

Введение в анализ данных

Лекция 13

Градиентный бустинг

Евгений Соколов

esokolov@hse.ru

НИУ ВШЭ, 2021

Случайный лес (Random Forest)

Для $n = 1, \dots, N$:

1. Сгенерировать выборку \tilde{X} с помощью бутстрапа
2. Построить решающее дерево $b_n(x)$ по выборке \tilde{X}
3. Дерево строится, пока в каждом листе не окажется не более n_{min} объектов
4. Оптимальное разбиение ищется среди q случайных признаков

Случайный лес (Random Forest)

Для $n = 1, \dots, N$:

1. Сгенерировать выборку \tilde{X} с помощью бутстрапа
2. Построить решающее дерево $b_n(x)$ по выборке \tilde{X}
3. Дерево строится, пока в каждом листе не окажется не более n_{min} объектов
4. Оптимальное разбиение ищется среди q случайных признаков

Выбираются заново при каждом разбиении!

Случайный лес (Random Forest)

- Регрессия:

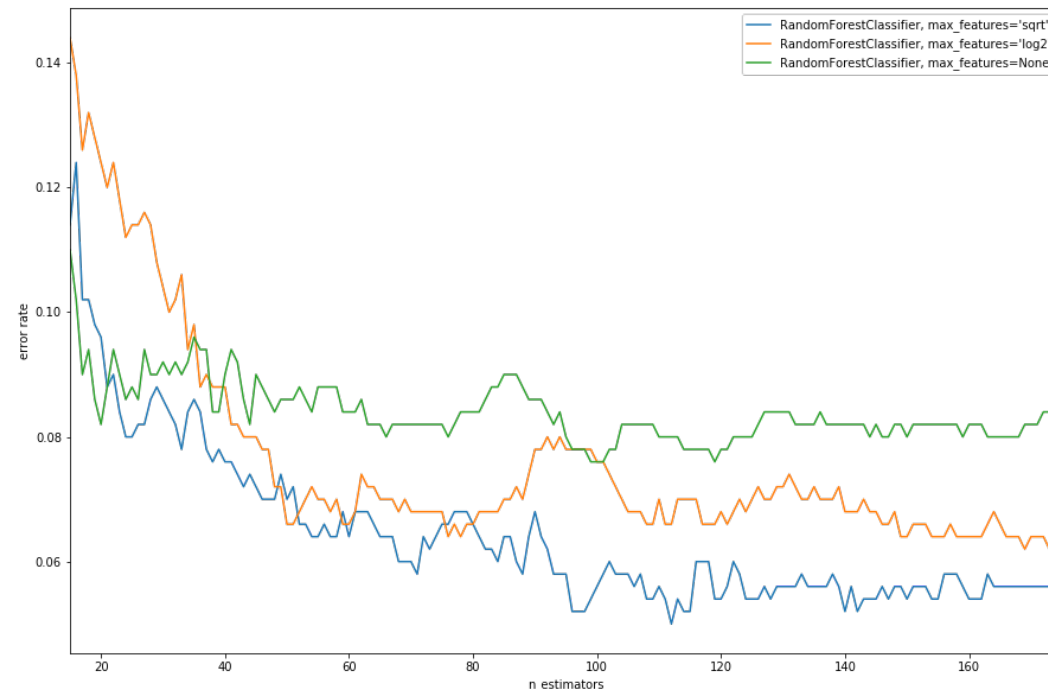
$$a(x) = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N b_n(x)$$

- Классификация:

$$a(x) = \arg \max_{y \in \mathbb{Y}} \sum_{n=1}^N [b_n(x) = y]$$

Универсальный метод

- Ошибка сначала убывает, а затем выходит на один уровень
- Случайный лес не переобучается при росте N



Out-of-bag

- Каждое дерево обучается примерно на 63% данных
- Остальные объекты — как бы тестовая выборка для дерева
- X_n — обучающая выборка для $b_n(x)$
- Можно оценить ошибку на новых данных:

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

Важность признаков

- Перестановочный метод для проверки важности j -го признака
- Перемешиваем соответствующий столбец в матрице «объекты-признаки» для тестовой выборки
- Измеряем качество модели
- Чем сильнее оно упало, тем важнее признак

Резюме

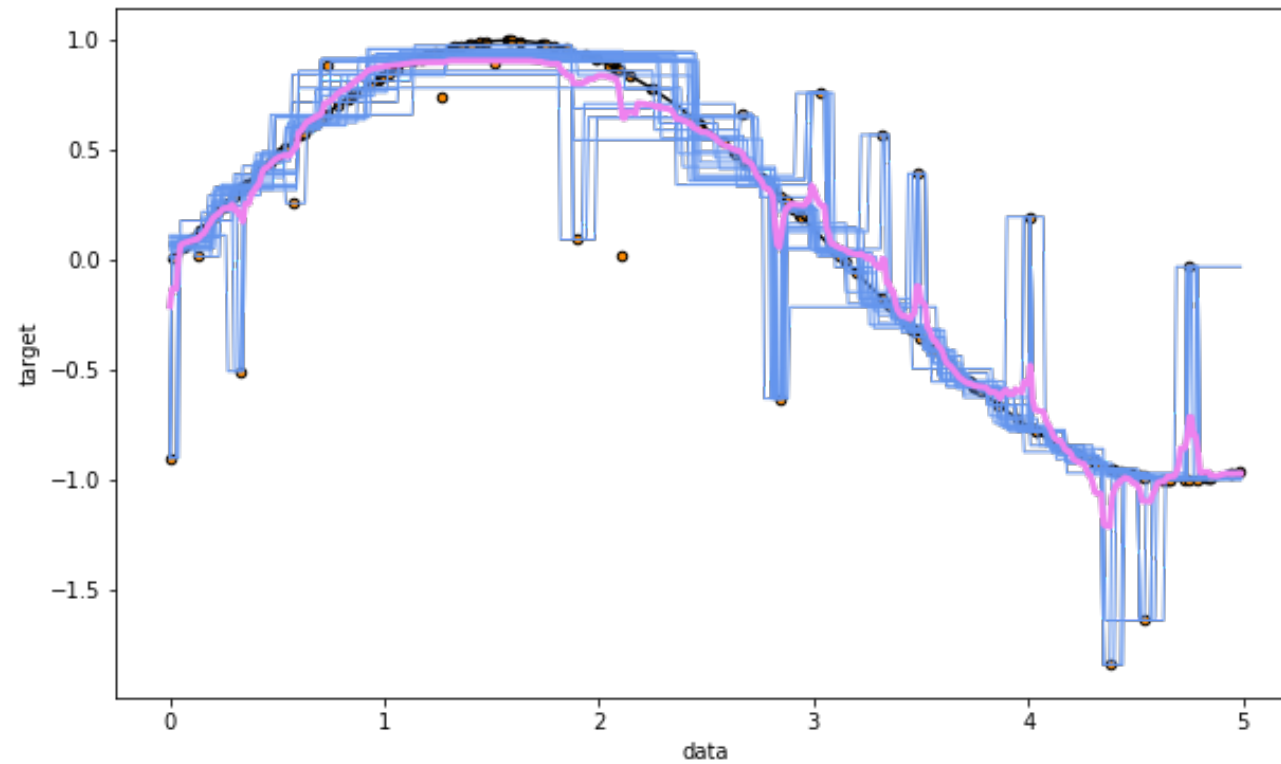
- Случайный лес — метод на основе бэггинга, в котором делается попытка повысить разнообразие деревьев
- Метод практически без гиперпараметров
- Можно оценить обобщающую способность без тестовой выборки

Исправление ошибок моделей
и идея бустинга

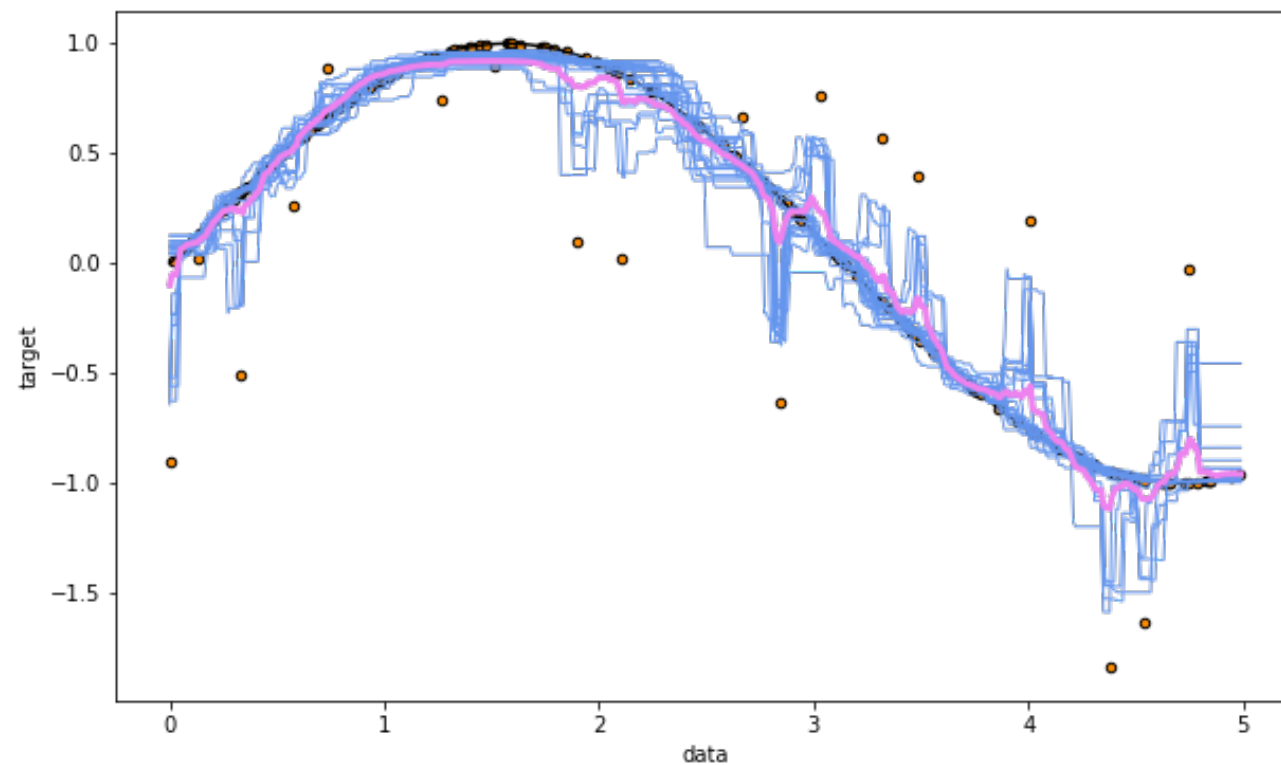
Бэггинг

- Смещение $a_N(x)$ такое же, как у $b_n(x)$
- Разброс $a_N(x)$:
- $\frac{1}{N} (\text{разброс } b_n(x)) + \text{ковариация}(b_n(x), b_m(x))$
- 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

Идея бустинга

- Возьмём простые базовые модели
- Будем строить композицию последовательно и жадно
- Каждая следующая модель будет строиться так, чтобы максимально корректировать ошибки построенных моделей

Идея бустинга

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

- Обучение первой модели:

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

Идея бустинга

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

- Обучение N -й модели:

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

Идея бустинга

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

- Обучение N -й модели:

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

Идея бустинга

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

- Обучение N -й модели:

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

- Непонятно, как обучать дерево на такое в общем случае

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

Идея бустинга

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

- Обучение N -й модели:

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

Бустинг для MSE

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

- Обучение N -й модели:

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

Бустинг для MSE

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

- Обучение N -й модели:

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

Бустинг для MSE

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

- Обучение N -й модели:

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

Бустинг для MSE

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

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

Первая итерация

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

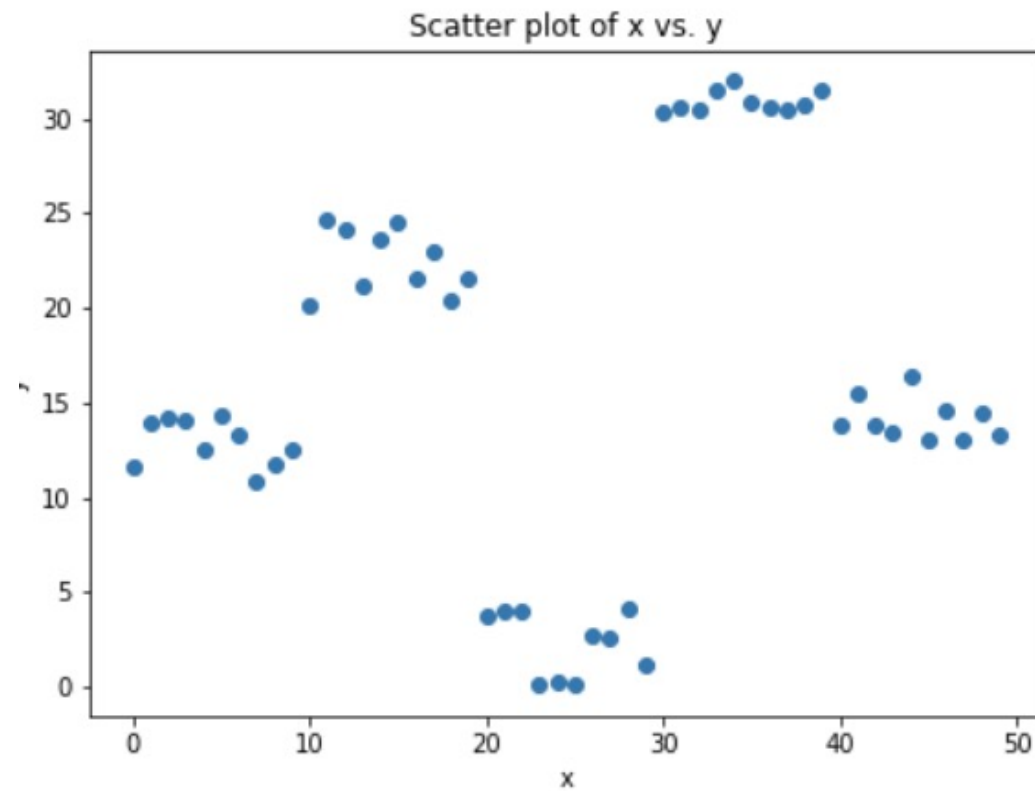
Вторая итерация

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

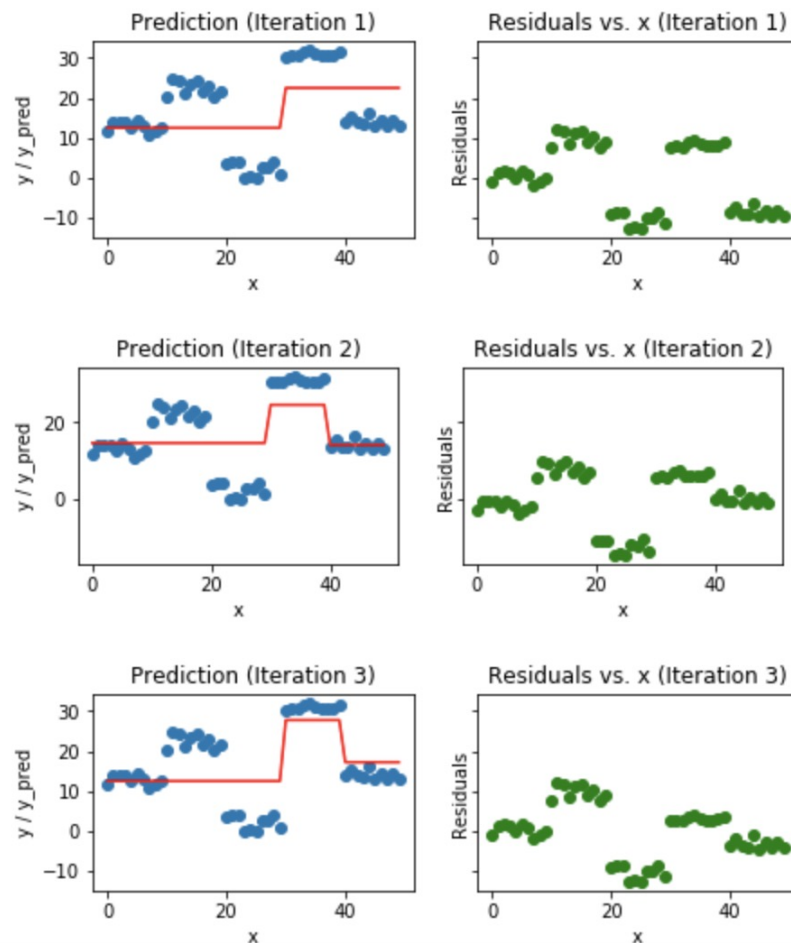
Третья итерация

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

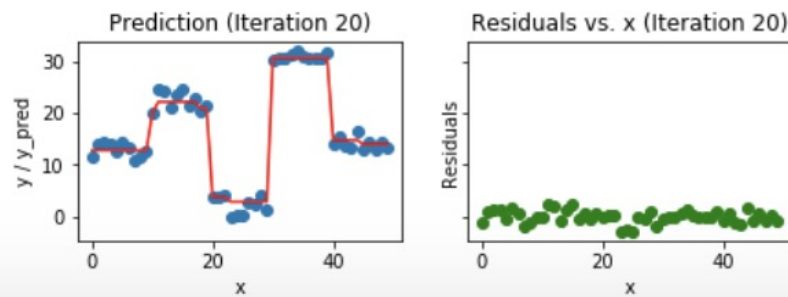
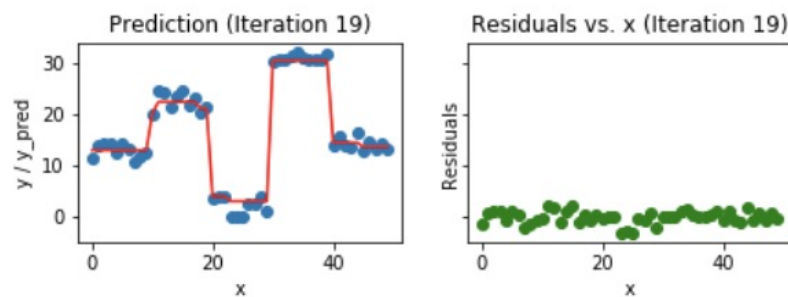
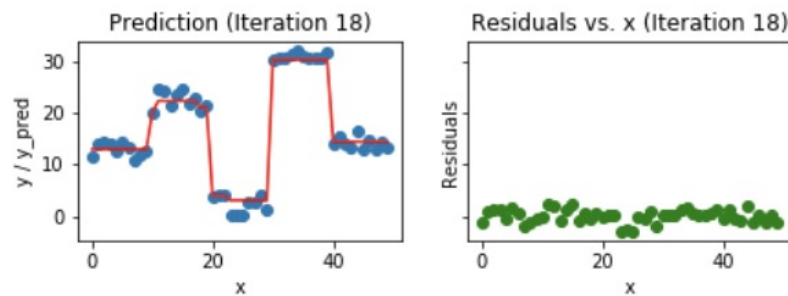
Визуализация



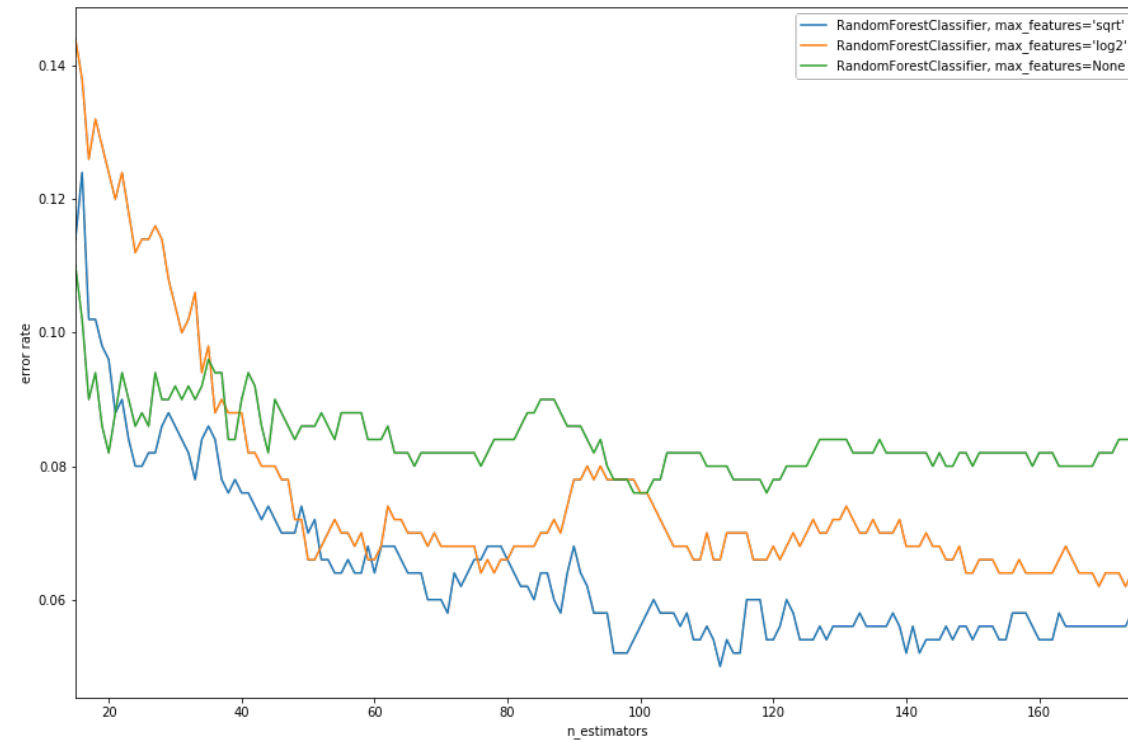
Визуализация



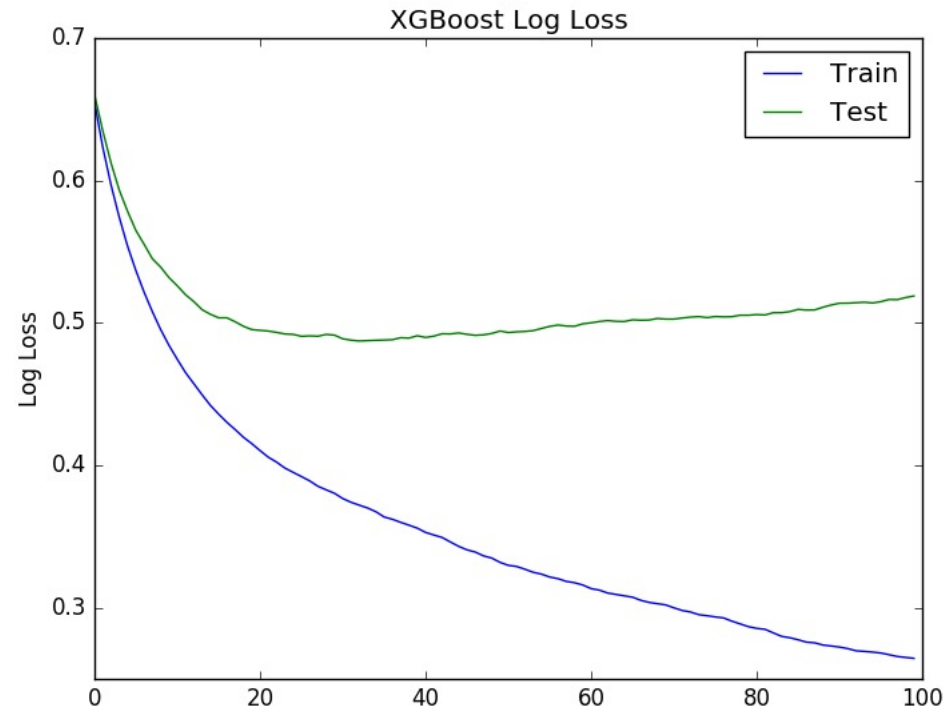
Визуализация



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

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

- Обучение N -й модели:

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

Задача обучения базовой модели

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

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

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

Логистическая функция потерь

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

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

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

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

- Если $y_i = a_{N-1}(x_i)$, то объект не участвует в обучении
- Иначе $y_i - a_{N-1}(x_i) = \pm 2$

Логистическая функция потерь

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

- 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

Логистическая функция потерь

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

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

MSLE

- Mean Squared Logarithmic Error (среднеквадратичная логарифмическая ошибка)

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

MSLE

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

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

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

$$\frac{1}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} (\log(\textcolor{red}{b}_N(\textcolor{red}{x}_i) + 1) - \log(\textcolor{blue}{y}_i - \textcolor{blue}{a}_{N-1}(\textcolor{blue}{x}_i) + 1))^2 \rightarrow \min_{b_N(x)}$$

MSLE

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

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

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

$$\frac{1}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} (\log(\textcolor{red}{b}_N(\textcolor{red}{x}_i) + 1) - \log(\textcolor{blue}{y}_i - \textcolor{blue}{a}_{N-1}(\textcolor{blue}{x}_i) + 1))^2 \rightarrow \min_{b_N(x)}$$

- Аргумент второго логарифма может оказаться отрицательным

MSLE

$$\frac{1}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} (\log(\textcolor{red}{b}_N(\textcolor{red}{x}_i) + 1) - \log(\textcolor{blue}{y}_i - \textcolor{blue}{a}_{N-1}(\textcolor{blue}{x}_i) + 1))^2 \rightarrow \min_{b_N(x)}$$

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

Задача обучения базовой модели

- Обучение N -й модели:

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

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

Задача обучения базовой модели

- Обучение N -й модели:

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

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

Задача обучения базовой модели

- Обучение N -й модели:

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

- Посчитаем производную:

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

Задача обучения базовой модели

- Посчитаем производную:

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

- 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

Градиентный бустинг

- Обучение N -й модели:

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

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

Градиентный бустинг

- Обучение N -й модели:

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

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

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

Градиентный бустинг для MSE

$$\begin{aligned} s_i^{(N)} &= -\frac{\partial}{\partial z} L(y_i, z) \Big|_{z=a_{N-1}(x_i)} = -\frac{\partial}{\partial z} \frac{1}{2} (z - y_i)^2 \Big|_{z=a_{N-1}(x_i)} = \\ &= -(a_{N-1}(x_i) - y_i) = y_i - a_{N-1}(x_i) \end{aligned}$$

Градиентный бустинг для MSE

$$\begin{aligned} s_i^{(N)} &= -\frac{\partial}{\partial z} L(y_i, z) \Big|_{z=a_{N-1}(x_i)} = -\frac{\partial}{\partial z} \frac{1}{2} (z - y_i)^2 \Big|_{z=a_{N-1}(x_i)} = \\ &= -(a_{N-1}(x_i) - y_i) = y_i - a_{N-1}(x_i) \end{aligned}$$

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

Градиентный бустинг для MSE

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

- $y_i = 10, a_{N-1}(x_i) = 5: s_i = 5$
- $y_i = 10, a_{N-1}(x_i) = 15: s_i = -5$

Градиентный бустинг для асимметричной функции

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

$$\begin{aligned} s_i^{(N)} &= - \frac{\partial}{\partial z} L(y_i, z) \Big|_{z=a_{N-1}(x_i)} = \\ &= [z < y](y - z) + 5[z \geq y](y - z) \end{aligned}$$

Градиентный бустинг для асимметричной функции

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

- $y_i = 10, a_{N-1}(x_i) = 5: s_i = 5$
- $y_i = 10, a_{N-1}(x_i) = 15: s_i = -25$

Градиентный бустинг для логистической функции потерь

$$\begin{aligned} s_i^{(N)} &= -\frac{\partial}{\partial z} L(y_i, z) \Big|_{z=a_{N-1}(x_i)} = \\ &= -\frac{\partial}{\partial z} \log(1 + \exp(-y_i z)) \Big|_{z=a_{N-1}(x_i)} = \\ &= \frac{y_i}{1 + \exp(y_i a_{N-1}(x_i))} \end{aligned}$$

Градиентный бустинг для логистической функции потерь

$$\begin{aligned} s_i^{(N)} &= -\frac{\partial}{\partial z} L(y_i, z) \Big|_{z=a_{N-1}(x_i)} = \\ &= -\frac{\partial}{\partial z} \log(1 + \exp(-y_i z)) \Big|_{z=a_{N-1}(x_i)} = \\ &= \frac{y_i}{1 + \exp(y_i a_{N-1}(x_i))} \end{aligned}$$

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

Градиентный бустинг для логистической функции потерь

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

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

Градиентный бустинг для логистической функции потерь

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

- $y_i = +1, a_{N-1}(x_i) = -0.7: s_i = 0.67$
- $y_i = +1, a_{N-1}(x_i) = 2: s_i = 0.12$

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)