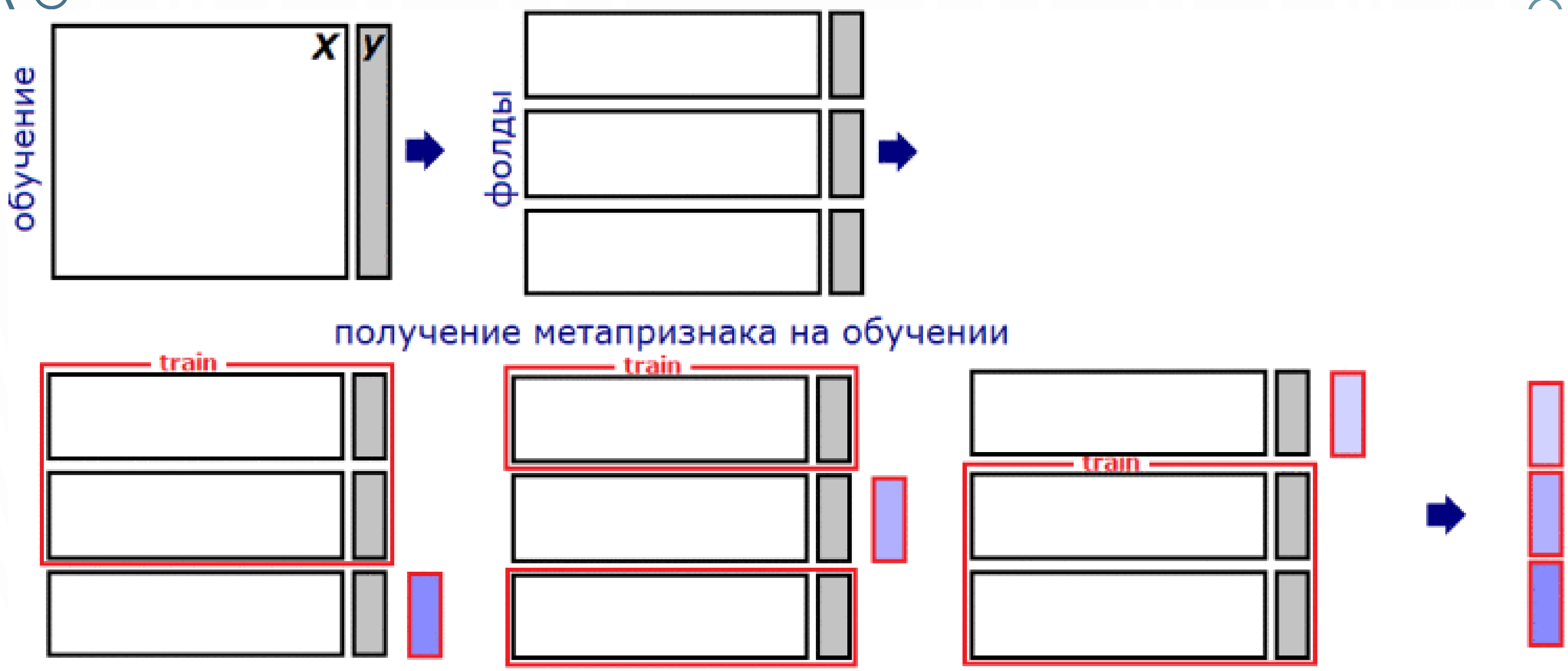
- Разобъем выборку на K частей: $X_1, X_2, \dots, X_K$.
- Пусть $b_j^{-k}(x)$ - j-й алгоритм, обученный на всех блоках, кроме k-го.

Для обучения мета-алгоритма будем минимизировать функционал:

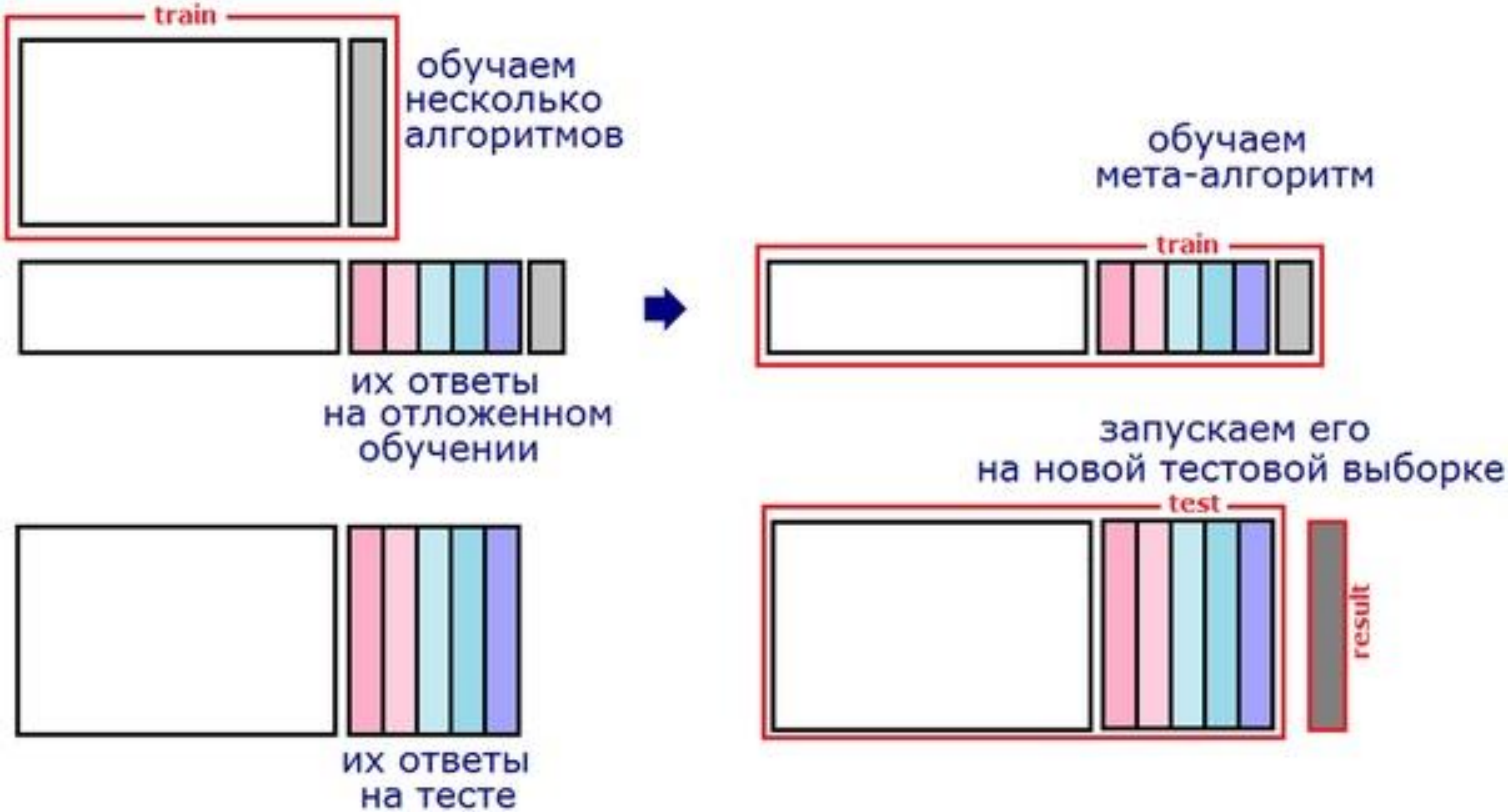
$$\sum_{k=1}^{K} \sum_{(x_i, y_i) \in X_k} L\left(y_i, a\left(b_1^{-k}(x_i), b_2^{-k}(x_i), \dots, b_N^{-k}(x_i)\right)\right) \to \min_a$$

- теперь алгоритм a обучается на объектах, на которых не обучались базовые алгоритмы $\Rightarrow$ нет переобучения.

СТЕКИНГ (STACKING)



ИСПОЛЬЗОВАНИЕ МЕТАПРИЗНАКОВ ВМЕСТЕ С ПРИЗНАКАМИ

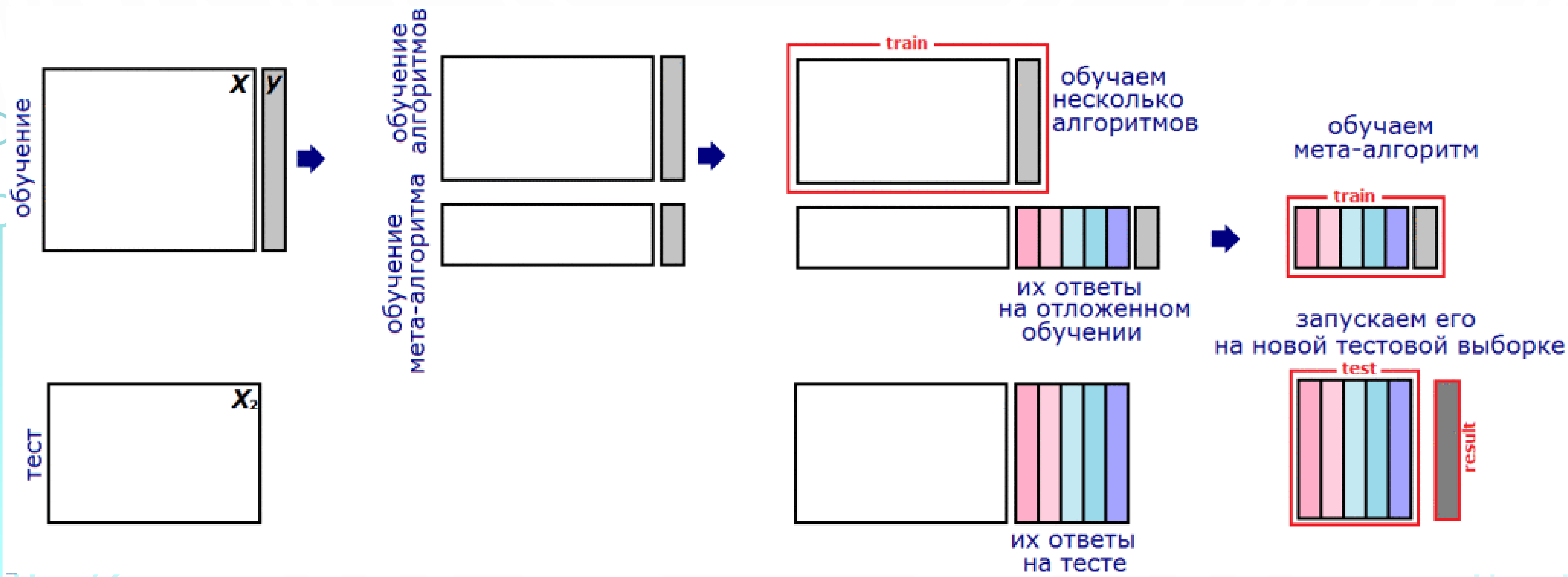


https://dyakonov.org/2017/03/10/стекинг-stacking-и-блендинг-blending/

БЛЕНДИНГ (BLENDING)

Блендинг – это частный случай стекинга, в котором мета-алгоритм линеен:

$$a(x) = \sum_{n=1}^{N} w_n b_n(x)$$



ЧАСТЬ 4. РЕАЛИЗАЦИИ ГРАДИЕНТНОГО БУСТИНГА

- Xgboost
- CatBoost

и другие.

XGBOOST (EXTREME GRADIENT BOOSTING)

- На каждом шаге градиентного бустинга решается задача

$$\sum_{i=1}^{l}(b(x_i) - s_i)^2 \to \min_b$$

$$\Leftrightarrow \sum_{i=1}^{l}\left(-s_i b(x_i) + \frac{1}{2}b^2(x_i)\right)^2 \to \min_b$$

- На каждом шаге xgboost решается задача

$$\sum_{i=1}^{l}\left(-s_i b(x_i) + \frac{1}{2}h_i b^2(x_i)\right) + \gamma J + \frac{\lambda}{2}\sum_{j=1}^{J} b_j^2 \to \min_b, \quad (*)$$

$$h_i = \left.\frac{\partial^2 L}{\partial z^2}\right|_{a_{N-1}(x_i)}$$

XGBOOST

$$\sum_{i=1}^{l}\left(-s_i b(x_i) + \frac{1}{2} h_i b^2(x_i)\right) + \gamma J + \frac{\lambda}{2}\sum_{j=1}^{J} b_j^2 \to \min_b$$

Основные особенности xgboost:

- базовый алгоритм приближает направление, посчитанное с учетом второй производной функции потерь
- функционал регуляризуется – добавляются штрафы за количество листьев и за норму коэффициентов
- при построении дерева используется критерий информативности, зависящий от оптимального вектора сдвига
- критерий останова при обучении дерева также зависит от оптимального сдвига

CATBOOST

CatBoost – алгоритм, разработанный в Яндексе. Он является оптимизацией Xgboost и в отличие от Xgboost умеет обрабатывать категориальные признаки.

https://github.com/catboost/catboost

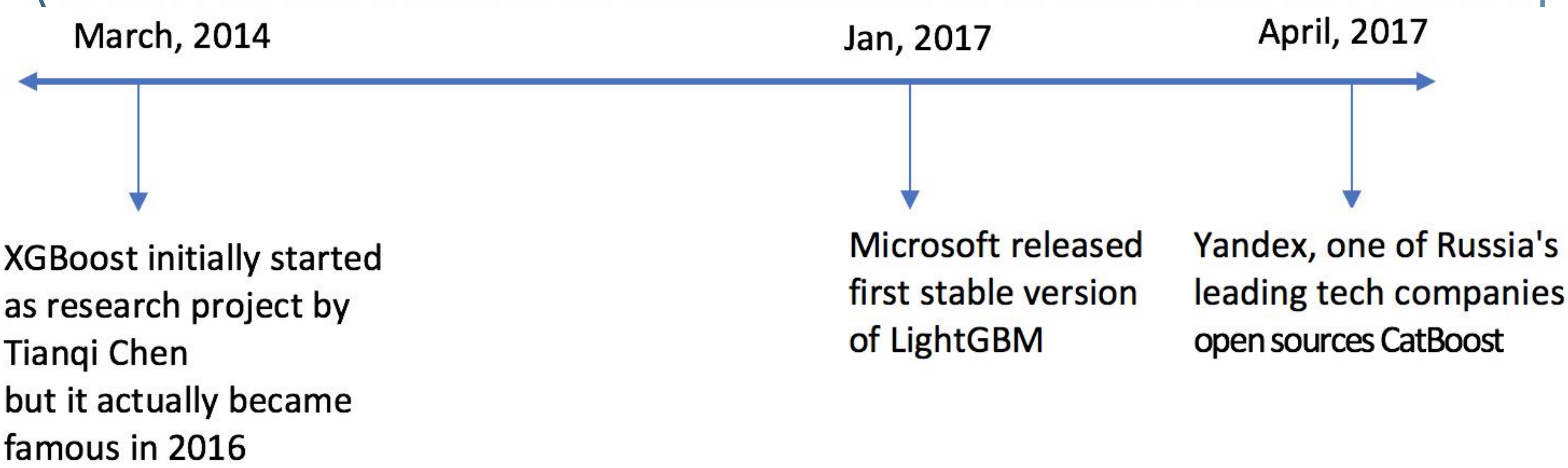
CATBOOST

Особенности catboost:

- используются симметричные деревья решений

- Для кодирования категориальных признаков используется набор методов (one-hot encoding, счётчики, комбинации признаков и др.)
- Динамический бустинг – способ вычислять значения в листьев, направленный на уменьшение переобучения

XGBOOST, LIGHTGBM, CATBOOST



- https://github.com/dmlc/xgboost
- https://github.com/Microsoft/LightGBM
- https://towardsdatascience.com/catboost-vs-light-gbm-vs-xgboost-5f93620723db