Введение в искусственный интеллект. Машинное обучение

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

Бабин Д.Н., Иванов И.Е.

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:

 $a(x) = \frac{1}{T} \sum_{t=1}^{T} b_t(x)$, 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: $Earepsilon_t(x)=0, Earepsilon_tarepsilon_t=0, t
eq u.$

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):

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



4 / 36

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):

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

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



Стековое обобщение¹

Предположим, что мы можем обучить T базовых алгоритмов.

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



$|\mathsf{C}$ тековое обобщение 1

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 $b_t(x)$
- ullet Обучаем комбинирующий алгоритм верхнего уровня $a(x)=a(b_1(x),\ldots,b_T(x))$





C тековое обобщение 1

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 $b_t(x)$
- ullet Обучаем комбинирующий алгоритм верхнего уровня $a(x)=a(b_1(x),\ldots,b_T(x))$

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



C тековое обобщение 1

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 $b_t(x), t=1,\ldots,T$
- $oldsymbol{arrho}$ Фиксируем алгоритмы $b_t(x)$
- ullet Обучаем комбинирующий алгоритм верхнего уровня $a(x)=a(b_1(x),\ldots,b_T(x))$

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 :)



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

💶 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 получаем ответы базовых алгоритмов и обучаем мета-алгоритм

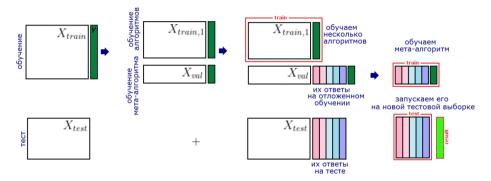


- 💶 Разбиваем обучающую выборку на две части
- На одной части обучаем базовые алгоритмы
- На второй получаем ответы базовых алгоритмов и обучаем мета-алгоритм
- На тесте сначала получаем выходы базовых алгоритмов, к которым затем применяем мета-алгоритм



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
- 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
- ullet Повторяем пп. 2-4 $M \geq 2$ раз для других разбиений обучающей выборки

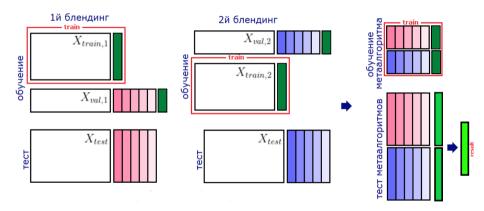
- 💶 Разбиваем обучающую выборку на две части
- На одной части обучаем базовые алгоритмы
- На второй части получаем их ответы (мета-признаки)
- Обучаем мета-алгоритм
- ullet Повторяем пп. 2-4 $M \geq 2$ раз для других разбиений обучающей выборки
- На тесте сначала получаем M наборов выходов базовых алгоритмов,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

- 💶 Разбиваем обучающую выборку на две части
- На одной части обучаем базовые алгоритмы
- На второй части получаем их ответы (мета-признаки)
- Обучаем мета-алгоритм
- ullet 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 M ответов мета-алгоритмов



Блендинг – визуализация усовершенствования

Рассмотрим схему усовершенствованного ³ блендинга:





Стекинг (Stacking)

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



Стекинг (Stacking)

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

lacktriangle Разбиваем обучающую выборку на k частей



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



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
 - 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 $Super\ Learner^4$:

- 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



Бабин Д.Н., Иванов И.Е. Ансамблирование 10 / 36

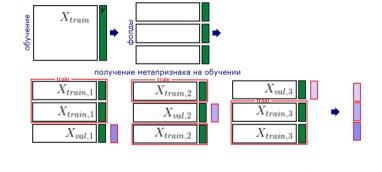
Попытка решения той же проблемы: алгоритмы не видят всей обучающей выборки. Опишем алгоритм $Super\ Learner^4$:

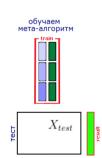
- lacktriangle Разбиваем обучающую выборку на k частей
- Обучаем базовые алгоритмы с помощью кросс-валидации
 - ullet Обучаем каждый алгоритм на k-1 частях и тестируем на hold-out части,
 - Повторяем так для каждой из k частей,
 - Обучаем каждый базовый алгоритм на всей обучающей выборке,
- Обучаем мета-алгоритм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

15 / 36

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 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)

Бабин Д.Н., Иванов И.Е. Ансамблирование 15 / 36

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:

$$\lim_{N o\infty}(1-rac{1}{N})^N=\lim_{N o\infty}\left((1-rac{1}{N})^{-N}
ight)^{-1}=e^{-1}$$
. 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 $\frac{1}{M}$. 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.



16 / 36

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



- **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" = > < = > =

- **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.



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

Бабин Д.Н., Иванов И.Е. Ансамблирование

- **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 ${\it N}=5$ объектов ${\it X}=\{1,2,3,4,5\}$,



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

Бабин Д.Н., Иванов И.Е. Ансамблирование 17 / 36

- **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 ${\it N}=5$ объектов ${\it X}=\{1,2,3,4,5\}$,
- ullet Проводим процедуру семплирования n=3 объектов,



Бабин Д.Н., Иванов И.Е. Ансамблирование 17 / 36

- **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 ${\it N}=5$ объектов ${\it X}=\{1,2,3,4,5\}$,
- ullet Проводим процедуру семплирования n=3 объектов,
- Бутстрэп: $\{2,2,5\},\{1,2,5\},\{2,4,4\},\ldots$



- **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 ${\it N}=5$ 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: $\{2,3,5\},\{1,3,5\},\{2,3,4\},\dots$



- **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 ${\it N}=5$ 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: $\{2,3,5\},\{1,3,5\},\{2,3,4\},\ldots$

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" = > < = > = =

Бабин Д.Н., Иванов И.Е. Ансамблирование 17 / 36

• 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.

< □ > < □ > < Ē > < Ē >

Время для вопросов





Бэггинг

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



20 / 36

Бабин Д.Н., Иванов И.Е. Ансамблирование

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.



20 / 36

Бабин Д.Н., Иванов И.Е. Ансамблирование

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 :



Бабин Д.Н., Иванов И.Е.

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,



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,
- как следствие, бороться с переобучением.



Бабин Д. Н., Иванов И. Е. Ансамблирование 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 бэггинга⁸:
 - 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.

20 / 36

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

lacktriangledown 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,
- $oldsymbol{oldsymbol{arphi}}$ 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

- ① 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!

 $Это - метод случайных подпространств<math>^9$.



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,



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.



⁹Ho T. K. (1998). "The Random Subspace Method for Constructing Decision Forests" > < 2 > < 2 >

Бабин Д.Н., Иванов И.Е. Ансамблирование 22 / 36

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,



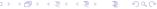


Плюсы бэггинга

- 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,
- ullet Нужно делать T 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,
- ullet Нужно делать T запусков.

Замечание. Последние два минуса характерны в целом для ансамблирования.



23 / 36

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 :



¹⁰Schapire R. E. (1990). "The Strength of Weak Learnability".

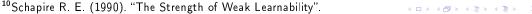
Попробуем теперь бороться не только с разбросом, но и со смещением. Главная идея бустинга 10 :

• 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:

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



¹⁰Schapire R. E. (1990). "The Strength of Weak Learnability".

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 $(\text{например}, \{-1, +1\}),$
- 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

- ullet 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

- ullet 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} ,
- ullet Функция потерь $L: \mathbb{R}^2 o \mathbb{R}$ 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: $a(x) = \mathrm{sign}(\sum_{t=1}^T \alpha_t b_t(x)),$

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 $\alpha_t b_t(x_i)$,



27 / 36

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.



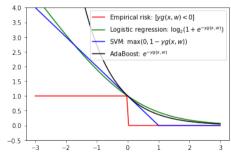
Бабин Д.Н., Иванов И.Е.

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 $e^{-y_i a(x_i)}$:

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

ullet Вектор весов (взвешиваем объекты) $W^m=(w_1,\ldots,w_m)$:

$$w_i = e^{-y_i \sum_{t=1}^{T-1} \alpha_t b_t(x_i)} \Rightarrow \widetilde{R}_{T-1} = \sum_{i=1}^m w_i$$

ullet Нормировка: $\widetilde{w}_i = rac{w_i}{\sum_{j=1}^m w_j} \Rightarrow \sum_{i=1}^m \widetilde{w}_i = 1, \widetilde{w}_i \geq 0$



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 $U^m=(u_1,\ldots,u_m)$: $\sum_{i=1}^m u_i=1,u_i\geq 0$,
- 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.



Бабин Д.Н., Иванов И.Е

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:

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

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

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}_T достигается на:

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

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

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

Для поиска $b_{\mathcal{T}}(x)$ подставим найденное $lpha_{\mathcal{T}}$ в формулу для $\widetilde{R}_{\mathcal{T}}$:



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

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 :

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

 $b_T = rg \max_{b \in A} \sqrt{P(b;\widetilde{W}^m)} - \sqrt{N(b;\widetilde{W}^m)}$ (т.к. $N < P \le 1$ по условию Теоремы). Ч.



Бабин Д.Н., Иванов И.Е. Ансамблирование 30 / 36

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.

31 / 36

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.

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



31 / 36



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.

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

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

Для любого $0<eta\leq 1$ 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"



32 / 36

Бабин Д.Н., Иванов И.Е. Ансамблирование

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"



32 / 36

Бабин Д. Н., Иванов И.Е. Ансамблирование

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}_T достигается на:

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

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



Бабин Д.Н., Иванов И.Е. Ансамблирование

Алгоритм

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





Алгоритм

ullet Инициализация весов: $w_i = rac{1}{m}, i = 1, \dots, m$,

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

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





Алгоритм

ullet Инициализация весов: $w_i = rac{1}{m}, i = 1, \dots, m,$

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

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

ullet Инициализация весов: $w_i = rac{1}{m}, i = 1, \dots, m,$

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

- 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

ullet Инициализация весов: $w_i = rac{1}{m}, i = 1, \dots, m,$

$oxedsymbol{\Box}$ ля $t=1,\ldots,T$

- 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 $w_i := w_i e^{-\alpha_t y_i b_t(x_i)}, i = 1, \dots, m,$
- ullet Перенормировка весов $w_i := rac{w_i}{\sum_{i=1}^m w_i}, i=1,\ldots,m.$





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





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

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

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

- 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,
- 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.

