Разработка эффективной реализации методов, основанных на поиске оптимального баланса между дивергенцией и точностью аппроксимации

Д. Д. Аристархов

ВМК МГУ

Декабрь 2024 г.

Постановка задачи

Дана выборка $S = (X_1, y_1), \ldots, (X_m, y_m)$, где X_i — вектор признакового описания объекта, y_i — метка объекта. Рассматривается задача регресии: $X_i \in \mathbb{R}^n$, $y_i \in \mathbb{R}$. Требуется построить ансамбль базовых алгоритмов $A_1(X), \ldots, A_k(X)$, предсказывающих значения метки по вектору признаков.

Дисперсия ансамбля

Рассматриваем ошибку ансамбля $\mathcal{A}(x) = \frac{1}{k}\sum_i^k A_i(x)$

Разложение ошибки ансамбля

$$L(\mathcal{A}) = \underbrace{\mathbb{E}_{x,y}\left[\left(y - \mathbb{E}[y|x]\right)^2\right]}_{\text{Шум}} + \underbrace{\mathbb{E}_{x,y}\left[\left(\mathbb{E}_X\left[A_i(X)(x)\right] - \mathbb{E}[y|x]\right)^2\right]}_{\text{Смещение}}$$

$$+ \underbrace{\frac{1}{k}\mathbb{E}_{x,y}\left[\mathbb{E}_X\left[\left(A_i(X)(x) - \mathbb{E}_X\left[A_i(X)(x)\right]\right)^2\right]\right]}_{\text{Дисперсия } A_i}$$

$$+ \underbrace{\frac{k(k-1)}{k^2}\mathbb{E}_{x,y}\left[\mathbb{E}_X\left[\left(A_i(X)(x) - \mathbb{E}_X\left[A_i(X)(x)\right]\right)\left(A_j(X)(x) - \mathbb{E}_X\left[A_j(X)(x)\right]\right)\right]\right]}_{\text{Ковариация } A_i, A_j}$$

Дисперсия ансамбля

- Шум — свойство выборки, не зависит от модели
- Смещение — равно смещению базового алгоритма, поэтому берем базовые алгоритмы с маленьким смещением, например, глубокие деревья
- Дисперсия A_i — уменьшается в k раз при увеличении количества базовых алгоритмов
- Ковариация A_i, A_j — ?

Дисперсия ансамбля

Для уменьшения ковариации используются следующие подходы:

- Бэггинг. Каждый алгоритм обучается на случайной подвыборке, сгенерированной из выборки с помощью бутстрэпа, т.е. выбираются m объектов с возвращениями. Таким образом, в одной выборке некоторые объекты встретятся несколько раз, а некоторые — ни разу.
- Рандомизация признаков. При построении очередного дерева в каждой вершине выбор наилучшего признака для разбиения происходит не из всех возможных признаков, а из случайно выбранной подвыборки.

Предлагаемый метод

Обозначим $L_k(X) = \frac{1}{k}\sum_{i=1}^{k} A_i(X)$, $Q_k(X) = \frac{1}{k}\sum_{i=1}^{k} A_i^2(X)$. Введем критерий, представляющие собой среднеквадратичную ошибку алгоритма и дисперсию прогнозов вычисляемых алгоритмов:

Критерий Φ_E

$$\Phi_E(A_1(X), \ldots, A_k(X)) = \frac{1}{mk}\sum_{i=1}^{k}\sum_{j=1}^{m}(y_j - A_i(X_j))^2$$

Критерий Φ_V

$$\Phi_V(A_1(X), \ldots, A_k(X)) = \frac{1}{mk}\sum_{i=1}^{k}\sum_{j=1}^{m}(L_k(X_j) - A_i(X_j))^2$$

Предлагаемый метод

При построении ансамбля предлагается предлагается явно минимизировать Φ_E и максимизировать Φ_V. Данная задача может быть сведена к минимизации Φ_G:

Критерий Φ_G

$$\Phi_G = (1 - \mu)\Phi_E - \mu\Phi_V,$$

где $\mu \in [0, 1]$ является гиперпараметром, определяющим соотношение точности и разнородности прогнозов отдельных деревьев.
В силу вычислительной сложности построения оптимального дерева, оно строится жадным образом, при котором выбирается наилучшее разбиение на каждом шаге. Ансамбль также строится жадно, т.е. каждое дерево добавляется последовательно. Поскольку каждое дерево в ансамбле строится отдельно от других, необходимо получить критерий для построения очередного дерева. Обозначим через D_E^k и D_V^k изменение функционалов Φ_E и Φ_V при включении в ансамбль дополнительного алгоритма A_{k+1}.

Предлагаемый метод

Критерий D_E^k

$$D_E^k = \Phi_E(A_1(X), ..., A_{k+1}(X)) - \Phi_E(A_1(X), \ldots, A_k(X))$$
$$= \frac{1}{m(k+1)} \sum_{j=1}^{m} (y_j - A_{k+1}(X_j))^2 + C_E,$$

где C_E не зависит от $A_{k+1}(X)$.

Критерий D_E^k

$$D_V^K = \Phi_V(A_1(X), \ldots, A_{k+1}(X)) - \Phi_V(A_1(X), \ldots, A_k(X))$$
$$= \frac{k}{m(k+1)^2} \sum_{j=1}^{m} (A_{k+1}^2(X_j) - 2L_k(X_j)A_{k+1}(X_j)) + C_V,$$

где C_V не зависит от $A_{k+1}(X)$.

Предлагаемый метод

Объединяя эти выражения, получаем функционал, который необходимо минимизировать при построении очередного дерева $A_{k+1}(X)$:

Критерий D_G^k

$$D_G^k = (1-\mu)D_E^k - \mu D_V^k = \tag{1}$$
$$= \frac{1-\mu}{m(k+1)} \sum_{j=1}^{m} (y_j - A_{k+1}(X_j))^2$$
$$- \frac{\mu k}{m(k+1)^2} \sum_{j=1}^{m} (A_{k+1}^2(X_j) - 2L_k(X_j)A_{k+1}(X_j)) + C_G,$$

где C_G не зависит от $A_{k+1}(X)$.

Предлагаемый метод

Теперь рассмотрим вопрос оптимального значения в листе дерева $A_{k+1}(X)$. Пусть в лист попали объекты $(X_{n_1}, y_{n_1}), \ldots, (X_{n_p}, y_{n_p})$. В листе алгоритм предсказывает одно значение для всех объектов, попавших в этот лист: $A_{k+1}(X_{n_j}) \equiv \tilde{A},\ j = \overline{1,p}$. Найдем производную функционала (1) относительно прогноза $\tilde{A}$:

$$\frac{\partial D_G^k}{\partial \tilde{A}} = \frac{2(1-\mu)}{p(k+1)} \sum_{j=1}^{p} (\tilde{A} - y_{n_j}) - \frac{2\mu k}{p(k+1)^2} \sum_{j=1}^{p} (\tilde{A} - L_k(X_{n_j}))$$

$$= \frac{2}{p(k+1)} \sum_{j=1}^{p} \left((1 - \mu \frac{2k+1}{k+1}) \tilde{A} - (1-\mu) y_{n_j} + \frac{k\mu}{k+1} L_k(X_{n_j}) \right)$$

Приравнивая производную к нулю, получаем оптимальный прогноз:

$$\tilde{A} = \sum_{j=1}^{p} \frac{(k+1)(1-\mu) y_{n_j} - \mu k L_k(X_{n_j})}{p(k+1-\mu(2k+1))} \tag{2}$$

Предлагаемый метод

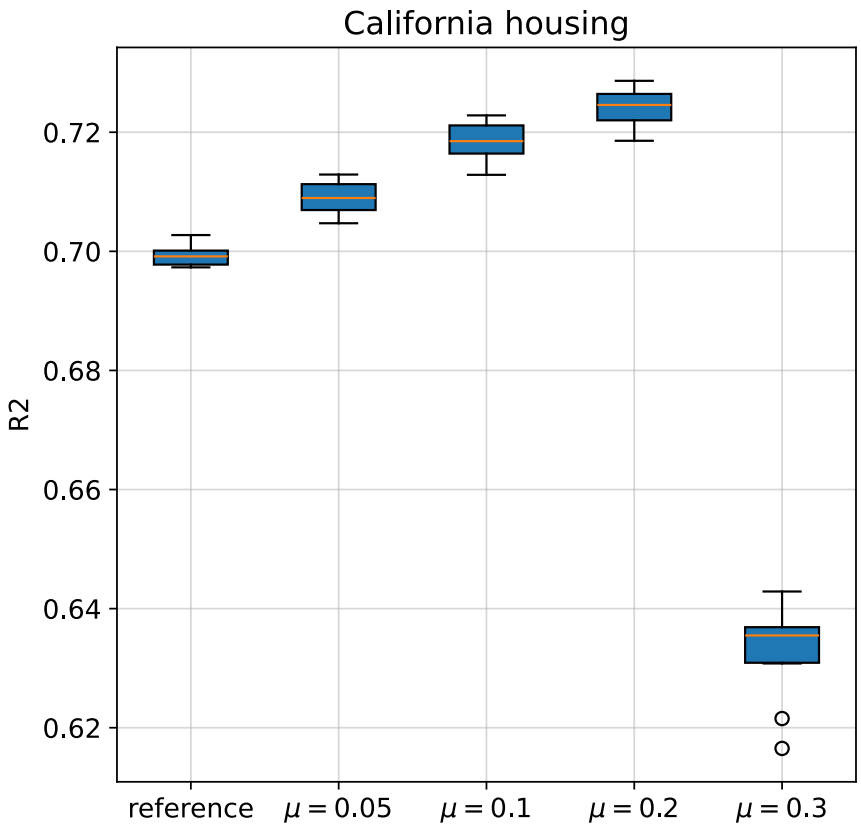
Algorithm Предложенный алгоритм

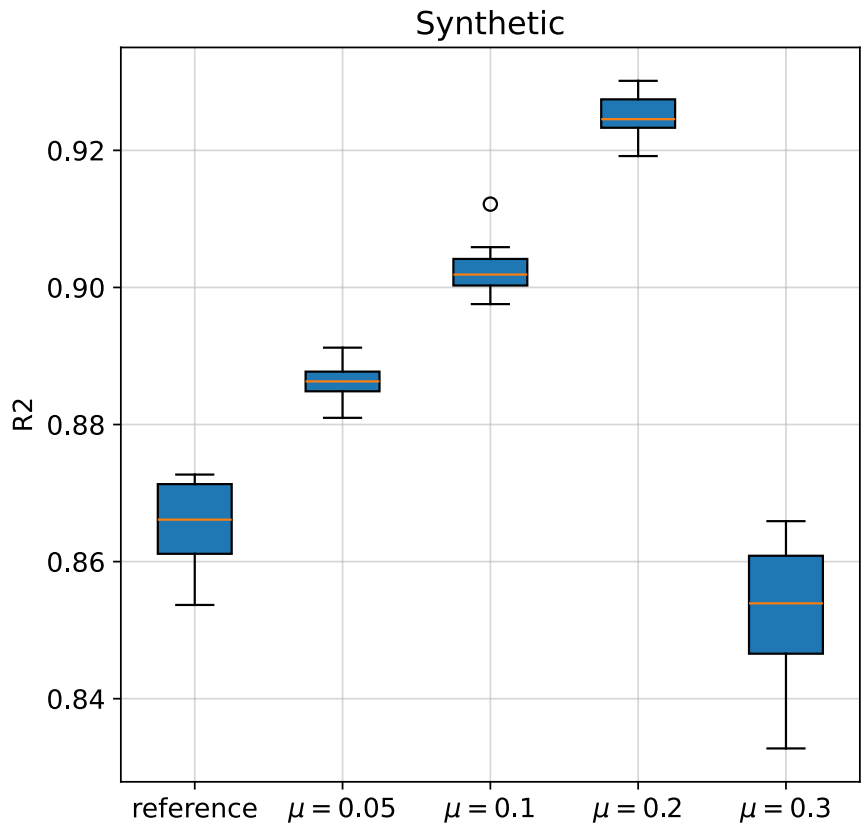
1: Сгенерировать выборку $\tilde{X}_1$ с помощью бутстрэпа
2: Построить решающее дерево $A_1(x)$ по выборке $\tilde{X}_1$, используя только среднеквадратичную ошибку
3: Вычислить $L_1(X) = A_1(X)$ для всех $X_1, \ldots, X_m$
4: **for** $k = 2, \ldots, N$ **do**
5: Сгенерировать выборку $\tilde{X}_k$ с помощью бутстрэпа
6: Построить решающее дерево $A_k(x)$ по выборке $\tilde{X}_k$, используя $L_{k-1}(X)$:
- В каждой вершине ищется оптимальное разбиение относительно функционала (1)
- Для вычисления значений в листе используется выражение (2)

7: Вычислить $L_k(X) = \frac{1}{k}((k-1)L_{k-1}(X) + A_k(X))$ для всех $X_1, \ldots, X_m$
8: **end for**
9: Вернуть композицию $\mu_N(X) = \frac{1}{N}\sum_{k=1}^{N} A_k(X)$

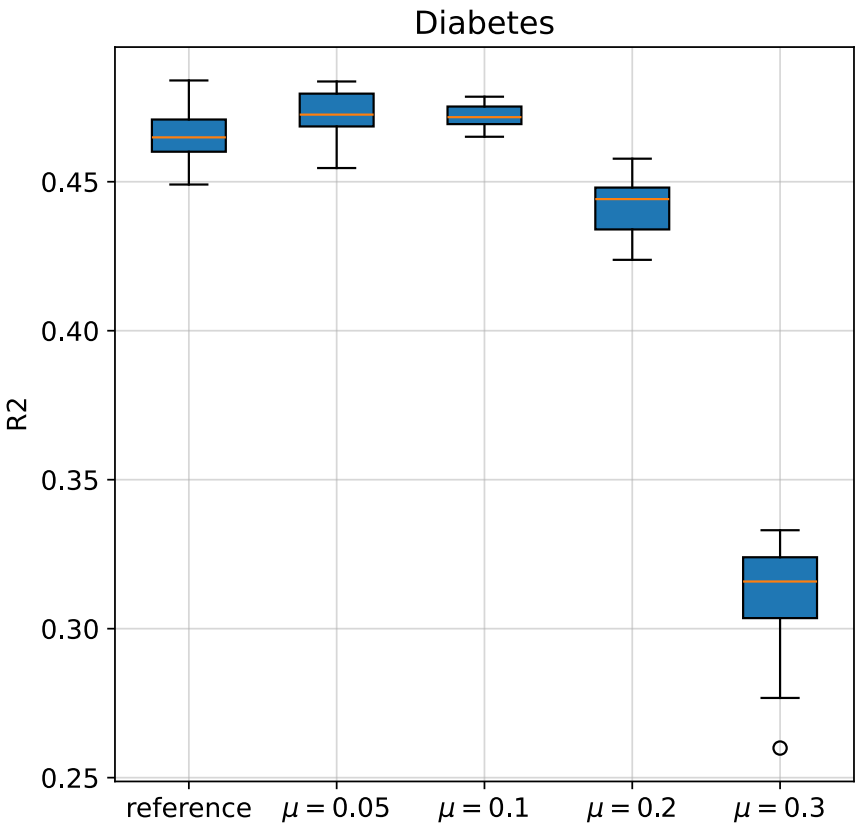
Эксперименты

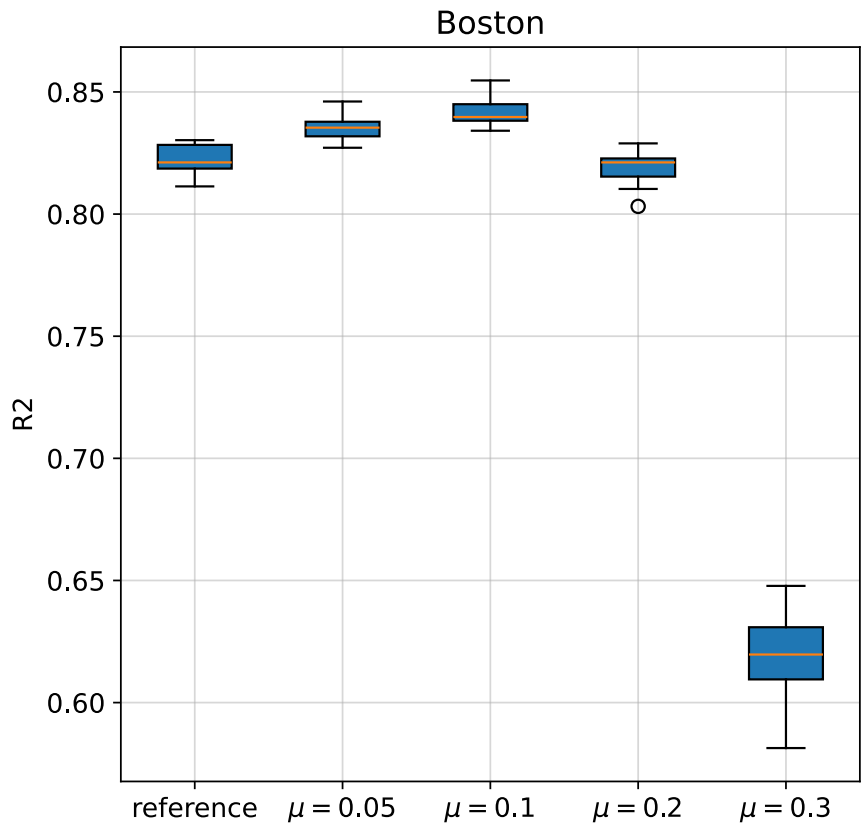
В качестве reference использовался обычный случайный лес (эквивалентно $\mu = 0.0$)





Эксперименты





Выводы

В работе был предложен новый метод ансамблирования деревьев, а также его теоретическое обоснование. Были проведены эксперименты на реальных и синтетических данных, которые показали, что метод достигает лучшего качества, чем обычный случайный лес.