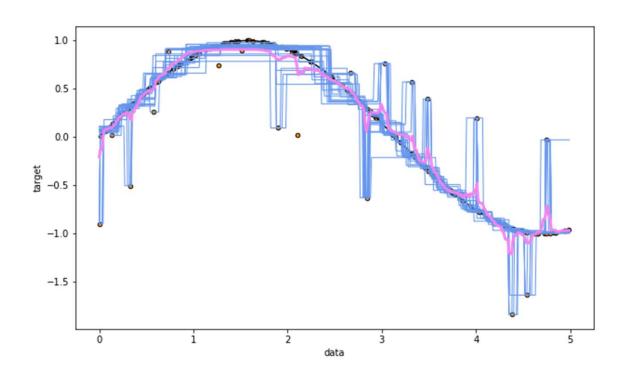
# Исправление ошибок моделей и идея бустинга

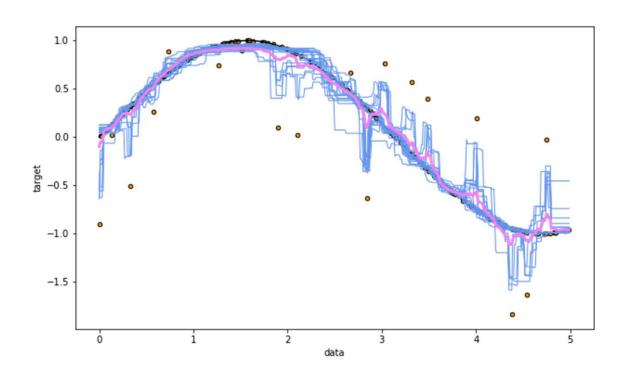
#### Бэггинг

- Смещение  $a_N(x)$  такое же, как у  $b_n(x)$
- Разброс  $a_N(x)$ :
- $\frac{1}{N}$  (разброс  $b_n(x)$ ) + ковариация  $(b_n(x), b_m(x))$
- Если базовые модели независимы, то разброс уменьшается в N раз!
- Чем более похожи выходы базовых моделей, тем меньше эффект от построения композиции

# Смещение и разброс: деревья



# Смещение и разброс: бэггинг



#### Проблемы бэггинга

- Если базовая модель окажется смещённой, то и композиция не справится с задачей
- Базовые модели долго обучать и применять, дорого хранить

- Бустинг (англ. boosting усиление)
- Возьмём простые базовые модели
- Будем строить композицию последовательно и жадно
- Каждая следующая модель будет строиться так, чтобы максимально корректировать ошибки построенных моделей

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

• Обучение первой модели ( $b_1$ ):

$$\frac{1}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} L(y_i, b_1(x_i)) \to \min_{b_1(x)}$$

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

• Обучение первой модели ( $b_1$ ):

$$\frac{1}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} L(y_i, b_1(x_i)) \to \min_{b_1(x)}$$

• Пытаемся подобрать модель  $b_1$ , минимизирующую ошибку

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

• Обучение N-й модели  $(b_N)$  :

$$\frac{1}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} L(y_i, a_{N-1}(x_i) + b_N(x_i)) \to \min_{b_N(x)}$$
 фиксировано учится

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

• Обучение N-й модели  $(b_N)$  :

$$\frac{1}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} L(y_i, a_{N-1}(x_i) + b_N(x_i)) \to \min_{b_N(x)}$$

• Пытаемся подобрать модель  $b_N$ , минимизирующую ошибку итоговой композиции  $a_N = a_{N-1} + b_N$ 

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

• Обучение N-й модели  $(b_N)$  :

$$\frac{1}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} L(y_i, a_{N-1}(x_i) + b_N(x_i)) \to \min_{b_N(x)}$$

• Обучение N-й модели  $(b_N)$  :

$$\frac{1}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} L(y_i, a_{N-1}(x_i) + b_N(x_i)) \to \min_{b_N(x)}$$

- Нет такого алгоритма машинного обучения, который учил бы «добавку»
- Попробуем понять, как можно сформулировать задачу с точки зрения ML

#### Резюме

- В бустинге базовые модели обучаются последовательно
- Каждая следующая корректирует ошибки уже построенных
- В общем случае получается функционал, на который может быть сложно обучать деревья

# Бустинг для среднеквадратичной ошибки

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

$$\frac{1}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} L(y_i, a_{N-1}(x_i) + b_N(x_i)) \to \min_{b_N(x)}$$

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

• Обучение *N*-й модели:

$$\frac{1}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} L(y_i, a_{N-1}(x_i) + b_N(x_i)) \to \min_{b_N(x)}$$

• MSE:

$$L(y, \hat{y}) = (y - \hat{y})^2$$

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

$$\frac{1}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} (a_{N-1}(x_i) + b_N(x_i) - y_i)^2 \to \min_{b_N(x)}$$

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

$$\frac{1}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} \left( b_N(x_i) - \left( y_i - a_{N-1}(x_i) \right) \right)^2 \to \min_{b_N(x)}$$

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

$$\frac{1}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} \left( b_N(x_i) - \left( y_i - a_{N-1}(x_i) \right) \right)^2 \to \min_{b_N(x)}$$

$$S_i^{(N)}$$

$$s_i^{(N)} = y_i - a_{N-1}(x_i)$$
 — остатки

$$\frac{1}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} \left( b_N(x_i) - s_i^{(N)} \right)^2 \to \min_{b_N(x)}$$

• 
$$s_i^{(N)} = y_i - a_{N-1}(x_i)$$
 — остатки

$$\frac{1}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} \left( b_N(x_i) - s_i^{(N)} \right)^2 \to \min_{b_N(x)}$$

- $s_i^{(N)} = y_i a_{N-1}(x_i)$  остатки
- Если  $b_N$  научится выдавать остатки  $s_i^{(N)}$ , то задача будет решена идеально

$$\frac{1}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} \left( b_N(x_i) - s_i^{(N)} \right)^2 \to \min_{b_N(x)}$$

- $s_i^{(N)} = y_i a_{N-1}(x_i)$  остатки
- Если  $b_N$  научится выдавать остатки  $s_i^{(N)}$ , то задача будет решена идеально

$$y_i = a_{N-1}(x_i) + s_i^{(N)} = a_{N-1}(x_i) + b_N(x_i)$$

### Пример

- $y_i = 12$
- $a_{N-1}(x_i) = 10$
- $s_i^{(N)} = ?$
- $b_N(x_i) = ?$
- $a_N(x_i) = ?$

#### Пример

- $y_i = 12$
- $a_{N-1}(x_i) = 10$
- $s_i^{(N)} = 2$
- $b_N(x_i) = 2$
- $a_N(x_i) = 12$

#### Первая итерация

$$\frac{1}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} (b_1(x_i) - y_i)^2 \to \min_{b_1(x)}$$

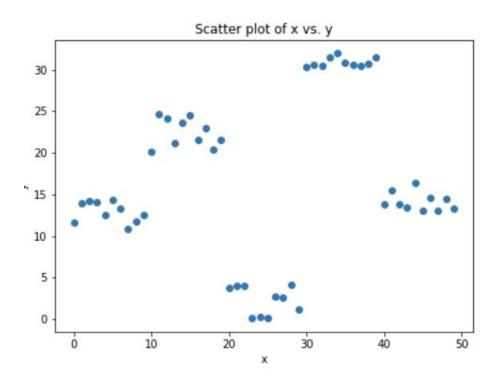
#### Вторая итерация

$$\frac{1}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} \left( b_2(x_i) - \left( y_i - b_1(x_i) \right) \right)^2 \to \min_{b_2(x)}$$

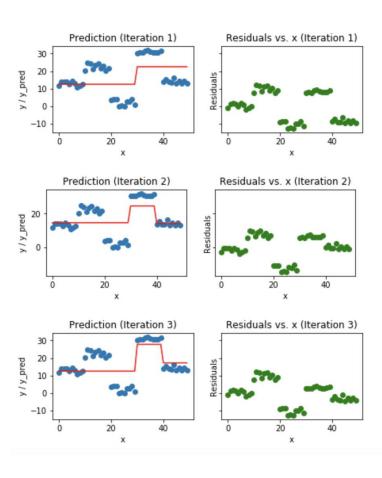
#### Третья итерация

$$\frac{1}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} \left( b_3(x_i) - \left( y_i - b_1(x_i) - b_2(x_i) \right) \right)^2 \to \min_{b_3(x)}$$

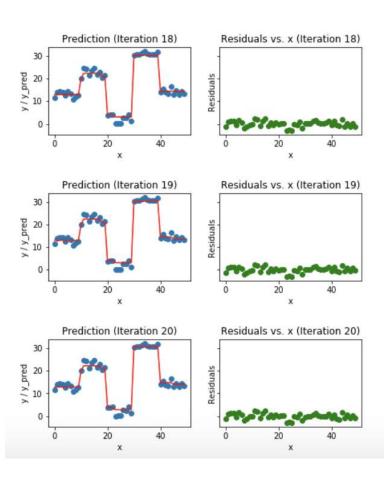
# Визуализация



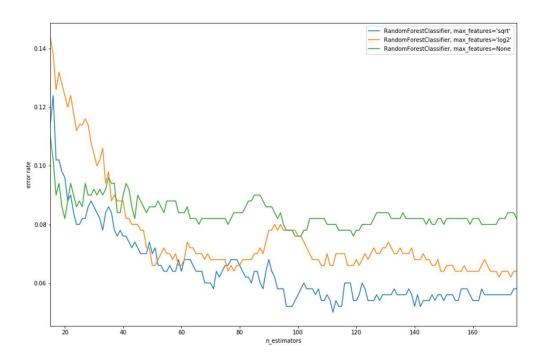
# Визуализация



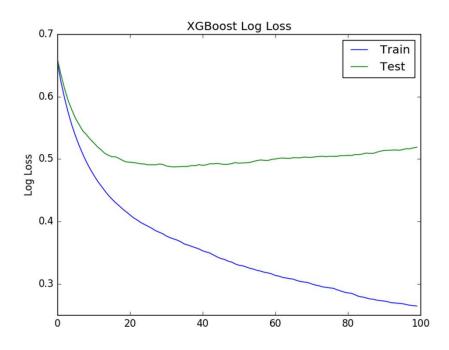
# Визуализация



## Random Forest



# Ошибка бустинга на обучении и тесте



#### Резюме

- В случае с MSE обучение базовых моделей сводится к обычной процедуре обучения с заменой целевой переменной
- Бустинг может переобучаться, поэтому надо следить за ошибкой на тестовой выборке

# Сложности с произвольной функцией потерь

### Задача обучения базовой модели

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

$$\frac{1}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} L(y_i, a_{N-1}(x_i) + b_N(x_i)) \to \min_{b_N(x)}$$

## Задача обучения базовой модели

$$\frac{1}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} L(y_i, a_{N-1}(x_i) + b_N(x_i)) \to \min_{b_N(x)}$$

• Может, просто обучаться на остатки, как в MSE?

$$\frac{1}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} L(y_i - a_{N-1}(x_i), b_N(x_i)) \to \min_{b_N(x)}$$

• Может, просто обучаться на остатки, как в MSE?

$$\frac{1}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} L(y_i - a_{N-1}(x_i), b_N(x_i)) \to \min_{b_N(x)}$$

• Хотим, чтобы модель  $b_N$  выдавала  $y_i - a_{N-1}(x_i)$ 

$$a_N(x) = \operatorname{sign} \sum_{n=1}^{N} b_n(x)$$

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

$$\frac{1}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} \log \left( 1 + \exp\left( -\left( y_i - a_{N-1}(x_i) \right) b_N(x_i) \right) \right) \to \min_{b_N(x)}$$

$$a_N(x) = \operatorname{sign} \sum_{n=1}^{N} b_n(x)$$

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

$$\frac{1}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} \log \left( 1 + \exp\left( -\left( y_i - a_{N-1}(x_i) \right) b_N(x_i) \right) \right) \to \min_{b_N(x)}$$
выдает +-1

$$a_N(x) = \operatorname{sign} \sum_{n=1}^{N} b_n(x)$$

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

$$\frac{1}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} \log \left( 1 + \exp\left( -\left( y_i - a_{N-1}(x_i) \right) b_N(x_i) \right) \right) \to \min_{b_N(x)}$$

- Если  $y_i = a_{N-1}(x_i)$ , то объект не участвует в обучении
- Тогда модель  $b_N(x_i)$  может выдавать что угодно и испортить композицию

$$a_N(x) = \operatorname{sign} \sum_{n=1}^{N} b_n(x)$$

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

• Может, просто обучаться на остатки, как в MSE?

$$\frac{1}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} \log \left( 1 + \exp\left( -\left( y_i - a_{N-1}(x_i) \right) b_N(x_i) \right) \right) \to \min_{b_N(x)}$$

• Иначе  $y_i - a_{N-1}(x_i) = \pm 2$ 

$$\frac{1}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} \log \left( 1 + \exp \left( -\frac{y_i - a_{N-1}(x_i)}{2} b_N(x_i) \right) \right) \to \min_{b_N(x)}$$

- Если  $y_i = a_{N-1}(x_i)$ , то объект не участвует в обучении
- Если  $y_i \neq a_{N-1}(x_i)$ , то базовая модель учится выдавать корректный класс

$$\frac{1}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} \log \left( 1 + \exp \left( -\frac{y_i - a_{N-1}(x_i)}{2} b_N(x_i) \right) \right) \to \min_{b_N(x)}$$

• 
$$y_i = +1$$
,  $\sum_{n=1}^{N-1} b_n(x_i) = -0.5 o$  надо  $b_N(x_i) > 0.5$ 

• 
$$y_i = +1$$
,  $\sum_{n=1}^{N-1} b_n(x_i) = -100 o$  надо  $b_N(x_i) > 100$ 

$$\frac{1}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} \log \left( 1 + \exp \left( -\frac{y_i - a_{N-1}(x_i)}{2} b_N(x_i) \right) \right) \to \min_{b_N(x)}$$

- $y_i = +1$ ,  $\sum_{n=1}^{N-1} b_n(x_i) = -0.5 o$  надо  $b_N(x_i) > 0.5$
- $y_i = +1$ ,  $\sum_{n=1}^{N-1} b_n(x_i) = -100 \rightarrow$  надо  $b_N(x_i) > 100$
- Но на обоих объектах будет одинаково максимизироваться отступ
- На объектах с корректными ответами никак не контролируется выход  $b_N(x)$

• Mean Squared Logarithmic Error (среднеквадратичная логарифмическая ошибка)

$$L(y, z) = (\log(z+1) - \log(y+1))^2$$

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

$$L(y, z) = (\log(z+1) - \log(y+1))^2$$

$$\frac{1}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} (\log(b_N(x_i) + 1) - \log(y_i - a_{N-1}(x_i) + 1))^2 \to \min_{b_N(x)}$$

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

$$L(y, z) = (\log(z+1) - \log(y+1))^2$$

• Может, просто обучаться на остатки, как в MSE?

$$\frac{1}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} (\log(b_N(x_i) + 1) - \log(y_i - a_{N-1}(x_i) + 1))^2 \to \min_{b_N(x)}$$

• Аргумент второго логарифма может оказаться отрицательным

$$\frac{1}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} (\log(b_N(x_i) + 1) - \log(y_i - a_{N-1}(x_i) + 1))^2 \to \min_{b_N(x)}$$

$y_i$	$a_{N-1}(x_i)$	$b_N(x_i)$	Улучшение MSLE композиции	Улучшение функционала базовой модели
1000	100	2	0.09	13.7
2	0	2	1.2	1.2

#### Резюме

- Нельзя заменить обучение добавки к композиции на обучение базовой модели на отклонение от ответов
- Не учитываются особенности функции потерь

### Градиентный бустинг в общем виде

• Обучение *N*-й модели:

$$\frac{1}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} L(y_i, a_{N-1}(x_i) + b_N(x_i)) \to \min_{b_N(x)}$$

• Обучение *N*-й модели:

$$\frac{1}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} L(y_i, a_{N-1}(x_i) + b_N(x_i)) \to \min_{b_N(x)}$$

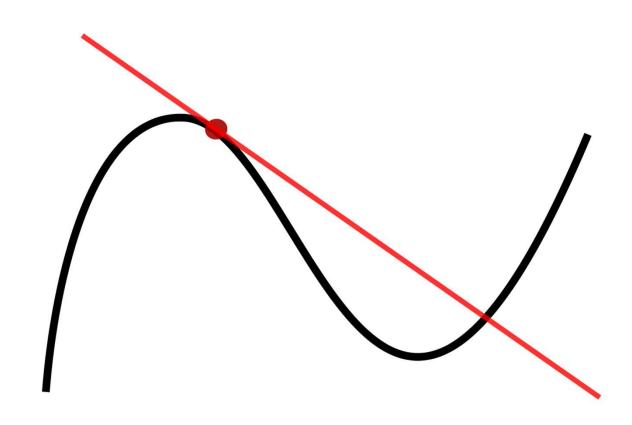
• Как посчитать, куда и как сильно сдвигать  $a_{N-1}(x_i)$ , чтобы уменьшить ошибку?

• Обучение *N*-й модели:

$$\frac{1}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} L(y_i, a_{N-1}(x_i) + b_N(x_i)) \to \min_{b_N(x)}$$

- Как посчитать, куда и как сильно сдвигать  $a_{N-1}(x_i)$ , чтобы уменьшить ошибку?
- Посчитать производную

### Производная



• Обучение *N*-й модели:

$$\frac{1}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} L(y_i, a_{N-1}(x_i) + b_N(x_i)) \to \min_{b_N(x)}$$

• Посчитаем антипроизводную:

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

• Обучение *N*-й модели:

$$\frac{1}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} L(y_i, a_{N-1}(x_i) + b_N(x_i)) \to \min_{b_N(x)}$$

• Посчитаем антипроизводную:

$$s_i^{(N)} = -rac{\partial}{\partial z} L(y_i,z)$$
 прогноз и прогноз модели

в качестве z подставляем в результат предсказание композиции

• Посчитаем антипроизводную:

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

- Знак показывает, в какую сторону сдвигать прогноз на  $x_i$ , чтобы уменьшить ошибку композиции на нём
- Величина показывает, как сильно можно уменьшить ошибку, если сдвинуть прогноз
- Если ошибка почти не сдвинется, то нет смысла что-то менять

• Обучение *N*-й модели:

$$\frac{1}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} \left( b_N(x_i) - s_i^{(N)} \right)^2 \to \min_{b_N(x)}$$

$$\left. s_i^{(N)} = -rac{\partial}{\partial z} L(y_i,z) 
ight|_{z=a_{N-1}(x_i)}$$
— сдвиги

• Обучение *N*-й модели:

$$\frac{1}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} \left( b_N(x_i) - s_i^{(N)} \right)^2 \to \min_{b_N(x)}$$

$$\left. s_i^{(N)} = -rac{\partial}{\partial z} L(y_i,z) 
ight|_{z=a_{N-1}(x_i)}$$
— сдвиги

• Таким образом, мы обучаем базовую модель  $b_N$  так, чтобы на  $x_i$  она выдавала  $s_i^{(N)}$ 

• Обучение *N*-й модели:

$$\frac{1}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} \left( b_N(x_i) - s_i^{(N)} \right)^2 \to \min_{b_N(x)}$$

$$s_i^{(N)} = -rac{\partial}{\partial z}L(y_i,z)\Big|_{z=a_{N-1}(x_i)}$$
— сдвиги

- Как бы градиентный спуск в пространстве алгоритмов
- Базовая модель будет делать корректировки на объектах так, чтобы как можно сильнее уменьшить ошибку композиции
- Сдвиги учитывают особенности функции потерь

#### Градиентный бустинг для MSE

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

#### Градиентный бустинг для MSE

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

$$\frac{1}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} \left( b_N(x_i) - \left( y_i - a_{N-1}(x_i) \right) \right)^2 \to \min_{b_N(x)}$$

# Градиентный бустинг для асимметричной функции

$$L(y,z) = \frac{1}{2}([z < y](z - y)^2 + 5[z \ge y](z - y)^2)$$

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

$$= [z < y](y - z) + 5[z \ge y](y - z)$$

# Градиентный бустинг для асимметричной функции

$$s_i^{(N)} = [z < y](y - z) + 5[z \ge y](y - z)$$

• 
$$y_i = 10$$
,  $a_{N-1}(x_i) = 5$ :  $s_i = 5$ 

• 
$$y_i = 10$$
,  $a_{N-1}(x_i) = 15$ :  $s_i = -25$ 

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

$$= -\frac{\partial}{\partial z} \log(1 + \exp(-y_i z)) \Big|_{z=a_{N-1}(x_i)} =$$

$$= \frac{y_i}{1 + \exp(y_i a_{N-1}(x_i))}$$

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

$$= -\frac{\partial}{\partial z} \log(1 + \exp(-y_i z)) \Big|_{z=a_{N-1}(x_i)} =$$

$$= \frac{y_i}{1 + \exp(y_i a_{N-1}(x_i))}$$

$$\frac{1}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} \left( b_N(x_i) - \frac{y_i}{1 + \exp(y_i a_{N-1}(x_i))} \right)^2 \to \min_{b_N(x)}$$

$$\frac{1}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} \left( b_N(x_i) - \frac{y_i}{1 + \exp(y_i a_{N-1}(x_i))} \right)^2 \to \min_{b_N(x)}$$

• Отступ большой положительный:  $\frac{y_i}{1 + \exp(y_i a_{N-1}(x_i))} \approx 0$ 

• Отступ большой отрицательный:  $\frac{y_i}{1 + \exp(y_i a_{N-1}(x_i))} \approx \pm 1$ 

$$\frac{1}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} \left( b_N(x_i) - \frac{y_i}{1 + \exp(y_i a_{N-1}(x_i))} \right)^2 \to \min_{b_N(x)}$$

- Отступ большой положительный:  $\frac{y_i}{1 + \exp(y_i a_{N-1}(x_i))} \approx 0$
- Отступ большой отрицательный:  $\frac{y_i}{1 + e \quad (y_i a_{N-1}(x_i))} \approx \pm 1$

$$\frac{1}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} \left( b_N(x_i) - \frac{y_i}{1 + \exp(y_i a_{N-1}(x_i))} \right)^2 \to \min_{b_N(x)}$$

• 
$$y_i = +1$$
,  $a_{N-1}(x_i) = -0.7$ :  $s_i = 0.67$ 

• 
$$y_i = +1$$
,  $a_{N-1}(x_i) = 2$ :  $s_i = 0.12$ 

#### Резюме

- Чтобы учесть особенности функции потерь, можно посчитать её производные в точке текущего прогноза композиции
- Базовую модель будем обучать на эти производные (со знаком минус)

# Гиперпараметры и регуляризация в бустинге

$$a_N(x) = a_{N-1}(x_i) + b_N(x_i)$$

• Обучение *N*-й модели:

$$\frac{1}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} \left( b_N(x_i) - s_i^{(N)} \right)^2 \to \min_{b_N(x)}$$

• 
$$s_i^{(N)} = -rac{\partial}{\partial z}L(y_i,z)\Big|_{z=a_{N-1}(x_i)}$$
— сдвиги

# Глубина деревьев

- Градиентный бустинг уменьшает смещение базовых моделей
- Разброс может увеличиться

## Глубина деревьев

- Градиентный бустинг уменьшает смещение базовых моделей
- Разброс может увеличиться
- Поэтому в качестве базовых моделей стоит брать...

## Глубина деревьев

- Градиентный бустинг уменьшает смещение базовых моделей
- Разброс может увеличиться
- Поэтому в качестве базовых моделей стоит брать **неглубокие** деревья

# Гиперпараметры

- Глубина базовых деревьев
- Число деревьев N

## Проблемы бустинга

- Сдвиги показывают направление, в котором надо сдвинуть композицию на всех объектах обучающей выборки
- Базовые модели, как правило, очень простые
- Могут не справиться с приближением этого направления

# Проблемы бустинга

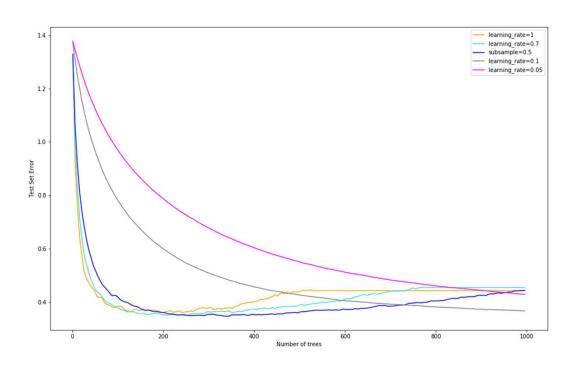
- Сдвиги показывают направление, в котором надо сдвинуть композицию на всех объектах обучающей выборки
- Базовые модели, как правило, очень простые
- Могут не справиться с приближением этого направления
- Выход: добавлять деревья в композицию с небольшим весом

### Длина шага

$$a_N(x) = a_{N-1}(x_i) + \eta b_N(x_i)$$

- $\eta \in (0,1]$  длина шага (learning rate)
- Можно сказать, что это регуляризация композиции
- Снижает вклад каждой модели в композицию
- Чем меньше  $\eta$ , тем больше надо деревьев

# Длина шага

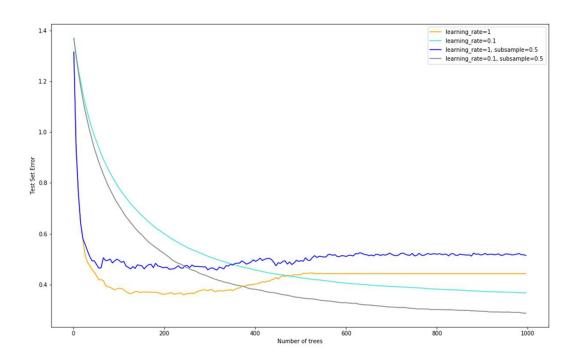


#### Рандомизация

- Можно обучать деревья на случайных подмножествах признаков
- Бустинг уменьшает смещение, поэтому итоговая композиция всё равно получится качественной
- Может снизить переобучение

Можно обучать деревья на подмножествах объектов — способ борьбы с шумом в данных

# Рандомизация



# Гиперпараметры

- Глубина базовых деревьев
- Число деревьев N
- Длина шага
- Размер подвыборки для обучения
- и т.д.

#### Резюме

- Чтобы снизить переобучение, можно добавлять модели в композицию с небольшими весами
- Также может помочь обучение моделей на подвыборках

#### Полезные ссылки

- https://www.gormanalysis.com/blog/gradient-boosting-explained/
- https://youtu.be/3CC4N4z3GJc
- https://en.wikipedia.org/wiki/Gradient boosting
- https://dyakonov.org/2017/06/09/градиентный-бустинг/