Факультет
математики
и компьютерных
наук
СПбГУ

Машинное обучение

Лекция 9. Композиции классификаторов

12 ноября 2021

Пятиминутка

1. Выпишите функцию потерь в классическом варианте SVM
2. Приведите пример, когда подбор ядра радикально увеличивает качество линейной классификации
3. Какие недостатки есть у SVM?

https://ml-handbook.ru/chapters/ensembles/intro (https://ml-handbook.ru/chapters/ensembles/intro)

Определение композиции

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

$a(x) = C(b(x))$ – алгоритм, где

$b : X \to R$ — базовый алгоритм (алгоритмический оператор)

$C : R \to Y$ — решающее правило (composition)

R — пространство оценок

Определение

Композиция базовых алгоритмов $b_1, \ldots, b_T$

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

где $F : R^T \to R$ – корректирующая операция

Зачем вводится R?

В задачах классификации множество отображений $\{F : R^T \to R\}$ существенно шире, чем $\{F : Y^T \to Y\}$.

Примеры пространств оценок и решающих правил

- **Пример 1**: классификация на 2 класса, $Y = \{-1, +1\}$:

  $a(x) = \text{sign}(b(x))$

где $R = \mathbb{R}, b : X \to \mathbb{R}, C(b) = \text{sign}(b)$

- **Пример 2**: классификация на M классов $Y = \{1, \ldots, M\}$:

  $a(x) = \arg\max\limits_{y \in Y} b_y(x)$

где $R = \mathbb{R}^M, b : X \to \mathbb{R}^M, C(b_1, \ldots, b_M) \equiv \arg\max\limits_{y \in Y} b_y$

- **Пример 3**: регрессия, $Y = R = \mathbb{R}$

  $C(b) \equiv b$ — решающее правило не нужно

Примеры композиций (корректирующих операций)

- **Пример 1**: Простое голосование (Simple Voting)

$$F(b_1(x), \ldots, b_T(x)) = \frac{1}{T} \sum_{t=1}^{T} b_t(x), x \in X$$

- **Пример 2**: Взвешенное голосование (Weighted voting)

$$F(b_1(x), \ldots, b_T(x)) = \sum_{t=1}^{T} \alpha_t b_t(x), x \in X, \alpha_t \in \mathbb{R}$$

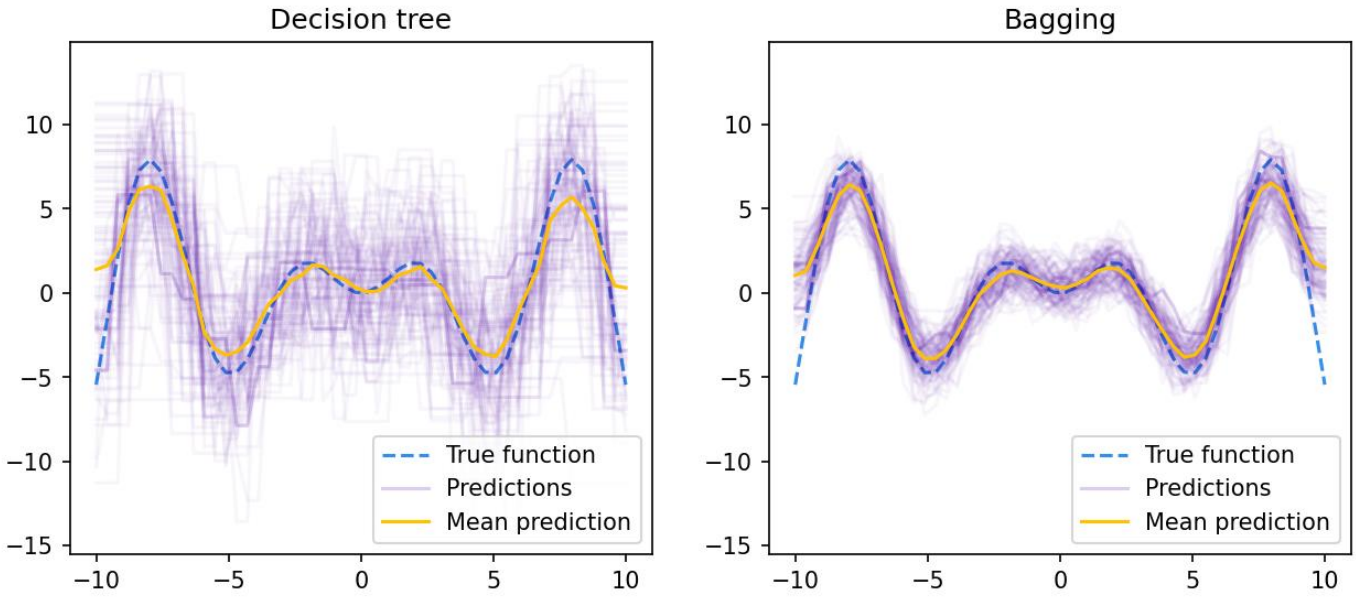
- **Пример 3**: Смесь алгоритмов (Mixture of Experts)

$$F(b_1(x), \ldots, b_T(x)) = \sum_{t=1}^{T} g_t(x) b_t(x), x \in X,$$
$$g_t : X \to \mathbb{R}$$

Стохастические методы построения композиций

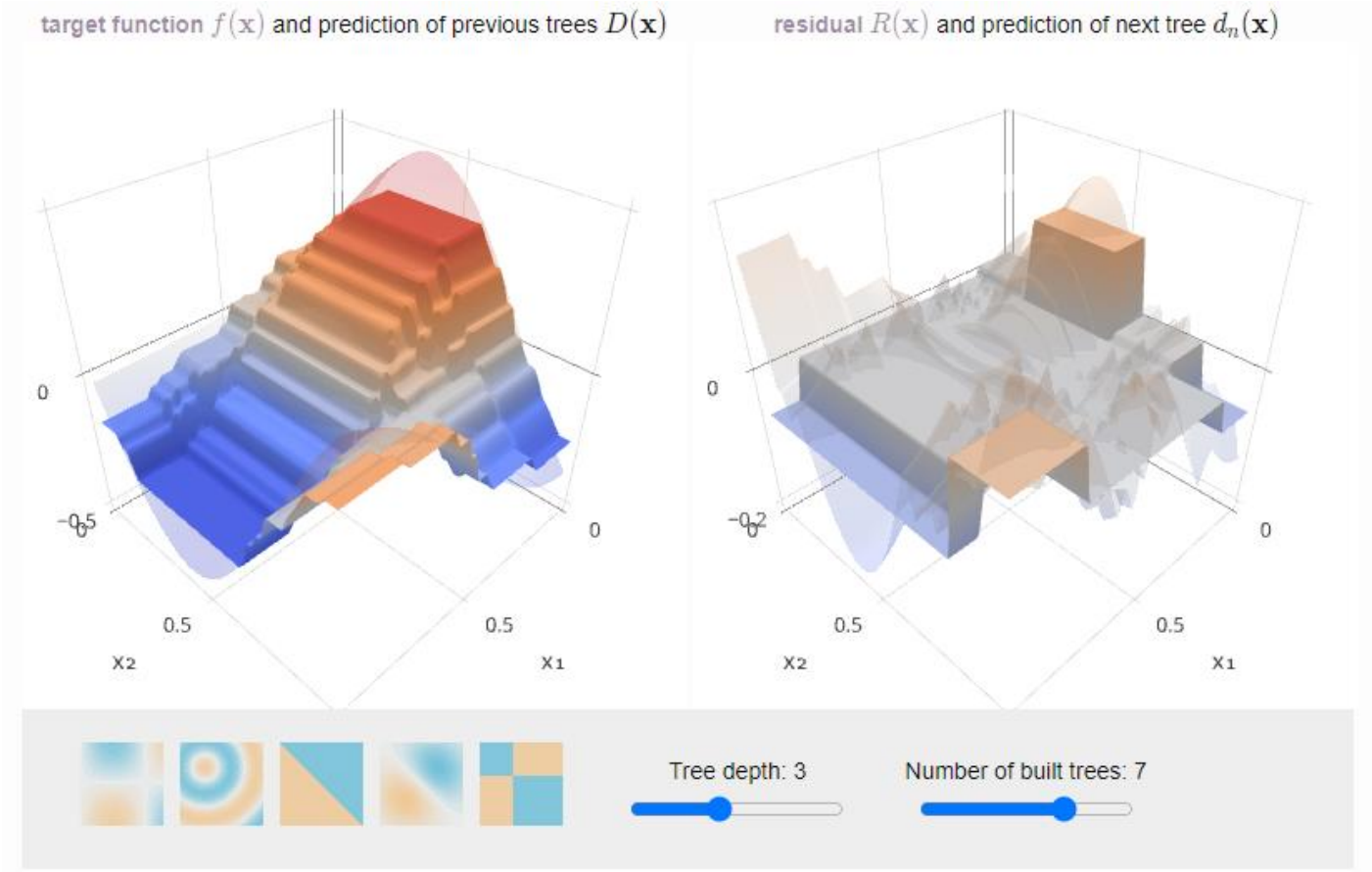
Чтобы алгоритмы в композиции были различными

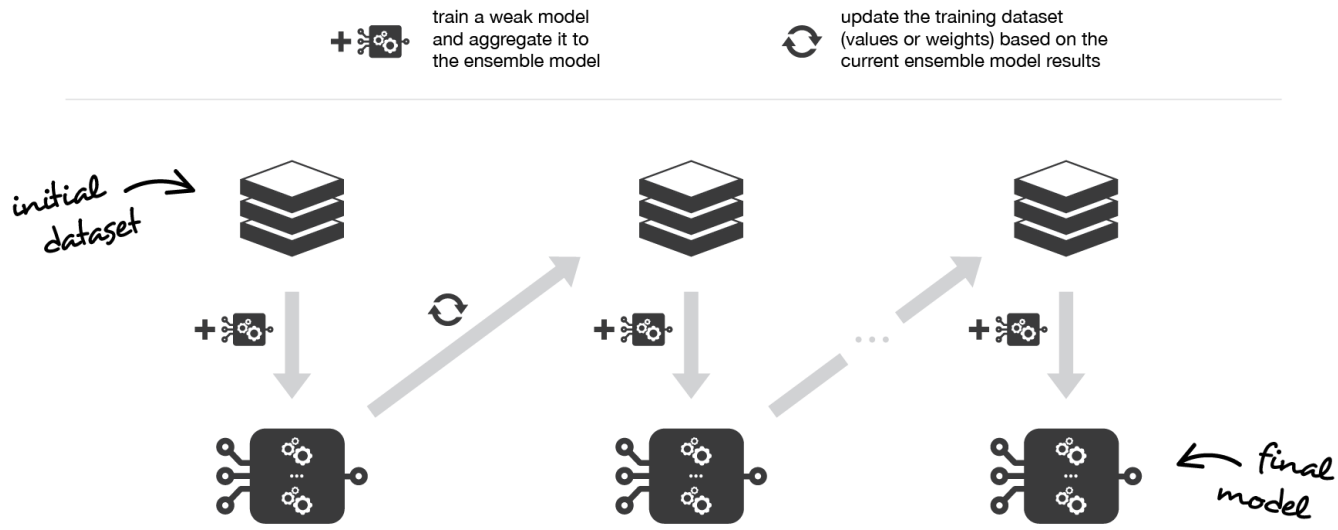
- их обучают по (случайным) подвыборкам
  - bagging = bootstrap aggregation. [Breiman, 1996]: подвыборки длины ℓ с повторениями. Доля объектов, попадающих в выборку $\left(1 - \frac{1}{e}\right) \approx 0.632$
- либо по (случайным) подмножествам признаков
  - RSM = random subspace method, [Ho, 1998]



Бустинг

https://arogozhnikov.github.io/2016/06/24/gradient_boosting_explained.html
(https://arogozhnikov.github.io/2016/06/24/gradient_boosting_explained.html)





Бустинг для задачи классификации с двумя классами

Возьмём $Y = \{\pm 1\}, b_t : X \to \{-1, [0], +1\}, C(b) = \text{sign}(b)$

Взвешенное голосование

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

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:

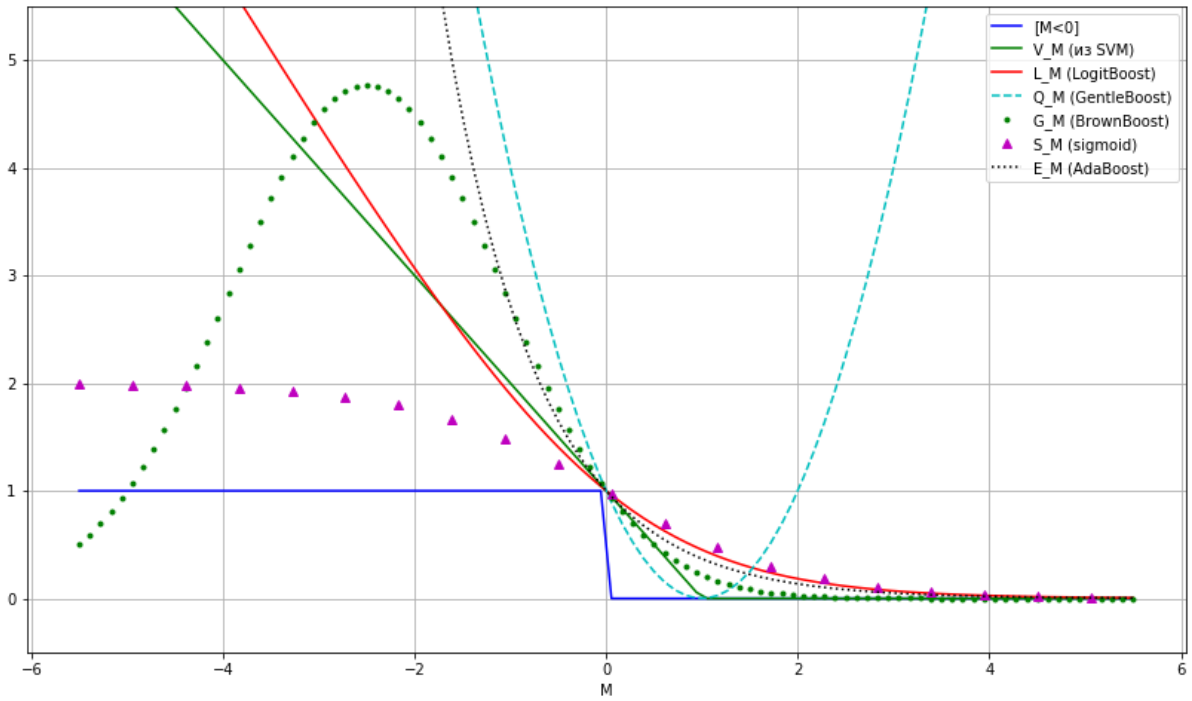
- фиксация $\alpha_1 b_1(x), \ldots, \alpha_{t-1} b_{t-1}(x)$ при добавлении $\alpha_t b_t(x)$
- гладкая аппроксимация пороговой функции потерь $[M < 0]$

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

In [1]:
```
import matplotlib.pyplot as plt
import numpy as np

x = np.linspace(-5.5, 5.5, num=100)
acc_loss = x < 0
V_M = (1 - x) * ((1 - x) > 0)
H_M = acc_loss * (-x)
L_M = np.log2(1 + np.exp(-x))
Q_M = (1 - x)**2
c, s = 0.25, 5.0
G_M = np.exp(-c * x * (x + s))
S_M = 2 * (1 + np.exp(x))**(-1)
E_M = np.exp(-x)
```

In [9]:
```
fig, ax = plt.subplots()

ax.set_xlabel('M')
ax.plot(x, acc_loss, 'b', label='[M<0]')
ax.plot(x, V_M, 'g', label='V_M (из SVM)')
ax.plot(x, L_M, 'r', label='L_M (LogitBoost)')
ax.plot(x, Q_M, '--c', label='Q_M (GentleBoost)')
ax.plot(x, G_M, '.g', label='G_M (BrownBoost)')
ax.plot(x[::5], S_M[::5], '^m', label='S_M (sigmoid)')
ax.plot(x, E_M, 'k:', label='E_M (AdaBoost)')

ax.set_ylim(-0.5, 5.5)
ax.grid(True)
fig.set_size_inches(14, 8)
plt.legend(loc='best')
```

Out[9]: <matplotlib.legend.Legend at 0x19d001b6e88>



Экспоненциальная аппроксимация пороговой функции потерь

Оценка функционала качества Q_T сверху:

$$Q_T \leq \tilde{Q}_T = \sum_{i=1}^{\ell} \underbrace{\exp(-y_i \sum_{t=1}^{T-1} \alpha_t b_t(x_i))}_{w_i} \exp(-y_i \alpha_T b_T(x_i))$$

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

Взвешенное число ошибочных (negative) и правильных (positive) классификаций при векторе весов $U^\ell = (u_1, \ldots, u_\ell)$:

$$N(b, U^\ell) = \sum_{i=1}^{\ell} u_i [b(x_i) = -y_i]$$

$$P(b, U^\ell) = \sum_{i=1}^{\ell} u_i [b(x_i) = y_i]$$

$1 - N - P$ — взвешенное число отказов от классификации

Классический вариант AdaBoost

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

Теорема (Freund, Schapire, 1995)

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

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

$$b_T = \arg\min_{b \in B} N(b, \tilde{W}^\ell)$$

$$\alpha_T = \frac{1}{2} \ln \frac{1 - N(b_T, \tilde{W}^\ell)}{N(b_T, \tilde{W}^\ell)}$$

Алгоритм AdaBoost

Вход: обучающая выборка X^ℓ, параметр T

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

1. инициализировать веса объектов: $w_i = \frac{1}{\ell}, i = 1, \ldots, \ell$
2. **для всех** $t = 1, \ldots, T$
3. обучить базовый алгоритм:

   $b_t = \arg\min_b N(b, W^\ell)$
4. $\alpha_t = \frac{1}{2} \ln \frac{1 - N(b, W^\ell)}{N(b, W^\ell)}$
5. обновить веса объектов:

   $w_i = w_i \exp(-\alpha_t y_i b_t(x_i)),$
   $i = 1, \ldots, \ell$
6. нормировать веса объектов:

   $w_0 = \sum_{j=1}^{\ell} w_j$
   $w_i = w_i / w_0, \; i = 1, \ldots, \ell$

Эвристики и рекомендации

- **Базовые классификаторы (weak classifiers)**
  - решающие деревья — используются чаще всего
  - пороговые правила (data stumps)

    $B = \{b(x) = [f_j(x) \lessgtr \theta] | j = 1, \ldots, n, \theta \in \mathbb{R}\}$
  - для SVM бустинг обычно не эффективен
- **Отсев шума**: отбросить объекты с наибольшими w_i
- **Дополнительный критерий остановки**: увеличение частоты ошибок на контрольной выборке

Вопрос 1: Почему бустинг работает?

Вопрос 2: Какие недостатки у AdaBoost?

Недостатки AdaBoost

- Чрезмерная чувствительность к выбросам из-за e^M
- AdaBoost строит «чёрные ящики» — громоздкие неинтерпретируемые композиции из сотен алгоритмов
- Требуются достаточно большие обучающие выборки (бэггинг обходится более короткими)

Способы устранения:

- Другие аппроксимации пороговой функции потерь
- Непрерывные вещественные базовые алгоритмы $b_t : X \to \mathbb{R}$
- Явная оптимизация отступов, без аппроксимации
- Менее жадные стратегии наращивания композиции

Градиентный бустинг для произвольной функции потерь

Линейная (выпуклая) комбинация базовых алгоритмов:

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

Функционал качества с произвольной функцией потерь $\mathcal{L}(a, y)$

$$Q(\alpha, b, X^\ell) = \sum_{i=1}^{\ell} \underbrace{\mathcal{L}(\underbrace{\sum_{t=1}^{T-1} \alpha_t b_t(x_i)}_{f_{T-1,i}} + \alpha b(x_i), y_i)}_{f_{T,i}} \to \min_{\alpha, b}$$

$f_{T-1,i}$ — текущее приближение

$f_{T,i}$ — следующее приближение

Friedman G. Greedy Function Approximation: A Gradient Boosting Machine. 1999.

Параметрическая аппроксимация градиентного шага

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

$f_0 =$ начальное приближение

$f_{T,i} = f_{T-1,i} - \alpha g_i,\ i = 1, \ldots, \ell$

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

Наблюдение: это очень похоже на одну итерацию бустинга!

$f_{T,i} = f_{T-1,i} + \alpha b(x_i),\ i = 1, \ldots, \ell$

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

$$b_T = \arg\min_b \sum_{i=1}^\ell (b(x_i) + g_i)^2$$

Алгоритм градиентного бустинга (Gradient Boosting)

Вход: обучающая выборка X^ℓ, параметр T

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

1. инициализация: $f_i = 0, i = 1, \ldots, \ell$
2. **для всех** $t = 1, \ldots, T$
3. базовый алгоритм, приближающий антиградиент:

   $$b_t = \arg\min_b \sum_{i=1}^\ell (b(x_i) + \mathcal{L}'(f_i, y_i))^2$$
4. задача одномерной минимизации: $\alpha_t = \arg\min_{\alpha > 0} \sum_{i=1}^\ell \mathcal{L}(f_i + \alpha b_t(x_i), y_i)$
5. обновление вектора значений на объектах выборки:

   $$f_i = f_i + \alpha_t b_t(x_i)), i = 1, \ldots, \ell$$

Стохастический градиентный бустинг (SGB)

Идея: на шагах 3-5 использовать не всю выборку X^ℓ, а случайную подвыборку без возвращений.

Преимущества:

- улучшается качество
- улучшается сходимость
- уменьшается время обучения

Friedman G. Stochastic Gradient Boosting, 1999.

> **Вопрос 3:** Почему всё так идеально?

Регрессия и AdaBoost

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

- $b_T(x)$ обучается на разностях $y_i - \sum\limits_{t=1}^{T-1} \alpha_t b_t(x_i)$
- если регрессия линейная, то α_t можно не обучать

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

- GB в точности совпадает с AdaBoost

XGBoost — популярная и быстрая реализация GB над деревьями

Деревья регрессии и классификации (CART):

$$b(x) = \sum_{j=1}^{J} w_j [x \in R_j],$$

где R_j — область пространства, покрываемая листом j, w_j — веса листьев, J — число листьев в дереве.

Функционал качества с суммой L_0, L_1, L_2 регуляризаторов:

$$Q(b, \{w_j\}_{j=1}^{J}, X^\ell) = \sum_{i=1}^{\ell} \mathcal{L} \left(\sum_{t=1}^{T-1} \alpha_t b_t(x_i) + \alpha b(x_i, y_i) \right) + \gamma \sum_{j=1}^{J} [w_j \neq 0] + \mu \sum_{j=1}^{J} |w_j| + \frac{\lambda}{2} \sum_{j=1}^{J} w_j^2 \to \min_{b, \{u}$$

По w_j задача имеет аналитическое решение.

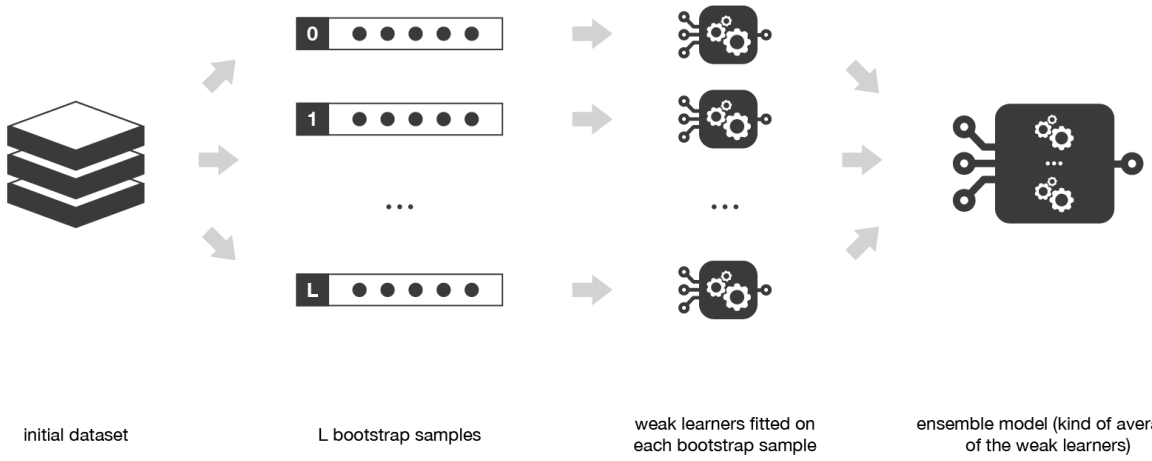
Ещё популярные реализации градиентного бустинга над случайными деревьями: LightGBM, CatBoost

Резюме по бустингу

- Композиции позволяют решать сложные задачи, которые плохо решаются отдельными алгоритмами
- Обучать композицию целиком слишком сложно. Поэтому обучаем базовые алгоритмы по одному
- 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
- Стохастический вариант SGB — лучше и быстрее
- Чаще всего GB применяется к решающим деревьям
- Градиентный бустинг над Oblivious Decision Trees = Catboost (раньше был Yandex.MatrixNet)

Сравнение: boosting — bagging — RSM

- Бустинг лучше для больших обучающих выборок и для классов с границами сложной формы
- Бэггинг и RSM лучше для коротких обучающих выборок
- RSM лучше в тех случаях, когда признаков больше, чем объектов, или когда много неинформативных признаков
- Бэггинг и RSM эффективно распараллеливаются, бустинг выполняется строго последовательно



https://towardsdatascience.com/ensemble-methods-bagging-boosting-and-stacking-c9214a10a205 (https://towardsdatascience.com/ensemble-methods-bagging-boosting-and-stacking-c9214a10a205)

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

Подбор числа деревьев T можно делать по критерию out-of-bag: число ошибок на объектах x_i, если не учитывать голоса деревьев, для которых x_i был обучающим:

$$\text{out-of-bag}(a) = \sum_{i=1}^{\ell} \left[\text{sign}(\sum_{t=1}^{T} [x_i \notin U_t] b_t(x_i)) \neq y_i \right] \to \min$$

Это несмещенная оценка обобщающей способности.

Спасибо за внимание!

Обоснование бустинга

Усиление понятия частоты ошибок алгоритма $a(x) = \text{sign}(b(x))$

$\nu_\theta(a, X^\ell) = \frac{1}{\ell}\sum\limits_{i=1}^{\ell}[b(x_i)y_i \leq \theta]$

Обычная частота ошибок $\nu_0(a, X^\ell) \leq \nu_\theta(a, X^\ell)$ при $\theta > 0$

Теорема (Freund, Schapire, Bartlett, 1998)

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

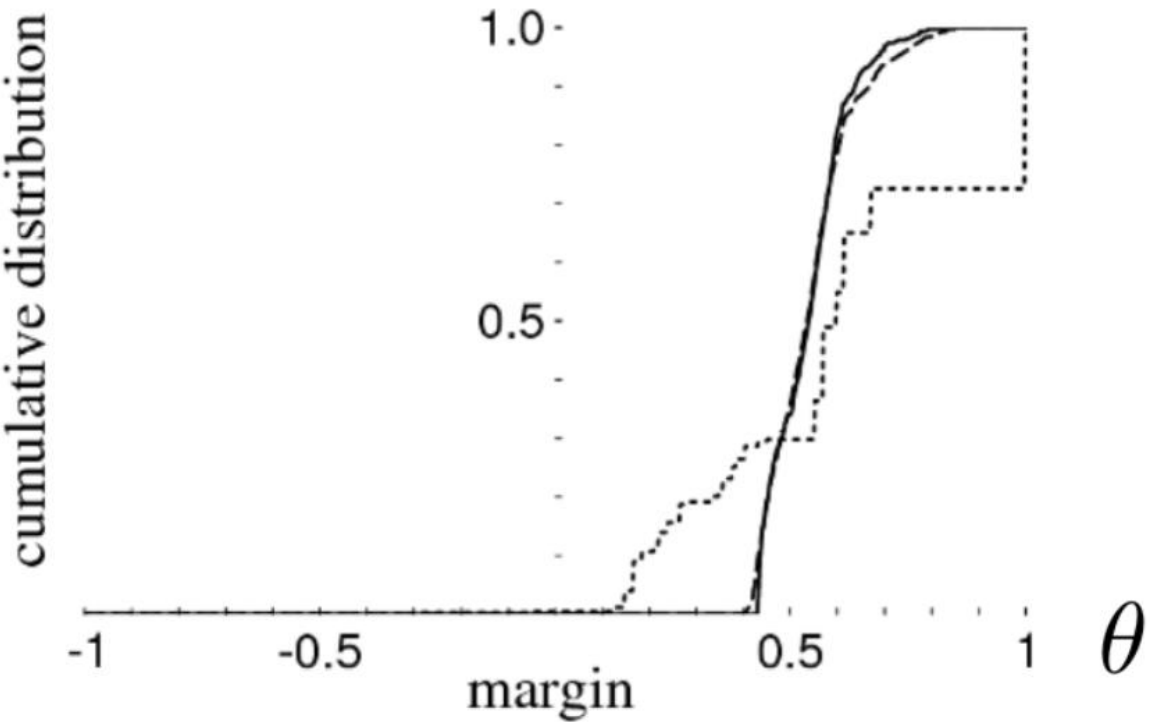
$P[ya(x) < 0] \leq \nu_\theta(a, X^\ell) + C\sqrt{\frac{\ln|B|\ln\ell}{\ell\theta^2} + \frac{1}{\ell}\ln\frac{1}{\eta}}$

Основной вывод: оценка зависит от $|B|$, но не от T.

Голосование не увеличивает сложность эффективно используемого множества алгоритмов.

Обоснование бустинга: что же всё-таки происходит?

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



- С ростом T распределение отступов сдвигается вправо, то есть бустинг «раздвигает» классы в пространстве векторов растущей размерности $(b_1(x), \ldots, b_T(x))$
- Значит, в оценке можно уменьшить второй член, увеличив θ и не изменив $\nu_\theta(a, X^l)$
- Можно уменьшить второй член, если уменьшить |B|, то есть взять простое семейство базовых алгоритмов