Введение в искусственный интеллект. Машинное обучение

Тема: Ансамблирование моделей. Три метода на букву "Б"

Бабин Д.Н., Иванов И.Е., Петюшко А.А.

кафедра Математической Теории Интеллектуальных Систем







• Стековое обобщение



- Стековое обобщение
 - Блендинг





- Стековое обобщение
 - Блендинг
 - Стекинг





- Стековое обобщение
 - Блендинг
 - Стекинг
- Бутстрэп и пэстинг

- Стековое обобщение
 - Блендинг
 - Стекинг
- Бутстрэп и пэстинг
- Бэггинг

- Стековое обобщение
 - Блендинг
 - Стекинг
- Бутстрэп и пэстинг
- Бэггинг
- Бустинг с дискретными базовыми алгоритмами





Ансамблирование

Ансамбль методов

Это способ использования нескольких обучающих алгоритмов с целью получения лучшей эффективности предсказания (классификации или регрессии), чем могли бы получить от каждого обучающего алгоритма по отдельности

Ансамблирование

Ансамбль методов

Это способ использования нескольких обучающих алгоритмов с целью получения лучшей эффективности предсказания (классификации или регрессии), чем могли бы получить от каждого обучающего алгоритма по отдельности

Замечание. Ансамбль методов не бесконечен: состоит из конкретного конечного множества альтернативных моделей.



Ансамблирование

Ансамбль методов

Это способ использования нескольких обучающих алгоритмов с целью получения лучшей эффективности предсказания (классификации или регрессии), чем могли бы получить от каждого обучающего алгоритма по отдельности

Замечание. Ансамбль методов не бесконечен: состоит из конкретного конечного множества альтернативных моделей.

Основные представители:

- Стековое обобщение (stacked generalization)
- Бэггинг (bagging)
- Бустинг (boosting)





Рассмотрим часто применяемый на практике метод простого голосования: $a(x) = \frac{1}{T} \sum_{t=1}^{T} b_t(x)$, где T – число базовых алгоритмов регрессии, $b_t(x)$ – сами базовые алгоритмы (для классификации с sign все рассматривается аналогично).

Рассмотрим часто применяемый на практике метод простого голосования: $a(x) = \frac{1}{T} \sum_{t=1}^{T} b_t(x)$, где T – число базовых алгоритмов регрессии, $b_t(x)$ – сами базовые алгоритмы (для классификации с sign все рассматривается аналогично). Если $y^*(x)$ – истинная функция ответа, то среднеквадратичная ошибка для базового алгоритма: $E(b_t(x) - y^*(x))^2 = E\varepsilon_t^2(x)$.

Рассмотрим часто применяемый на практике метод простого голосования: $\frac{1}{2}$

 $a(x) = \frac{1}{T} \sum_{t=1}^{T} b_t(x)$, где T – число базовых алгоритмов регрессии, $b_t(x)$ – сами базовые алгоритмы (для классификации с sign все рассматривается аналогично).

Если $y^*(x)$ – истинная функция ответа, то среднеквадратичная ошибка для базового алгоритма: $E(b_t(x)-y^*(x))^2=E\varepsilon_t^2(x)$.

Средняя среднеквадратичная ошибка по всем базовым алгоритмам:

$$E_{avg} = \frac{1}{T}E\sum_{t=1}^{T} \varepsilon_t^2(x).$$

Рассмотрим часто применяемый на практике метод простого голосования:

 $a(x) = \frac{1}{T} \sum_{t=1}^{T} b_t(x)$, где T – число базовых алгоритмов регрессии, $b_t(x)$ – сами базовые алгоритмы (для классификации с sign все рассматривается аналогично).

Если $y^*(x)$ – истинная функция ответа, то среднеквадратичная ошибка для базового алгоритма: $E(b_t(x)-y^*(x))^2=E\varepsilon_t^2(x)$.

Средняя среднеквадратичная ошибка по всем базовым алгоритмам:

$$E_{avg} = \frac{1}{T}E\sum_{t=1}^{T} \varepsilon_t^2(x).$$

Предположим, что ошибки несмещены и некоррелированы: $E arepsilon_t(x) = 0, E arepsilon_t arepsilon_u = 0, t
eq u.$



Рассмотрим часто применяемый на практике метод простого голосования:

 $a(x) = \frac{1}{T} \sum_{t=1}^{T} b_t(x)$, где T – число базовых алгоритмов регрессии, $b_t(x)$ – сами базовые алгоритмы (для классификации с sign все рассматривается аналогично).

Если $y^*(x)$ – истинная функция ответа, то среднеквадратичная ошибка для базового алгоритма: $E(b_t(x)-y^*(x))^2=E\varepsilon_t^2(x)$.

Средняя среднеквадратичная ошибка по всем базовым алгоритмам:

$$E_{avg} = \frac{1}{T}E\sum_{t=1}^{T} \varepsilon_t^2(x).$$

Предположим, что ошибки несмещены и некоррелированы: $E\varepsilon_t(x)=0, E\varepsilon_t\varepsilon_u=0, t\neq u$.

Найдем среднеквадратичную ошибку для a(x):

$$E_{ens} = E(a(x) - y^*(x))^2 = E(\frac{1}{T} \sum_{t=1}^{T} b_t(x) - y^*(x))^2 = E(\frac{1}{T} \sum_{t=1}^{T} \varepsilon_t)^2 = \frac{1}{T^2} E(\sum_{t=1}^{T} \varepsilon_t^2 + \sum_{t \neq u} \varepsilon_t \varepsilon_u) = \frac{1}{T^2} E\sum_{t=1}^{T} \varepsilon_t^2(x) = \frac{1}{T} E_{avg}.$$



Рассмотрим часто применяемый на практике метод простого голосования:

 $a(x) = \frac{1}{T} \sum_{t=1}^{T} b_t(x)$, где T – число базовых алгоритмов регрессии, $b_t(x)$ – сами базовые алгоритмы (для классификации с sign все рассматривается аналогично).

Если $y^*(x)$ – истинная функция ответа, то среднеквадратичная ошибка для базового алгоритма: $E(b_t(x)-y^*(x))^2=E\varepsilon_t^2(x)$.

Средняя среднеквадратичная ошибка по всем базовым алгоритмам:

$$E_{avg} = \frac{1}{T}E\sum_{t=1}^{T} \varepsilon_t^2(x).$$

Предположим, что ошибки несмещены и некоррелированы: $E\varepsilon_t(x)=0, E\varepsilon_t\varepsilon_u=0, t\neq u.$

Найдем среднеквадратичную ошибку для a(x):

$$E_{ens} = E(a(x) - y^*(x))^2 = E(\frac{1}{T} \sum_{t=1}^{T} b_t(x) - y^*(x))^2 = E(\frac{1}{T} \sum_{t=1}^{T} \varepsilon_t)^2 = \frac{1}{T^2} E(\sum_{t=1}^{T} \varepsilon_t^2 + \sum_{t \neq u} \varepsilon_t \varepsilon_u) = \frac{1}{T^2} E\sum_{t=1}^{T} \varepsilon_t^2(x) = \frac{1}{T} E_{avg}.$$

Таким образом, простое голосование позволило уменьшить средний квадрат ошибки в T раз!



Предположим, что мы можем обучить T базовых алгоритмов.

После этого мы обучаем комбинирующий алгоритм верхнего уровня (мета-алгоритм), входом для которого являются выходы базовых.



Предположим, что мы можем обучить T базовых алгоритмов.

После этого мы обучаем комбинирующий алгоритм верхнего уровня (мета-алгоритм), входом для которого являются выходы базовых.

Схема стекового обобщения

- lacktriangledown Обучаем по отдельности каждый базовый алгоритм $b_t(x), t=1,\ldots,T$
- \bigcirc Фиксируем алгоритмы $b_t(x)$
- **③** Обучаем комбинирующий алгоритм верхнего уровня $a(x) = a(b_1(x), \dots, b_T(x))$



Предположим, что мы можем обучить T базовых алгоритмов.

После этого мы обучаем комбинирующий алгоритм верхнего уровня (мета-алгоритм), входом для которого являются выходы базовых.

Схема стекового обобщения

- lacktriangledown Обучаем по отдельности каждый базовый алгоритм $b_t(x), t=1,\ldots,T$
- $oldsymbol{0}$ Фиксируем алгоритмы $b_t(x)$
- **③** Обучаем комбинирующий алгоритм верхнего уровня $a(x) = a(b_1(x), \dots, b_T(x))$

Замечание 1. Простое (или взвешенное) голосование является частным случаем стекового обобщения с необучаемым комбинирующим алгоритмом верхнего уровня.



Предположим, что мы можем обучить T базовых алгоритмов.

После этого мы обучаем комбинирующий алгоритм верхнего уровня (мета-алгоритм), входом для которого являются выходы базовых.

Схема стекового обобщения

- lacktriangledown Обучаем по отдельности каждый базовый алгоритм $b_t(x), t=1,\ldots,T$
- $oldsymbol{0}$ Фиксируем алгоритмы $b_t(x)$
- **©** Обучаем комбинирующий алгоритм верхнего уровня $a(x) = a(b_1(x), \dots, b_T(x))$

Замечание 1. Простое (или взвешенное) голосование является частным случаем стекового обобщения с необучаемым комбинирующим алгоритмом верхнего уровня. Замечание 2. Стековое обобщение - один из главных методов достижения успехов на Kaggle :)



¹Wolpert D. (1992) "Stacked Generalization"

Ранее мы рассмотрели общую схему, теперь рассмотрим конкретные варианты реализации на практике.

Ранее мы рассмотрели общую схему, теперь рассмотрим конкретные варианты реализации на практике.

Разбиваем обучающую выборку на две части

Ранее мы рассмотрели общую схему, теперь рассмотрим конкретные варианты реализации на практике.

- Разбиваем обучающую выборку на две части
- На одной части обучаем базовые алгоритмы





Ранее мы рассмотрели общую схему, теперь рассмотрим конкретные варианты реализации на практике.

- Разбиваем обучающую выборку на две части
- 2 На одной части обучаем базовые алгоритмы
- 🔞 На второй получаем ответы базовых алгоритмов и обучаем мета-алгоритм





Ранее мы рассмотрели общую схему, теперь рассмотрим конкретные варианты реализации на практике.

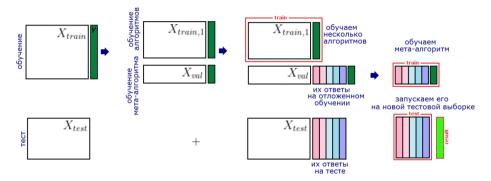
- Разбиваем обучающую выборку на две части
- На одной части обучаем базовые алгоритмы
- На второй получаем ответы базовых алгоритмов и обучаем мета-алгоритм
- На тесте сначала получаем выходы базовых алгоритмов, к которым затем применяем мета-алгоритм





Блендинг – визуализация

Рассмотрим схему² блендинга:





Проблема классического блендинга: ни базовые алгоритмы, ни мета-алгоритм не видят всей обучающей выборки. Поэтому можно немного усовершенствовать подход (подход "вширь").

• Разбиваем обучающую выборку на две части

- Разбиваем обучающую выборку на две части
- На одной части обучаем базовые алгоритмы



- Разбиваем обучающую выборку на две части
- На одной части обучаем базовые алгоритмы
- На второй части получаем их ответы (мета-признаки)



- Разбиваем обучающую выборку на две части
- 2 На одной части обучаем базовые алгоритмы
- На второй части получаем их ответы (мета-признаки)
- Обучаем мета-алгоритм



- Разбиваем обучающую выборку на две части
- На одной части обучаем базовые алгоритмы
- На второй части получаем их ответы (мета-признаки)
- Обучаем мета-алгоритм
- **5** Повторяем пп. 2-4 $M \ge 2$ раз для других разбиений обучающей выборки



- Разбиваем обучающую выборку на две части
- На одной части обучаем базовые алгоритмы
- На второй части получаем их ответы (мета-признаки)
- Обучаем мета-алгоритм
- **⑤** Повторяем пп. 2-4 $M \ge 2$ раз для других разбиений обучающей выборки
- На тесте сначала получаем M наборов выходов базовых алгоритмов, обученных на разных разбиениях, затем для каждого набора запускаем соответствующий мета-алгоритм

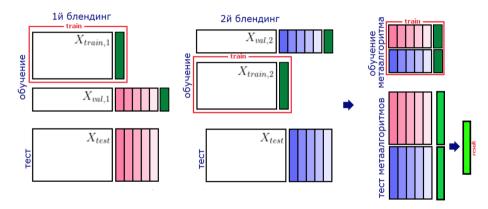


- Разбиваем обучающую выборку на две части
- 2 На одной части обучаем базовые алгоритмы
- На второй части получаем их ответы (мета-признаки)
- Обучаем мета-алгоритм
- lacktriangle Повторяем пп. 2-4 $M \geq 2$ раз для других разбиений обучающей выборки
- На тесте сначала получаем M наборов выходов базовых алгоритмов, обученных на разных разбиениях, затем для каждого набора запускаем соответствующий мета-алгоритм
- После чего усредняем М ответов мета-алгоритмов



Блендинг – визуализация усовершенствования

Рассмотрим схему усовершенствованного ³ блендинга:



Стекинг (Stacking)

Попытка решения той же проблемы: алгоритмы не видят всей обучающей выборки.



⁴Van der Laan, M. J., Polley, E. C., and Hubbard, A. E. (2007). "Super learner"

Стекинг (Stacking)

Попытка решения той же проблемы: алгоритмы не видят всей обучающей выборки. Опишем алгоритм $Super\ Learner^4$:

 $oldsymbol{0}$ Разбиваем обучающую выборку на k частей



Попытка решения той же проблемы: алгоритмы не видят всей обучающей выборки. Опишем алгоритм **Super Learner**⁴:

- lacktriangle Разбиваем обучающую выборку на k частей
- Обучаем базовые алгоритмы с помощью кросс-валидации



Попытка решения той же проблемы: алгоритмы не видят всей обучающей выборки. Опишем алгоритм **Super Learner**⁴:

- Разбиваем обучающую выборку на k частей
- Обучаем базовые алгоритмы с помощью кросс-валидации
 - ullet Обучаем каждый алгоритм на k-1 частях и тестируем на hold-out части,
 - Повторяем так для каждой из k частей,
 - Обучаем каждый базовый алгоритм на всей обучающей выборке,



Попытка решения той же проблемы: алгоритмы не видят всей обучающей выборки. Опишем алгоритм **Super Learner**⁴:

- $oldsymbol{0}$ Разбиваем обучающую выборку на k частей
- Обучаем базовые алгоритмы с помощью кросс-валидации
 - ullet Обучаем каждый алгоритм на k-1 частях и тестируем на hold-out части,
 - Повторяем так для каждой из k частей,
 - Обучаем каждый базовый алгоритм на всей обучающей выборке,
- Обучаем мета-алгоритм на hold-out выходах (мета-признаках) базовых алгоритмов по всей обучающей выборке



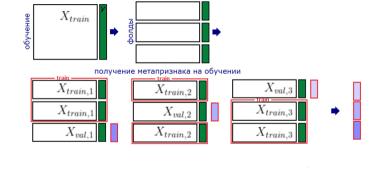
Попытка решения той же проблемы: алгоритмы не видят всей обучающей выборки. Опишем алгоритм $Super\ Learner^4$:

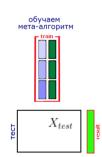
- Разбиваем обучающую выборку на k частей
- Обучаем базовые алгоритмы с помощью кросс-валидации
 - ullet Обучаем каждый алгоритм на k-1 частях и тестируем на hold-out части,
 - Повторяем так для каждой из k частей,
 - Обучаем каждый базовый алгоритм на всей обучающей выборке,
- Обучаем мета-алгоритм на hold-out выходах (мета-признаках) базовых алгоритмов по всей обучающей выборке
- На тесте сначала получаем выходы базовых алгоритмов, к которым применяем мета-алгоритм



Стекинг – визуализация

Рассмотрим схему⁵ стекинга:







⁵https://dyakonov.org

• Блендинг очень прост в реализации



- Блендинг очень прост в реализации
- Усовершенствованный блендинг зачастую не дает прироста по сравнению с обычным усреднением ответов базовых алгоритмов, обученных на всей обучающей выборке

- Блендинг очень прост в реализации
- Усовершенствованный блендинг зачастую не дает прироста по сравнению с обычным усреднением ответов базовых алгоритмов, обученных на всей обучающей выборке
- Стекинг решает проблему обучения базовых алгоритмов на всем обучающем множестве, однако не всегда от этого есть ощутимый прирост

- Блендинг очень прост в реализации
- Усовершенствованный блендинг зачастую не дает прироста по сравнению с обычным усреднением ответов базовых алгоритмов, обученных на всей обучающей выборке
- Стекинг решает проблему обучения базовых алгоритмов на всем обучающем множестве, однако не всегда от этого есть ощутимый прирост
- Стековое обобщение подходит для использования алгоритмов разной природы

- Блендинг очень прост в реализации
- Усовершенствованный блендинг зачастую не дает прироста по сравнению с обычным усреднением ответов базовых алгоритмов, обученных на всей обучающей выборке
- Стекинг решает проблему обучения базовых алгоритмов на всем обучающем множестве, однако не всегда от этого есть ощутимый прирост
- Стековое обобщение подходит для использования алгоритмов разной природы
- В качестве мета-алгоритмов проще всего использовать регрессоры

- Блендинг очень прост в реализации
- Усовершенствованный блендинг зачастую не дает прироста по сравнению с обычным усреднением ответов базовых алгоритмов, обученных на всей обучающей выборке
- Стекинг решает проблему обучения базовых алгоритмов на всем обучающем множестве, однако не всегда от этого есть ощутимый прирост
- Стековое обобщение подходит для использования алгоритмов разной природы
- В качестве мета-алгоритмов проще всего использовать регрессоры
- Выходы базовых алгоритмов часто коррелируют, поэтому лучше использовать недообученные версии этих алгоритмов

- Блендинг очень прост в реализации
- Усовершенствованный блендинг зачастую не дает прироста по сравнению с обычным усреднением ответов базовых алгоритмов, обученных на всей обучающей выборке
- Стекинг решает проблему обучения базовых алгоритмов на всем обучающем множестве, однако не всегда от этого есть ощутимый прирост
- Стековое обобщение подходит для использования алгоритмов разной природы
- В качестве мета-алгоритмов проще всего использовать регрессоры
- Выходы базовых алгоритмов часто коррелируют, поэтому лучше использовать недообученные версии этих алгоритмов
- Можно для обучения мета-алгоритма использовать не только выходы базовых алгоритмов, но и исходные данные; однако так лучше не делать



Время для вопросов





Бутстрэп (Bootstrap)





Бутстрэп (Bootstrap)



Английская поговорка: "To pull oneself over a fence by one's bootstraps". Русский аналог: Мюнхгаузен, вытаскивающий себя за волосы из болота.



Бутстрэп

Определение

Бутстрэп - это методика тестирования на основе случайного семплирования (либо само это семплирование) из выборки **с возвращением**.



Бутстрэп

Определение

Бутстрэп - это методика тестирования на основе случайного семплирования (либо само это семплирование) из выборки **с возвращением**.

• Бутстрэп 6 позволяет оценивать параметры алгоритмов (такие как смещение, разброс, доверительный интервал и т.п.) на основе семплированных выборок

Бутстрэп

Определение

Бутстрэп - это методика тестирования на основе случайного семплирования (либо само это семплирование) из выборки **с возвращением**.

- Бутстрэп 6 позволяет оценивать параметры алгоритмов (такие как смещение, разброс, доверительный интервал и т.п.) на основе семплированных выборок
- Многократная генерация выборок происходит методом Монте-Карло на базе имеющейся выборки (т.о., из одной выборки генерируем любое число выборок)

О семплировании с возвращением

Теорема

При использовании бутстрэпа для генерации выборки той же мощности N, что и исходная выборка, доля объектов, не попавших в сгенерированную выборку, стремится к e^{-1} при $N \to \infty$.

О семплировании с возвращением

Теорема

При использовании бутстрэпа для генерации выборки той же мощности N, что и исходная выборка, доля объектов, не попавших в сгенерированную выборку, стремится к e^{-1} при $N \to \infty$.

Доказательство. На каждом шаге все объекты попадают в новую выборку с возвращением равновероятно, т.е отдельный объект – с вероятностью $\frac{1}{N}$. Вероятность того, что объект не попадёт в новую выборку после N шагов: $(1-\frac{1}{N})^N$. Вспоминаем второй замечательный предел:

$$\lim_{N o \infty} (1 - \frac{1}{N})^N = \lim_{N o \infty} \left((1 - \frac{1}{N})^{-N} \right)^{-1} = e^{-1}$$
. Ч.т.д.



О семплировании с возвращением

Теорема

При использовании бутстрэпа для генерации выборки той же мощности N, что и исходная выборка, доля объектов, не попавших в сгенерированную выборку, стремится к e^{-1} при $N \to \infty$.

Доказательство. На каждом шаге все объекты попадают в новую выборку с возвращением равновероятно, т.е отдельный объект – с вероятностью $\frac{1}{N}$. Вероятность того, что объект не попадёт в новую выборку после N шагов: $(1-\frac{1}{N})^N$.

Вспоминаем второй замечательный предел:

$$\lim_{N o\infty}(1-rac{1}{N})^N=\lim_{N o\infty}\left((1-rac{1}{N})^{-N}
ight)^{-1}=e^{-1}$$
. Ч.т.д.

Замечание. Т.о. можно тестировать алгоритм на оставшихся $e^{-1} \approx 37\%$ данных.



• **Вопрос**. Что будет, если мы **запретим** при процедуре бутстрэп-семплирования **возвращать** объекты назад в выборку для их возможного выбора еще раз?



⁷Breiman, L. (1999). "Pasting small votes for classification in large databases and on-line" (2) (2) (2)

- **Вопрос**. Что будет, если мы **запретим** при процедуре бутстрэп-семплирования **возвращать** объекты назад в выборку для их возможного выбора еще раз?
- Ответ. Получим т.н. процедуру пэстинга 7 (Pasting).



⁷Breiman, L. (1999). "Pasting small votes for classification in large databases and on-line" (2) (2)

- **Вопрос**. Что будет, если мы **запретим** при процедуре бутстрэп-семплирования **возвращать** объекты назад в выборку для их возможного выбора еще раз?
- Ответ. Получим т.н. процедуру пэстинга⁷ (Pasting).



- **Вопрос**. Что будет, если мы **запретим** при процедуре бутстрэп-семплирования **возвращать** объекты назад в выборку для их возможного выбора еще раз?
- Ответ. Получим т.н. процедуру пэстинга 7 (Pasting).

Приведем пример для сравнения различных процедур семплирования.

ullet Дано: обучающая выборка, состоящая из N=5 объектов $X=\{1,2,3,4,5\}$,



⁷Breiman, L. (1999). "Pasting small votes for classification in large databases and on-line" (2) 1 (2) 2

- **Вопрос**. Что будет, если мы **запретим** при процедуре бутстрэп-семплирования **возвращать** объекты назад в выборку для их возможного выбора еще раз?
- Ответ. Получим т.н. процедуру пэстинга 7 (Pasting).

- ullet Дано: обучающая выборка, состоящая из N=5 объектов $X=\{1,2,3,4,5\}$,
- Проводим процедуру семплирования n=3 объектов,



⁷Breiman, L. (1999). "Pasting small votes for classification in large databases and on-line" (2) (2) (2)

- **Вопрос**. Что будет, если мы **запретим** при процедуре бутстрэп-семплирования **возвращать** объекты назад в выборку для их возможного выбора еще раз?
- Ответ. Получим т.н. процедуру пэстинга 7 (Pasting).

- ullet Дано: обучающая выборка, состоящая из N=5 объектов $X=\{1,2,3,4,5\}$,
- Проводим процедуру семплирования n=3 объектов,
- Бутстрэп: $\{2,2,5\},\{1,2,5\},\{2,4,4\},\dots$



- **Вопрос**. Что будет, если мы **запретим** при процедуре бутстрэп-семплирования **возвращать** объекты назад в выборку для их возможного выбора еще раз?
- Ответ. Получим т.н. процедуру пэстинга 7 (Pasting).

- ullet Дано: обучающая выборка, состоящая из N=5 объектов $X=\{1,2,3,4,5\}$,
- ullet Проводим процедуру семплирования n=3 объектов,
- Бутстрэп: $\{2,2,5\},\{1,2,5\},\{2,4,4\},\dots$
- Пэстинг: $\{2,3,5\},\{1,3,5\},\{2,3,4\},\dots$



⁷Breiman, L. (1999). "Pasting small votes for classification in large databases and on-line" (2) (2) (2) (2)

- **Вопрос**. Что будет, если мы **запретим** при процедуре бутстрэп-семплирования **возвращать** объекты назад в выборку для их возможного выбора еще раз?
- Ответ. Получим т.н. процедуру пэстинга⁷ (Pasting).

Приведем пример для сравнения различных процедур семплирования.

- ullet Дано: обучающая выборка, состоящая из ${\it N}=5$ объектов ${\it X}=\{1,2,3,4,5\}$,
- ullet Проводим процедуру семплирования n=3 объектов,
- Бутстрэп: $\{2,2,5\},\{1,2,5\},\{2,4,4\},\dots$
- Пэстинг: $\{2,3,5\},\{1,3,5\},\{2,3,4\},\dots$

Замечание. Пэстинг имеет очевидную реализацию: сначала случайно перемешиваем объекты, затем берем из них n первых.



⁷Breiman, L. (1999). "Pasting small votes for classification in large databases and on-line" () () ()

• При бутстрэпе мы можем получить практически неограниченное количество подвыборок (за счет разрешения семплирования объектов с повторением),



- При бутстрэпе мы можем получить практически неограниченное количество подвыборок (за счет разрешения семплирования объектов с повторением),
- При пэстинге мы можем получить гораздо меньше подвыборок (поскольку все элементы должны быть различны),



- При бутстрэпе мы можем получить практически неограниченное количество подвыборок (за счет разрешения семплирования объектов с повторением),
- При пэстинге мы можем получить гораздо меньше подвыборок (поскольку все элементы должны быть различны),
- Пэстинг при размере выборки, совпадающей по порядку с размером исходной обучающей выборки ($n \sim N$), практически не имеет никакого смысла,



- При бутстрэпе мы можем получить практически неограниченное количество подвыборок (за счет разрешения семплирования объектов с повторением),
- При пэстинге мы можем получить гораздо меньше подвыборок (поскольку все элементы должны быть различны),
- Пэстинг при размере выборки, совпадающей по порядку с размером исходной обучающей выборки ($n \sim N$), практически не имеет никакого смысла,
- Пэстинг имеет смысл применять, когда нам важно, чтобы объекты не повторялись.

Время для вопросов





Бэггинг

Вспомним разложение ошибки на разброс и смещение: $\sigma^2 + variance(a) + bias^2(f, a)$.

⁸Breiman L. (1994). "Bagging Predictors".

Бэггинг

Вспомним разложение ошибки на разброс и смещение: $\sigma^2 + variance(a) + bias^2(f,a)$. Также мы видели, что простое усреднение T алгоритмов позволяет теоретически уменьшить разброс в T раз, при этом не влияя на смещение.

Вспомним разложение ошибки на разброс и смещение: $\sigma^2 + variance(a) + bias^2(f,a)$. Также мы видели, что простое усреднение T алгоритмов позволяет теоретически уменьшить разброс в T раз, при этом не влияя на смещение. Это и есть главная идея бэггинга⁸:



20 / 36

⁸Breiman L. (1994). "Bagging Predictors".

Вспомним разложение ошибки на разброс и смещение: $\sigma^2 + variance(a) + bias^2(f,a)$. Также мы видели, что простое усреднение T алгоритмов позволяет теоретически уменьшить разброс в T раз, при этом не влияя на смещение. Это и есть главная идея бэггинга 8 :

• уменьшить разброс алгоритма,



Вспомним разложение ошибки на разброс и смещение: $\sigma^2 + variance(a) + bias^2(f,a)$. Также мы видели, что простое усреднение T алгоритмов позволяет теоретически уменьшить разброс в T раз, при этом не влияя на смещение. Это и есть главная идея бэггинга 8 :

- уменьшить разброс алгоритма,
- как следствие, бороться с переобучением.



Вспомним разложение ошибки на разброс и смещение: $\sigma^2 + variance(a) + bias^2(f,a)$. Также мы видели, что простое усреднение T алгоритмов позволяет теоретически уменьшить разброс в T раз, при этом не влияя на смещение. Это и есть главная идея бэггинга 8 :

- уменьшить разброс алгоритма,
- как следствие, бороться с переобучением.

Определение

Бэггинг (Bootstrap AGGregatING) - это метод ансамблирования, основанный на:

- бутстрэп-семплировании для каждого обучения базового алгоритма,
- последующем усреднении ответов уже обученных базовых алгоритмов методом простого голосования.

⁸Breiman L. (1994). "Bagging Predictors".

- Дано: обучающая выборка X^m мощности m.
- ullet Цель: обучить ансамбль из T классификаторов $b_t(x), t=1,\ldots,T$.



- Дано: обучающая выборка X^m мощности m.
- ullet Цель: обучить ансамбль из T классификаторов $b_t(x), t=1,\ldots,T$.

Алгоритм

lacktriangle Формируем T выборок $X_t^m, t=1,\ldots,T$ мощности m с помощью бутстрэп-семплирования,



- Дано: обучающая выборка X^m мощности m.
- ullet Цель: обучить ансамбль из T классификаторов $b_t(x), t=1,\ldots,T$.

Алгоритм

- ① Формируем T выборок $X_t^m, t = 1, \ldots, T$ мощности m с помощью бутстрэп-семплирования,
- $oldsymbol{oldsymbol{eta}}$ На каждой выборке $X_t^m, t=1,\ldots,T$ обучаем свой алгоритм $b_t(x)$,





- Дано: обучающая выборка X^m мощности m.
- ullet Цель: обучить ансамбль из T классификаторов $b_t(x), t=1,\ldots,T$.

Алгоритм

- Формируем T выборок $X_t^m, t = 1, \ldots, T$ мощности m с помощью бутстрэп-семплирования,
- $oldsymbol{0}$ На каждой выборке $X_t^m, t=1,\ldots,T$ обучаем свой алгоритм $b_t(x)$,
- Результат применения усреднение (для регрессии) или голосование (для классификации).



Оказывается, можно использовать бутстрэп-семплирование не только для обучающей выборки, но и для признаков!



⁹Ho T. K. (1998). "The Random Subspace Method for Constructing Decision Forests" > < = > < = >

Оказывается, можно использовать бутстрэп-семплирование не только для обучающей выборки, но и для признаков!

Это - метод случайных подпространств⁹.



⁹Ho T. K. (1998). "The Random Subspace Method for Constructing Decision Forests" > < = > < = >

Оказывается, можно использовать бутстрэп-семплирование не только для обучающей выборки, но и для признаков!

Это - метод случайных подпространств⁹.

Т.о., случайные деревья из прошлой лекции – это объединение:

• Бэггинга для работы с выборкой и алгоритмами,



⁹Ho T. K. (1998). "The Random Subspace Method for Constructing Decision Forests" > < = > < = >

Оказывается, можно использовать бутстрэп-семплирование не только для обучающей выборки, но и для признаков!

Это - метод случайных подпространств⁹.

Т.о., случайные деревья из прошлой лекции – это объединение:

- Бэггинга для работы с выборкой и алгоритмами,
- Метода случайных подпространств для работы с признаковым пространством.



Плюсы бэггинга

• Уменьшает разброс и, как следствие, борется с переобучением,

- Уменьшает разброс и, как следствие, борется с переобучением,
- Ошибки базовых алгоритмов взаимно компенсируются,

- Уменьшает разброс и, как следствие, борется с переобучением,
- Ошибки базовых алгоритмов взаимно компенсируются,
- Объекты-выбросы могут не попасть в некоторые обучающие подвыборки,

- Уменьшает разброс и, как следствие, борется с переобучением,
- Ошибки базовых алгоритмов взаимно компенсируются,
- Объекты-выбросы могут не попасть в некоторые обучающие подвыборки,
- Хорошо работает для нестабильных алгоритмов (нейронные сети),

- Уменьшает разброс и, как следствие, борется с переобучением,
- Ошибки базовых алгоритмов взаимно компенсируются,
- Объекты-выбросы могут не попасть в некоторые обучающие подвыборки,
- Хорошо работает для нестабильных алгоритмов (нейронные сети),
- Легко распараллеливается.



Плюсы бэггинга

- Уменьшает разброс и, как следствие, борется с переобучением,
- Ошибки базовых алгоритмов взаимно компенсируются,
- Объекты-выбросы могут не попасть в некоторые обучающие подвыборки,
- Хорошо работает для нестабильных алгоритмов (нейронные сети),
- Легко распараллеливается.

Минусы бэггинга

• Не борется со смещением,





Плюсы бэггинга

- Уменьшает разброс и, как следствие, борется с переобучением,
- Ошибки базовых алгоритмов взаимно компенсируются,
- Объекты-выбросы могут не попасть в некоторые обучающие подвыборки,
- Хорошо работает для нестабильных алгоритмов (нейронные сети),
- Легко распараллеливается.

- Не борется со смещением,
- Каждый базовый алгоритм видит всего 63% обучающих данных,





Плюсы бэггинга

- Уменьшает разброс и, как следствие, борется с переобучением,
- Ошибки базовых алгоритмов взаимно компенсируются,
- Объекты-выбросы могут не попасть в некоторые обучающие подвыборки,
- Хорошо работает для нестабильных алгоритмов (нейронные сети),
- Легко распараллеливается.

- Не борется со смещением,
- Каждый базовый алгоритм видит всего 63% обучающих данных,
- Не очень хорошо работает для стабильных алгоритмов (метод К-ближайших соседей),





Плюсы бэггинга

- Уменьшает разброс и, как следствие, борется с переобучением,
- Ошибки базовых алгоритмов взаимно компенсируются,
- Объекты-выбросы могут не попасть в некоторые обучающие подвыборки,
- Хорошо работает для нестабильных алгоритмов (нейронные сети),
- Легко распараллеливается.

- Не борется со смещением,
- Каждый базовый алгоритм видит всего 63% обучающих данных,
- Не очень хорошо работает для стабильных алгоритмов (метод К-ближайших соседей),
- Нужно держать в памяти T базовых алгоритмов,





Плюсы бэггинга

- Уменьшает разброс и, как следствие, борется с переобучением,
- Ошибки базовых алгоритмов взаимно компенсируются,
- Объекты-выбросы могут не попасть в некоторые обучающие подвыборки,
- Хорошо работает для нестабильных алгоритмов (нейронные сети),
- Легко распараллеливается.

- Не борется со смещением,
- Каждый базовый алгоритм видит всего 63% обучающих данных,
- Не очень хорошо работает для стабильных алгоритмов (метод К-ближайших соседей),
- Нужно держать в памяти T базовых алгоритмов,
- Нужно делать Т запусков.





Плюсы бэггинга

- Уменьшает разброс и, как следствие, борется с переобучением,
- Ошибки базовых алгоритмов взаимно компенсируются,
- Объекты-выбросы могут не попасть в некоторые обучающие подвыборки,
- Хорошо работает для нестабильных алгоритмов (нейронные сети),
- Легко распараллеливается.

Минусы бэггинга

- Не борется со смещением,
- Каждый базовый алгоритм видит всего 63% обучающих данных,
- Не очень хорошо работает для стабильных алгоритмов (метод К-ближайших соседей),
- Нужно держать в памяти T базовых алгоритмов,
- Нужно делать Т запусков.

Замечание. Последние два минуса характерны в целом для ансамблирования.





Время для вопросов



Попробуем теперь бороться не только с разбросом, но и со смещением.



Попробуем теперь бороться не только с разбросом, но и со смещением. Главная идея бустинга 10 :



25 / 36

Попробуем теперь бороться не только с разбросом, но и со смещением. Главная идея бустинга 10 :

• Отвечает на вопрос: "Может ли набор слабых обучающих алгоритмов создать сильный обучающий алгоритм?",

Попробуем теперь бороться не только с разбросом, но и со смещением. Главная идея бустинга 10 :

- Отвечает на вопрос: "Может ли набор слабых обучающих алгоритмов создать сильный обучающий алгоритм?",
- Борется не только с разбросом, но и со смещением алгоритма.



Попробуем теперь бороться не только с разбросом, но и со смещением. Главная идея бустинга 10 :

- Отвечает на вопрос: "Может ли набор слабых обучающих алгоритмов создать сильный обучающий алгоритм?",
- Борется не только с разбросом, но и со смещением алгоритма.

Определение

Бустинг (Boosting) - это метод ансамблирования, основанный на:

- \rm взвешенном голосовании композиции,
- 2 последовательном выборе нового классификатора на основе ошибок предыдущих.



Разные виды бустинга можно описать в зависимости от:

• Функции потерь,

Разные виды бустинга можно описать в зависимости от:

- Функции потерь,
- Множества выходных значений базовых классификаторов.



Разные виды бустинга можно описать в зависимости от:

- Функции потерь,
- Множества выходных значений базовых классификаторов.

Обозначим взвешенную сумму выходов базовых классификаторов $b_t(x)$ как $a(x) = \sum_{t=1}^T \alpha_t b_t, \alpha_t \in \mathbb{R}.$

Разные виды бустинга можно описать в зависимости от:

- Функции потерь,
- Множества выходных значений базовых классификаторов.

Обозначим взвешенную сумму выходов базовых классификаторов $b_t(x)$ как $a(x) = \sum_{t=1}^T \alpha_t b_t, \alpha_t \in \mathbb{R}$.

AdaBoost

- Базовые алгоритмы $b_t(x)$ принимают значения из дискретного множества (например, $\{-1,+1\}$),
- Функция потерь: $e^{-y_i a(x_i)}$





Разные виды бустинга можно описать в зависимости от:

- Функции потерь,
- Множества выходных значений базовых классификаторов.

Обозначим взвешенную сумму выходов базовых классификаторов $b_t(x)$ как $a(x) = \sum_{t=1}^T \alpha_t b_t, \alpha_t \in \mathbb{R}.$

AdaBoost

- Базовые алгоритмы $b_t(x)$ принимают значения из дискретного множества (например, $\{-1, +1\}$),
- Функция потерь: $e^{-y_i a(x_i)}$

AnyBoost

- Базовые алгоритмы $b_t(x)$ принимают значения из \mathbb{R} ,
- ullet Функция потерь $L: \mathbb{R} o \mathbb{R}$ гладкая функция от $y_i a(x_i)$



Разные виды бустинга можно описать в зависимости от:

- Функции потерь,
- Множества выходных значений базовых классификаторов.

Обозначим взвешенную сумму выходов базовых классификаторов $b_t(x)$ как $a(x) = \sum_{t=1}^T \alpha_t b_t, \alpha_t \in \mathbb{R}.$

AdaBoost

- Базовые алгоритмы $b_t(x)$ принимают значения из дискретного множества (например, $\{-1, +1\}$),
- Функция потерь: $e^{-y_i a(x_i)}$

AnyBoost

- Базовые алгоритмы $b_t(x)$ принимают значения из \mathbb{R} ,
- ullet Функция потерь $L: \mathbb{R} o \mathbb{R}$ гладкая функция от $y_i a(x_i)$

Gradient Boosting

- ullet Базовые алгоритмы $b_t(x)$ принимают значения из \mathbb{R} ,
- Функция потерь $L: \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}$ гладкая функция от пары $(y_i, a(x_i))$

Бустинг для бинарной классификации

Пусть $X^m = \{(x_i, y_i)_{i=1}^m\}, y_i \in Y = \{+1, -1\}, b_t : X \to \{-1, 0, +1\}$. Значение $b_t(x) = 0$ вводится для сигнализации неопределенности в классификации (аналогия: нахождение внутри полосы для SVM).

Пусть $X^m = \{(x_i, y_i)_{i=1}^m\}, y_i \in Y = \{+1, -1\}, b_t : X \to \{-1, 0, +1\}$. Значение $b_t(x) = 0$ вводится для сигнализации неопределенности в классификации (аналогия: нахождение внутри полосы для SVM).

• Алгоритм классификации – взвешенное голосование: $a(x) = \text{sign}(\sum_{t=1}^{T} \alpha_t b_t(x)),$

Пусть $X^m = \{(x_i, y_i)_{i=1}^m\}, y_i \in Y = \{+1, -1\}, b_t : X \to \{-1, 0, +1\}$. Значение $b_t(x) = 0$ вводится для сигнализации неопределенности в классификации (аналогия: нахождение внутри полосы для SVM).

- Алгоритм классификации взвешенное голосование: $a(x) = \text{sign}(\sum_{t=1}^{T} \alpha_t b_t(x)),$
- Эмпирический риск число ошибок на X^m : $R_T = \sum_{i=1}^m [y_i \sum_{t=1}^T \alpha_t b_t(x_i) < 0]$

Пусть $X^m = \{(x_i, y_i)_{i=1}^m\}, y_i \in Y = \{+1, -1\}, b_t : X \to \{-1, 0, +1\}$. Значение $b_t(x) = 0$ вводится для сигнализации неопределенности в классификации (аналогия: нахождение внутри полосы для SVM).

- Алгоритм классификации взвешенное голосование: $a(x) = \text{sign}(\sum_{t=1}^{T} \alpha_t b_t(x)),$
- Эмпирический риск число ошибок на X^m : $R_T = \sum_{i=1}^m [y_i \sum_{t=1}^T \alpha_t b_t(x_i) < 0]$

Основные идеи обучения:

• Заморозка $\alpha_1 b_1(x_i), \dots, \alpha_{t-1} b_{t-1}(x_i)$ при добавлении $\alpha_t b_t(x_i)$,



Пусть $X^m = \{(x_i, y_i)_{i=1}^m\}, y_i \in Y = \{+1, -1\}, b_t : X \to \{-1, 0, +1\}$. Значение $b_t(x) = 0$ вводится для сигнализации неопределенности в классификации (аналогия: нахождение внутри полосы для SVM).

- Алгоритм классификации взвешенное голосование: $a(x) = \text{sign}(\sum_{t=1}^{T} \alpha_t b_t(x)),$
- Эмпирический риск число ошибок на X^m : $R_T = \sum_{i=1}^m [y_i \sum_{t=1}^T \alpha_t b_t(x_i) < 0]$

Основные идеи обучения:

- Заморозка $\alpha_1 b_1(x_i), \dots, \alpha_{t-1} b_{t-1}(x_i)$ при добавлении $\alpha_t b_t(x_i)$,
- Использовать аппроксимированный Э.Р.



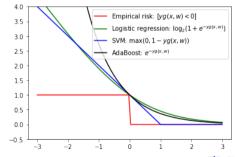


Пусть $X^m = \{(x_i, y_i)_{i=1}^m\}, y_i \in Y = \{+1, -1\}, b_t : X \to \{-1, 0, +1\}$. Значение $b_t(x) = 0$ вводится для сигнализации неопределенности в классификации (аналогия: нахождение внутри полосы для SVM).

- Алгоритм классификации взвешенное голосование: $a(x) = \text{sign}(\sum_{t=1}^{T} \alpha_t b_t(x)),$
- Эмпирический риск число ошибок на X^m : $R_T = \sum_{i=1}^m [y_i \sum_{t=1}^T \alpha_t b_t(x_i) < 0]$

Основные идеи обучения:

- Заморозка $\alpha_1 b_1(x_i), \dots, \alpha_{t-1} b_{t-1}(x_i)$ при добавлении $\alpha_t b_t(x_i)$,
- Использовать аппроксимированный Э.Р.



Обозначения

Аппроксимация Э.Р. с помощью функции потерь $e^{-y_i a(x_i)}$:

$$R_T \leq \widetilde{R}_T = \sum_{i=1}^m e^{-y_i \sum_{t=1}^{T-1} \alpha_t b_t(x_i)} e^{-y_i \alpha_T b_T(x_i)}$$



Обозначения

Аппроксимация Э.Р. с помощью функции потерь $e^{-y_i a(x_i)}$:

$$R_T \leq \widetilde{R}_T = \sum_{i=1}^m e^{-y_i \sum_{t=1}^{T-1} \alpha_t b_t(x_i)} e^{-y_i \alpha_T b_T(x_i)}$$

- Вектор весов (взвешиваем объекты) $W^m = (w_1, \dots, w_m)$:
- $w_i = e^{-y_i \sum_{t=1}^{T-1} \alpha_t b_t(x_i)} \Rightarrow \widetilde{R}_{T-1} = \sum_{i=1}^m w_i,$ HODMMDORKS: $\widetilde{w}_i = \frac{w_i}{m_i} \Rightarrow \sum_{i=1}^m \widetilde{w}_i = 1$
- ullet Нормировка: $\widetilde{w}_i = rac{w_i}{\sum_{j=1}^m w_j} \Rightarrow \sum_{i=1}^m \widetilde{w}_i = 1, \widetilde{w}_i \geq 0$



Обозначения

Аппроксимация Э.Р. с помощью функции потерь $e^{-y_i a(x_i)}$:

$$R_T \leq \widetilde{R}_T = \sum_{i=1}^m e^{-y_i \sum_{t=1}^{T-1} \alpha_t b_t(x_i)} e^{-y_i \alpha_T b_T(x_i)}$$

- Вектор весов (взвешиваем объекты) $W^m = (w_1, \dots, w_m)$: $w_i = e^{-y_i \sum_{t=1}^{T-1} \alpha_t b_t(x_i)} \Rightarrow \widetilde{R}_{T-1} = \sum_{i=1}^{m} w_i$.
- ullet Нормировка: $\widetilde{w}_i = rac{w_i}{\sum_{i=1}^m w_j} \Rightarrow \sum_{i=1}^m \widetilde{w}_i = 1, \widetilde{w}_i \geq 0$
- ullet Вероятностный вектор $U^m = (u_1, \dots, u_m)$: $\sum_{i=1}^m u_i = 1, u_i \geq 0$,
- Взвешенное число правильных классификаций алгоритма b(x) по вектору U^m : $P(b; U^m) = \sum_{i=1}^m u_i [b(x) = y_i]$
- Взвешенное число ошибочных классификаций алгоритма b(x) по вектору U^m : $N(b; U^m) = \sum_{i=1}^m u_i [b(x) = -y_i]$
- Взвешенное число отказов от классификации: 1 P N.



Основная теорема бустинга

Пусть A – достаточно богатое семейство базовых алгоритмов.

Теорема

Если для любого вероятностного вектора U^m существует алгоритм $b \in A$, т.ч. $P(b; U^m) > N(b; U^m)$, то минимум аппроксимированного Э.Р. \widetilde{R}_T достигается на:

•
$$b_T = \operatorname{arg\,max}_{b \in \mathcal{A}} \sqrt{P(b; \widetilde{W}^m)} - \sqrt{N(b; \widetilde{W}^m)}$$

$$\bullet \ \alpha_T = \frac{1}{2} \ln \frac{P(b_T; \widetilde{W}^m)}{N(b_T; \widetilde{W}^m)}$$





Основная теорема бустинга

Пусть A – достаточно богатое семейство базовых алгоритмов.

Теорема

Если для любого вероятностного вектора U^m существует алгоритм $b \in A$, т.ч. $P(b; U^m) > N(b; U^m)$, то минимум аппроксимированного Э.Р. $\widetilde{R}_{\mathcal{T}}$ достигается на:

•
$$b_T = \operatorname{arg\,max}_{b \in \mathcal{A}} \sqrt{P(b; \widetilde{W}^m)} - \sqrt{N(b; \widetilde{W}^m)}$$

•
$$\alpha_T = \frac{1}{2} \ln \frac{P(b_T; \widetilde{W}^m)}{N(b_T; \widetilde{W}^m)}$$

Замечание. В этом случае $\alpha_T > 0$.



Если $b\in\{-1,0,+1\}$, то верно тождество $e^{-\alpha b}=e^{-\alpha}[b=1]+e^{\alpha}[b=-1]+[b=0].$





Если
$$b\in\{-1,0,+1\}$$
, то верно тождество $e^{-\alpha b}=e^{-\alpha}[b=1]+e^{\alpha}[b=-1]+[b=0].$ $\widetilde{R}_T=\sum_{i=1}^m e^{-y_i\sum_{t=1}^{T-1}\alpha_tb_t(x_i)}e^{-y_i\alpha_Tb_T(x_i)}=\sum_{i=1}^m w_i\left(e^{-\alpha_T}[b_T(x_i)=y_i]+e^{\alpha_T}[b_T(x_i)=-y_i]+[b_T(x_i)=0]\right)=$





Если
$$b\in\{-1,0,+1\}$$
, то верно тождество $e^{-\alpha b}=e^{-\alpha}[b=1]+e^{\alpha}[b=-1]+[b=0].$ $\widetilde{R}_{\mathcal{T}}=\sum_{i=1}^m e^{-y_i\sum_{t=1}^{T-1}\alpha_tb_t(x_i)}e^{-y_i\alpha_Tb_T(x_i)}=\sum_{i=1}^m w_i\left(e^{-\alpha_T}[b_T(x_i)=y_i]+e^{\alpha_T}[b_T(x_i)=-y_i]+[b_T(x_i)=0]\right)=e^{-\alpha_T}\sum_{i=1}^m w_i[b_T(x_i)=y_i]+e^{\alpha_T}\sum_{i=1}^m w_i[b_T(x_i)=-y_i]+\sum_{i=1}^m w_i[b_T(x_i)=0]=$





Если
$$b \in \{-1,0,+1\}$$
, то верно тождество $e^{-\alpha b} = e^{-\alpha}[b=1] + e^{\alpha}[b=-1] + [b=0]$. $\widetilde{R}_T = \sum_{i=1}^m e^{-y_i \sum_{t=1}^{T-1} \alpha_t b_t(x_i)} e^{-y_i \alpha_T b_T(x_i)} = \sum_{i=1}^m w_i \left(e^{-\alpha_T} [b_T(x_i) = y_i] + e^{\alpha_T} [b_T(x_i) = -y_i] + [b_T(x_i) = 0] \right) = e^{-\alpha_T} \sum_{i=1}^m w_i [b_T(x_i) = y_i] + e^{\alpha_T} \sum_{i=1}^m w_i [b_T(x_i) = -y_i] + \sum_{i=1}^m w_i [b_T(x_i) = 0] = \left(e^{-\alpha_T} \sum_{i=1}^m \widetilde{w}_i [b_T(x_i) = y_i] + e^{\alpha_T} \sum_{i=1}^m \widetilde{w}_i [b_T(x_i) = -y_i] + \sum_{i=1}^m \widetilde{w}_i [b_T(x_i) = 0] \right) \sum_{i=1}^m w_i = e^{-\alpha_T} \sum_{i=1}^m \widetilde{w}_i [b_T(x_i) = y_i] + e^{\alpha_T} \sum_{i=1}^m \widetilde{w}_i [b_T(x_i) = -y_i] + \sum_{i=1}^m \widetilde{w}_i [b_T(x_i) = 0]$





Если $b \in \{-1,0,+1\}$, то верно тождество $e^{-\alpha b} = e^{-\alpha}[b=1] + e^{\alpha}[b=-1] + [b=0]$. $\widetilde{R}_T = \sum_{i=1}^m e^{-y_i \sum_{t=1}^{T-1} \alpha_t b_t(x_i)} e^{-y_i \alpha_T b_T(x_i)} = \sum_{i=1}^m w_i \left(e^{-\alpha_T} [b_T(x_i) = y_i] + e^{\alpha_T} [b_T(x_i) = -y_i] + [b_T(x_i) = 0] \right) = e^{-\alpha_T} \sum_{i=1}^m w_i [b_T(x_i) = y_i] + e^{\alpha_T} \sum_{i=1}^m w_i [b_T(x_i) = -y_i] + \sum_{i=1}^m w_i [b_T(x_i) = 0] = \left(e^{-\alpha_T} \sum_{i=1}^m \widetilde{w}_i [b_T(x_i) = y_i] + e^{\alpha_T} \sum_{i=1}^m \widetilde{w}_i [b_T(x_i) = -y_i] + \sum_{i=1}^m \widetilde{w}_i [b_T(x_i) = 0] \right) \sum_{i=1}^m w_i = \left(e^{-\alpha_T} P + e^{\alpha_T} N + 1 - P - N \right) \widetilde{R}_{T-1}.$





Если
$$b \in \{-1,0,+1\}$$
, то верно тождество $e^{-\alpha b} = e^{-\alpha}[b=1] + e^{\alpha}[b=-1] + [b=0]$. $\widetilde{R}_T = \sum_{i=1}^m e^{-y_i \sum_{t=1}^{T-1} \alpha_t b_t(x_i)} e^{-y_i \alpha_T b_T(x_i)} = \sum_{i=1}^m w_i \left(e^{-\alpha_T} [b_T(x_i) = y_i] + e^{\alpha_T} [b_T(x_i) = -y_i] + [b_T(x_i) = 0] \right) = e^{-\alpha_T} \sum_{i=1}^m w_i [b_T(x_i) = y_i] + e^{\alpha_T} \sum_{i=1}^m w_i [b_T(x_i) = -y_i] + \sum_{i=1}^m w_i [b_T(x_i) = 0] = \left(e^{-\alpha_T} \sum_{i=1}^m \widetilde{w}_i [b_T(x_i) = y_i] + e^{\alpha_T} \sum_{i=1}^m \widetilde{w}_i [b_T(x_i) = -y_i] + \sum_{i=1}^m \widetilde{w}_i [b_T(x_i) = 0] \right) \sum_{i=1}^m w_i = \left(e^{-\alpha_T} P + e^{\alpha_T} N + 1 - P - N \right) \widetilde{R}_{T-1}.$ $\widetilde{R}_T \to \min_{\alpha_T} \Rightarrow \frac{\partial \widetilde{R}_T}{\partial \alpha_T} = 0.$



Если
$$b \in \{-1,0,+1\}$$
, то верно тождество $e^{-\alpha b} = e^{-\alpha}[b=1] + e^{\alpha}[b=-1] + [b=0]$. $\widetilde{R}_T = \sum_{i=1}^m e^{-y_i \sum_{t=1}^{T-1} \alpha_t b_t(x_i)} e^{-y_i \alpha_T b_T(x_i)} = \sum_{i=1}^m w_i \left(e^{-\alpha_T} [b_T(x_i) = y_i] + e^{\alpha_T} [b_T(x_i) = -y_i] + [b_T(x_i) = 0] \right) = e^{-\alpha_T} \sum_{i=1}^m w_i [b_T(x_i) = y_i] + e^{\alpha_T} \sum_{i=1}^m w_i [b_T(x_i) = -y_i] + \sum_{i=1}^m w_i [b_T(x_i) = 0] = \left(e^{-\alpha_T} \sum_{i=1}^m \widetilde{w}_i [b_T(x_i) = y_i] + e^{\alpha_T} \sum_{i=1}^m \widetilde{w}_i [b_T(x_i) = -y_i] + \sum_{i=1}^m \widetilde{w}_i [b_T(x_i) = 0] \right) \sum_{i=1}^m w_i = \left(e^{-\alpha_T} P + e^{\alpha_T} N + 1 - P - N \right) \widetilde{R}_{T-1}.$ $\widetilde{R}_T \to \min_{\alpha_T} \Rightarrow \frac{\partial \widetilde{R}_T}{\partial \alpha_T} = 0.$
$$\frac{\partial \widetilde{R}_T}{\partial \alpha_T} = \left(-e^{-\alpha_T} P + e^{\alpha_T} N \right) \widetilde{R}_{T-1} = 0 \Rightarrow e^{-\alpha_T} P = e^{\alpha_T} N \Rightarrow e^{2\alpha_T} = \frac{P}{N} \Rightarrow \alpha_T = \frac{1}{2} \ln \frac{P(b_T; \widetilde{W}^m)}{N(b_T; \widetilde{W}^m)}.$$





Если
$$b \in \{-1,0,+1\}$$
, то верно тождество $e^{-\alpha b} = e^{-\alpha}[b=1] + e^{\alpha}[b=-1] + [b=0]$. $\widetilde{R}_T = \sum_{i=1}^m e^{-y_i \sum_{t=1}^{T-1} \alpha_t b_t(x_i)} e^{-y_i \alpha_T b_T(x_i)} = \sum_{i=1}^m w_i \left(e^{-\alpha_T} [b_T(x_i) = y_i] + e^{\alpha_T} [b_T(x_i) = -y_i] + [b_T(x_i) = 0] \right) = e^{-\alpha_T} \sum_{i=1}^m w_i [b_T(x_i) = y_i] + e^{\alpha_T} \sum_{i=1}^m w_i [b_T(x_i) = -y_i] + \sum_{i=1}^m w_i [b_T(x_i) = 0] = (e^{-\alpha_T} \sum_{i=1}^m \widetilde{w}_i [b_T(x_i) = y_i] + e^{\alpha_T} \sum_{i=1}^m \widetilde{w}_i [b_T(x_i) = -y_i] + \sum_{i=1}^m \widetilde{w}_i [b_T(x_i) = 0]) \sum_{i=1}^m w_i = (e^{-\alpha_T} P + e^{\alpha_T} N + 1 - P - N) \widetilde{R}_{T-1}.$ $\widetilde{R}_T \to \min_{\alpha_T} \Rightarrow \frac{\partial \widetilde{R}_T}{\partial \alpha_T} = 0.$
$$\frac{\partial \widetilde{R}_T}{\partial \alpha_T} = (-e^{-\alpha_T} P + e^{\alpha_T} N) \widetilde{R}_{T-1} = 0 \Rightarrow e^{-\alpha_T} P = e^{\alpha_T} N \Rightarrow e^{2\alpha_T} = \frac{P}{N} \Rightarrow \alpha_T = \frac{1}{2} \ln \frac{P(b_T; \widetilde{W}^m)}{N(b_T; \widetilde{W}^m)}.$$

Для поиска $b_T(x)$ подставим найденное α_T в формулу для \widetilde{R}_T :



Если
$$b \in \{-1,0,+1\}$$
, то верно тождество $e^{-\alpha b} = e^{-\alpha}[b=1] + e^{\alpha}[b=-1] + [b=0].$ $\widetilde{R}_T = \sum_{i=1}^m e^{-y_i} \sum_{t=1}^{T-1} \alpha_t b_t(x_i) e^{-y_i \alpha_T b_T(x_i)} = \sum_{i=1}^m w_i \left(e^{-\alpha_T} [b_T(x_i) = y_i] + e^{\alpha_T} [b_T(x_i) = -y_i] + [b_T(x_i) = 0] \right) = e^{-\alpha_T} \sum_{i=1}^m w_i [b_T(x_i) = y_i] + e^{\alpha_T} \sum_{i=1}^m w_i [b_T(x_i) = -y_i] + \sum_{i=1}^m w_i [b_T(x_i) = 0] = \left(e^{-\alpha_T} \sum_{i=1}^m \widetilde{w}_i [b_T(x_i) = y_i] + e^{\alpha_T} \sum_{i=1}^m \widetilde{w}_i [b_T(x_i) = -y_i] + \sum_{i=1}^m \widetilde{w}_i [b_T(x_i) = 0] \right) \sum_{i=1}^m w_i = \left(e^{-\alpha_T} P + e^{\alpha_T} N + 1 - P - N \right) \widetilde{R}_{T-1}.$ $\widetilde{R}_T \to \min_{\alpha_T} \Rightarrow \frac{\partial \widetilde{R}_T}{\partial \alpha_T} = 0.$

$$\frac{\partial \widetilde{R}_{T}}{\partial \alpha_{T}} = (-e^{-\alpha_{T}}P + e^{\alpha_{T}}N)\widetilde{R}_{T-1} = 0 \Rightarrow e^{-\alpha_{T}}P = e^{\alpha_{T}}N \Rightarrow e^{2\alpha_{T}} = \frac{P}{N} \Rightarrow \alpha_{T} = \frac{1}{2}\ln\frac{P(b_{T};\widetilde{W}^{m})}{N(b_{T};\widetilde{W}^{m})}.$$

Для поиска $b_T(x)$ подставим найденное $lpha_T$ в формулу для \widetilde{R}_T :

$$\widetilde{R}_{T} = (\sqrt{\frac{N}{P}}P + \sqrt{\frac{P}{N}}N + 1 - P - N)\widetilde{R}_{T-1} = (1 - (P - 2\sqrt{PN} + N))\widetilde{R}_{T-1} = (1 - (\sqrt{P} - \sqrt{N})^{2})\widetilde{R}_{T-1} \rightarrow \min_{b_{T}} \Rightarrow$$

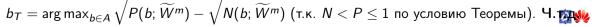


Если
$$b \in \{-1,0,+1\}$$
, то верно тождество $e^{-\alpha b} = e^{-\alpha}[b=1] + e^{\alpha}[b=-1] + [b=0].$ $\widetilde{R}_T = \sum_{i=1}^m e^{-y_i \sum_{t=1}^{T-1} \alpha_t b_t(x_i)} e^{-y_i \alpha_T b_T(x_i)} = \sum_{i=1}^m w_i \left(e^{-\alpha_T} [b_T(x_i) = y_i] + e^{\alpha_T} [b_T(x_i) = -y_i] + [b_T(x_i) = 0] \right) = e^{-\alpha_T} \sum_{i=1}^m w_i [b_T(x_i) = y_i] + e^{\alpha_T} \sum_{i=1}^m w_i [b_T(x_i) = -y_i] + \sum_{i=1}^m w_i [b_T(x_i) = 0] = \left(e^{-\alpha_T} \sum_{i=1}^m \widetilde{w}_i [b_T(x_i) = y_i] + e^{\alpha_T} \sum_{i=1}^m \widetilde{w}_i [b_T(x_i) = -y_i] + \sum_{i=1}^m \widetilde{w}_i [b_T(x_i) = 0] \right) \sum_{i=1}^m w_i = \left(e^{-\alpha_T} P + e^{\alpha_T} N + 1 - P - N \right) \widetilde{R}_{T-1}.$ $\widetilde{R}_T \to \min_{\alpha_T} \Rightarrow \frac{\partial \widetilde{R}_T}{\partial \alpha_T} = 0.$

 $\frac{\partial \widetilde{R}_T}{\partial \alpha_T} = (-e^{-lpha_T}P + e^{lpha_T}N)\widetilde{R}_{T-1} = 0 \Rightarrow e^{-lpha_T}P = e^{lpha_T}N \Rightarrow e^{2lpha_T} = \frac{P}{N} \Rightarrow lpha_T = \frac{1}{2}\ln\frac{P(b_T;W^m)}{N(b_T;\widetilde{W}^m)}$

Для поиска
$$b_T(x)$$
 подставим найденное $lpha_T$ в формулу для \widetilde{R}_T :

 $\widetilde{R}_{T} = (\sqrt{\frac{N}{P}}P + \sqrt{\frac{P}{N}}N + 1 - P - N)\widetilde{R}_{T-1} = (1 - (P - 2\sqrt{PN} + N))\widetilde{R}_{T-1} = (1 - (\sqrt{P} - \sqrt{N})^{2})\widetilde{R}_{T-1} \rightarrow \min_{b_{T}} \Rightarrow$



Теорема

Если на каждом шаге t можно добиться выполнения

 $\sqrt{P(b_t;\widetilde{W}^m)} - \sqrt{N(b_t;\widetilde{W}^m)} = \beta_t \geq \beta$ при некотором $0 < \beta \leq 1$, то за конечное число шагов будет построен алгоритм, не допускающий ни единой ошибки на обучающем множестве.

Теорема

Если на каждом шаге t можно добиться выполнения

$$\sqrt{P(b_t;\widetilde{W}^m)} - \sqrt{N(b_t;\widetilde{W}^m)} = \beta_t \geq \beta$$
 при некотором $0 < \beta \leq 1$, то за конечное число шагов будет построен алгоритм, не допускающий ни единой ошибки на обучающем множестве.

$$\widetilde{R}_T \leq \widetilde{R}_T = (1 - (\sqrt{P} - \sqrt{N})^2)\widetilde{R}_{T-1} \leq (1 - \beta^2)\widetilde{R}_{T-1} \leq \cdots \leq (1 - \beta^2)^{T-1}\widetilde{R}_1.$$





Теорема

Если на каждом шаге t можно добиться выполнения

 $\sqrt{P(b_t;\widetilde{W}^m)} - \sqrt{N(b_t;\widetilde{W}^m)} = \beta_t \geq \beta$ при некотором $0 < \beta \leq 1$, то за конечное число шагов будет построен алгоритм, не допускающий ни единой ошибки на обучающем множестве.

$$\widetilde{R}_T \leq \widetilde{R}_T = (1 - (\sqrt{P} - \sqrt{N})^2)\widetilde{R}_{T-1} \leq (1 - \beta^2)\widetilde{R}_{T-1} \leq \cdots \leq (1 - \beta^2)^{T-1}\widetilde{R}_1.$$
 Для любого $0 < \beta \leq 1$ и любого \widetilde{R}_1 будет существовать такое T , что $R_T < 1$.



Теорема

Если на каждом шаге t можно добиться выполнения

 $\sqrt{P(b_t;\widetilde{W}^m)} - \sqrt{N(b_t;\widetilde{W}^m)} = \beta_t \geq \beta$ при некотором $0 < \beta \leq 1$, то за конечное число шагов будет построен алгоритм, не допускающий ни единой ошибки на обучающем множестве.

Доказательство.

$$\widetilde{R}_{\mathcal{T}} \leq \widetilde{R}_{\mathcal{T}} = (1 - (\sqrt{P} - \sqrt{N})^2)\widetilde{R}_{\mathcal{T}_{\sim} 1} \leq (1 - \beta^2)\widetilde{R}_{\mathcal{T} - 1} \leq \cdots \leq (1 - \beta^2)^{T - 1}\widetilde{R}_1.$$

Для любого $0<eta\leq 1$ и любого R_1 будет существовать такое T, что $R_T<1$.

Э.Р. R_T – это число ошибок на обучающем множестве (т.е. неотрицательное целое число) $\Rightarrow R_T = 0$. Ч.т.д.



Следствие 2: Классический AdaBoost

Рассмотрим более частную ситуацию, когда базовый алгоритм не сигнализирует о неопределенности: $b_t: X \to \{-1, +1\}$. Тогда P + N = 1.

¹¹Freund Y. and Schapire R.E (1997). "A decision-theoretic generalization of on-line learning and an application to boosting"



Следствие 2: Классический AdaBoost

Рассмотрим более частную ситуацию, когда базовый алгоритм не сигнализирует о неопределенности: $b_t: X \to \{-1, +1\}$. Тогда P+N=1. В этом случае конкретный алгоритм бустинга называется AdaBoost¹¹ (Adaptive Boosting).



¹¹Freund Y. and Schapire R.E (1997). "A decision-theoretic generalization of on-line learning and an application to boosting"

Следствие 2: Классический AdaBoost

Рассмотрим более частную ситуацию, когда базовый алгоритм не сигнализирует о неопределенности: $b_t: X \to \{-1, +1\}$. Тогда P+N=1.

В этом случае конкретный алгоритм бустинга называется $AdaBoost^{11}$ (Adaptive Boosting).

Теорема

Если для любого вероятностного вектора U^m существует алгоритм $b\in A$, т.ч. $N(b;U^m)<\frac{1}{2}$, то минимум аппроксимированного Э.Р. $\widetilde{R}_{\mathcal{T}}$ достигается на:

- $b_T = \arg\min_{b \in A} N(b; \widetilde{W}^m)$
- $\bullet \ \alpha_T = \frac{1}{2} \ln \frac{1 N(b; \widetilde{W}^m)}{N(b; \widetilde{W}^m)}$

¹¹Freund Y. and Schapire R.E (1997). "A decision-theoretic generalization of on-line learning and an application to boosting"



Алгоритм

• Инициализация весов: $w_i = \frac{1}{m}, i = 1, ..., m$,



Алгоритм

• Инициализация весов: $w_i = \frac{1}{m}, i = 1, \dots, m$,

$oxedsymbol{\mathbb{Z}}$ Для $t=1,\ldots,T$

ullet Обучение базового алгоритма $b_t = \mathop{\mathrm{arg\,min}}_{b \in \mathcal{A}} \mathcal{N}(b; \widetilde{W}^m)$,



Алгоритм

• Инициализация весов: $w_i = \frac{1}{m}, i = 1, ..., m$,

$oxedsymbol{\mathbb{Z}}$ Для $t=1,\ldots,T$

- ullet Обучение базового алгоритма $b_t = rg \min_{b \in \mathcal{A}} \mathcal{N}(b; \widetilde{W}^m)$,
- ullet Вычисление нового веса $lpha_t = rac{1}{2} \ln rac{1 N(b_t; \widetilde{W}^m)}{N(b_t; \widetilde{W}^m)}$,





Алгоритм

• Инициализация весов: $w_i = \frac{1}{m}, i = 1, \dots, m$,

$oxedsymbol{\mathbb{Z}}$ Для $t=1,\ldots,T$

- ullet Обучение базового алгоритма $b_t = rg \min_{b \in \mathcal{A}} \mathcal{N}(b; \widetilde{W}^m)$,
- ullet Вычисление нового веса $lpha_t = rac{1}{2} \ln rac{1 N(b_t; \widetilde{W}^m)}{N(b_t; \widetilde{W}^m)}$,
- ullet Обновление весов $w_i := w_i e^{-\alpha_t y_i b_t(x_i)}, i = 1, \dots, m,$





Алгоритм

• Инициализация весов: $w_i = \frac{1}{m}, i = 1, \dots, m$,

$oxedsymbol{\mathbb{Z}}$ Для $t=1,\ldots,T$

- ullet Обучение базового алгоритма $b_t = rg \min_{b \in A} \mathcal{N}(b; \widetilde{W}^m)$,
- ullet Вычисление нового веса $lpha_t = rac{1}{2} \ln rac{1 N(b_t; \widetilde{W}^m)}{N(b_t; \widetilde{W}^m)}$,
- ullet Обновление весов $w_i := w_i e^{-\alpha_t y_i b_t(x_i)}, i = 1, \dots, m,$
- ullet Перенормировка весов $w_i := rac{w_i}{\sum_{i=1}^m w_i}, i=1,\ldots,m.$





Замечание относительно шага обновления весов $w_i := w_i e^{-\alpha_t y_i b_t(x_i)}, i=1,\ldots,m$.





Замечание относительно шага обновления весов $w_i := w_i e^{-\alpha_t y_i b_t(x_i)}, i = 1, \dots, m.$

ullet Вес объекта x_i увеличивается в e^{lpha_t} раз, когда b_t допускает на нем ошибку (т.к. $lpha_t>0$),



Замечание относительно шага обновления весов $w_i := w_i e^{-\alpha_t y_i b_t(x_i)}, i = 1, \dots, m.$

- ullet Вес объекта x_i увеличивается в e^{lpha_t} раз, когда b_t допускает на нем ошибку (т.к. $lpha_t>0$),
- ullet Вес объекта x_i уменьшается в e^{lpha_t} раз, когда b_t правильно его классифицирует,





Замечание относительно шага обновления весов $w_i := w_i e^{-\alpha_t y_i b_t(x_i)}, i = 1, \dots, m.$

- Вес объекта x_i увеличивается в e^{α_t} раз, когда b_t допускает на нем ошибку (т.к. $\alpha_t>0$),
- ullet Вес объекта x_i уменьшается в e^{lpha_t} раз, когда b_t правильно его классифицирует,
- Т.о. наибольший вес накапливается у тех объектов, которые чаще оказывались трудными для предыдущих алгоритмов.



Время для вопросов





Источники

Ha основе материалов сайта http://www.machinelearning.ru.

