Прикладные задачи анализа данных

Ансамбли алгоритмов машинного обучения

Дьяконов А.Г.

Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова (Москва, Россия)

Ансамбль алгоритмов (Ensemble)

– алгоритм, который состоит из нескольких алгоритмов машинного обучения (базовых алгоритмов – base learners)

Простой ансамбль в регрессии:

$$a(x) = \frac{1}{n}\left(b_1(x) + \ldots + b_n(x)\right)$$

Простой ансамбль в классификации:

$$a(x) = \text{mode}\left(b_1(x), \ldots, b_n(x)\right)$$

В чём может быть усложнение?

Ансамбль алгоритмов

$$a(x) = b\big(b_1(x), \ldots, b_n(x)\big)$$

b – **мета-алгоритм (meta-estimator),**

b_i – **базовые алгоритмы (base learners)**

в бустинге – слабые (weak)

Теоретическое обоснование

Почему несколько алгоритмов лучше одного…

Ошибка суммы регрессоров

Если ответы регрессоров на объекте – независимые случайные величины с одинаковым матожиданием и дисперсией

$$\xi = \frac{1}{n}\left(\xi_1 + \ldots + \xi_n\right)$$

$$\mathrm{E}\xi = \frac{1}{n}\left(\mathrm{E}\xi_1 + \ldots + \mathrm{E}\xi_n\right) = \mathrm{E}\xi_i$$

$$\mathbf{D}\xi = \frac{1}{n^2}\left(\mathbf{D}\xi_1 + \ldots + \mathbf{D}\xi_n\right) = \frac{\mathbf{D}\xi_i}{n}$$

ДЗ А если есть корреляция между базовыми алгоритмами?

решите в постановке, что корреляция между любыми двумя алгоритмами равна ρ

Ошибка комитета большинства

Пусть три (независимых) классификатора на два класса с вероятностью ошибки p

Пусть верный ответ – 0

$(0,0,0)$	$(1-p)(1-p)(1-p)$
$(1,0,0)$	$p(1-p)(1-p)$
$(0,1,0)$	$(1-p)p(1-p)$
$(0,0,1)$	$(1-p)(1-p)p$

верный ответ

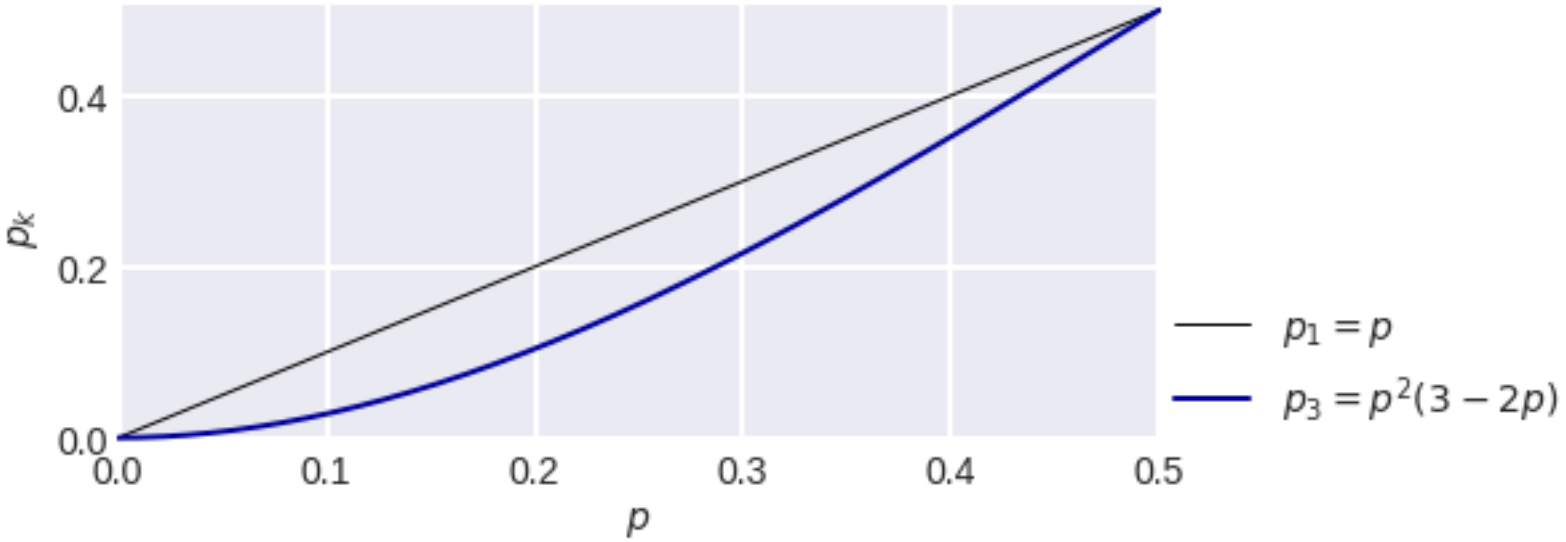
$(1,1,1)$	ppp
$(1,1,0)$	$pp(1-p)$
$(0,1,1)$	$(1-p)pp$
$(1,0,1)$	$p(1-p)p$

ошибка

вероятность ошибки

$$p^3 + 3(1-p)p^2 = p^2(3-2p)$$

Ошибка комитета большинства



При малых p ошибка комитета очень мала!

При $p = 0.2$ – почти в два раза меньше

Ошибка комитета большинства

Общий случай:

$$\sum_{t=0}^{\lfloor n/2 \rfloor} C_n^t (1-p)^t \, p^{n-t} \le e^{-\frac{1}{2} n (2p-1)^2}$$

неравенство Хэфдинга

Ошибка экспоненциально снижается
с увеличением числа базовых алгоритмов…
но это в теории

На практике

Классификаторы / регрессоры точно не являются независимыми

Почему?

На практике

Классификаторы / регрессоры точно не являются независимыми

Почему?

- **Решают одну задачу**
- **Настраиваются на один целевой вектор**
- **Могут быть из одной модели (ну, 2-3 разных)!**

Выход

Пытаться делать алгоритмы разнообразными

Пусть алгоритмы ошибаются, но по-разному:
ошибки одних компенсируются правильными ответами других

Пример: подвыборки и подмножества признаков в RF

Ещё почему алгоритмы в ансамбле должны быть разными

одинаковые	похожие	разные
1111110000 q=0.6	1111110000 q=0.6	1010010111
1111110000 q=0.6	1111101000 q=0.6	1100110011
1111110000 q=0.6	1111100100 q=0.6	1111110000
		1110110011
q_ens = 0.6	q_ens = 0.5	q_ens = 0.7

Нет ли здесь обмана?

Выход

Пытаться делать алгоритмы разнообразными

Пусть алгоритмы ошибаются, но по-разному:
ошибки одних компенсируются правильными ответами других

Пример: подвыборки и подмножества признаков в RF

Ещё почему алгоритмы в ансамбле должны быть разными

одинаковые	похожие	разные
1111110000 q=0.6	1110111000 q=0.6	1010010111
1111110000 q=0.6	1101110100 q=0.6	1100110011
1111110000 q=0.6	1011101100 q=0.6	1111110000
		1110110011
q_ens = 0.6	q_ens = 0.8	q_ens = 0.7

Нет ли здесь обмана?

Повышения разнообразия

- **«варьирование» обучающей выборки**
  (бэгинг)

- **«варьирование» признаков**
  (Random Subspaces)

- **«варьирование» целевого вектора**
  (ECOC, f(y))

- **«варьирование» моделей**
  (стекинг)

- **«варьирование» в модели**
  (разные алгоритмы в рамках одной – специальные НС, рандомизация в алгоритме – случайный лес, инициализация в НС)

Обоснования применения ансамблей

Статистическое (Statistical)

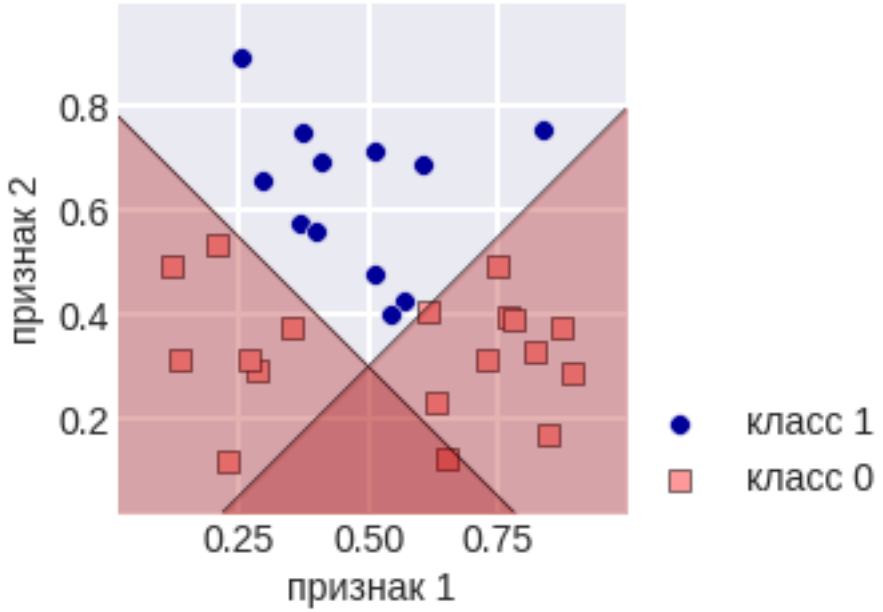
Вычислительное (Computational)

Функциональное (Representational)

– ошибка может быть меньше

– обучение = оптимизация функции, а ансамбль «распараллеливает» процесс

–можно представить функции, которые нельзя было с помощью базовых алгоритмов



Ансамбли

- **комитеты (голосование) / усреднение**

в том числе, усреднение по Коши,
калибровка + усреднение

- **ECOC (error-correcting output coding)**

кодирование целевого вектора

- **стекинг (stacking)**

построение метапризнаков — ответы алгоритмов на объектах обучающей (под)выборки, обучение на них нового алгоритма

- **бэгинг (bagging)**

усреднение моделей обученных на бутстреп-подвыборках

+ обобщения (RF)

- **бустинг (boosting)**

веса объектов обучения, обучение на взвешенной выборке, увеличение весов неверно классифицированных объектов

- **«ручные методы»**

Комитеты (голосование, Voting Ensembles)

голосование по большинству (Majority vote)

$$a(x) = \text{mode}\left(b_1(x), \ldots, b_n(x)\right)$$

комитеты единогласия

в бинарной задаче классификации –

$$a(x) = \min\left(b_1(x), \ldots, b_n(x)\right)$$

обнаружение аномалий:

мата-алгоритм – максимум

«тревога при малейшем подозрении»

$$a(x) = \max\left(b_1(x), \ldots, b_n(x)\right)$$

Усреднение

«среднее арифметическое»

$$a(x) = \frac{1}{n}\left(b_1(x) + \ldots + b_n(x)\right)$$

+ любые другие средние (ex: по Колмогорову)

$$a(x) = \frac{1}{n} f^{-1}\left(f(b_1(x)) + \ldots + f(b_n(x))\right)$$

Ранговое усреднение (Rank Averaging)

$$a(x) = \frac{1}{n}\left(\text{rank}(b_1(x)) + \ldots + \text{rank}(b_n(x))\right)$$

ориентировано на конкретный AUC ROC

Усреднение / голосование с весами (weighted averaging)

$$a(x) = \frac{1}{w_1 + \ldots + w_n}\left(w_1 \cdot b_1(x) + \ldots + w_n \cdot b_n(x)\right)$$

Усреднение

Feature-Weighted Linear Stacking

Области компетентности алгоритмов – линейные регресии

$$a(x) = w_1(x) \cdot b_1(x) + \ldots + w_n(x) \cdot b_n(x) =$$

$$= \sum_t (\sum_i w_{ti} x_i) b_t(x) = \sum_{t,i} w_{ti} x_i b_t(x)$$

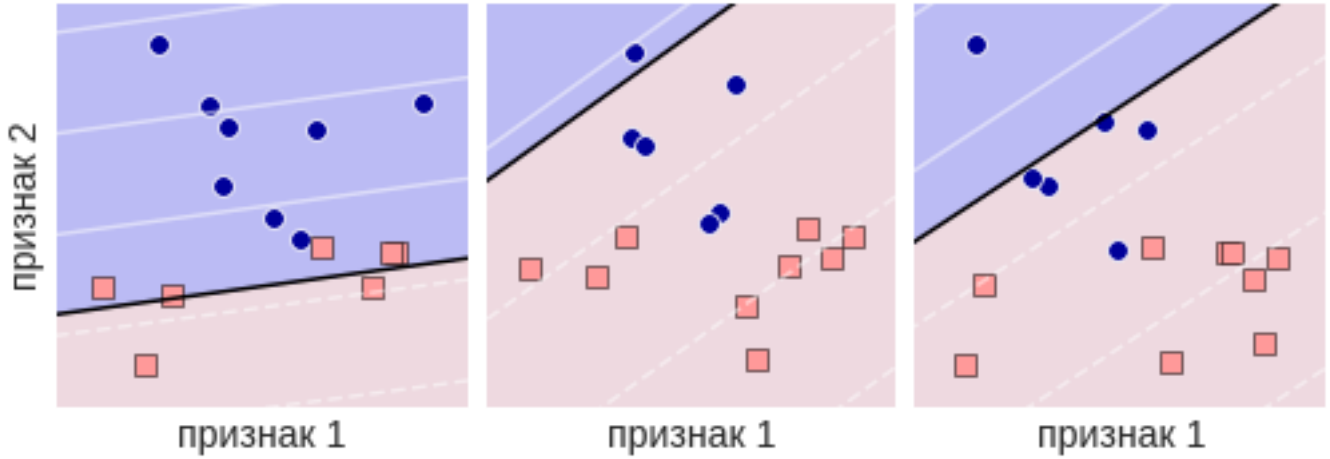
Бэгинг (Bagging)
– bootstrap aggregating

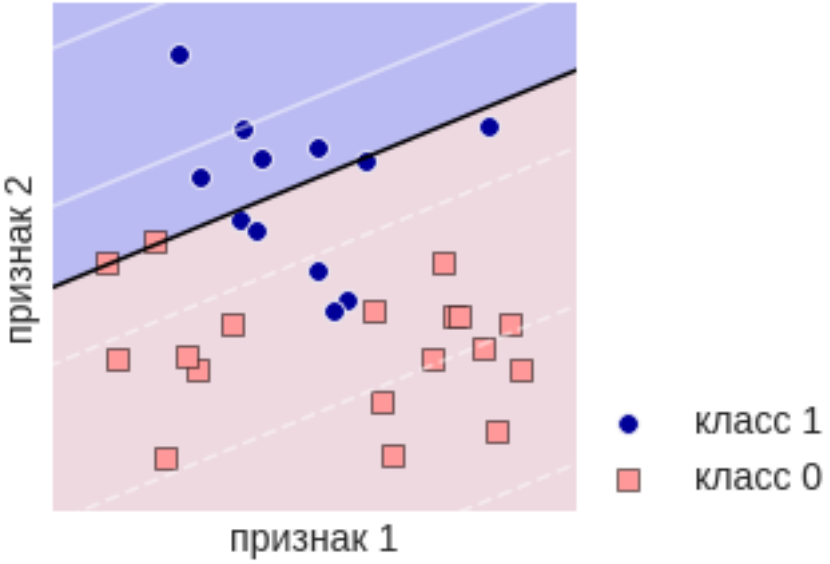
Каждый базовый алгоритм настраивается на случайной подвыборке обучения

Бэгинг	**Подвыборка обучающей выборки берётся с помощью бутстрепа**
Пэстинг (Pasting)	**Случайная обучающая подвыборка.**
Случайные подпространства (Random Subspaces)	**Случайное подмножество признаков**
Случайные патчи (Random Patches)	**Одновременно берём случайное подмножество объектов и признаков**
cross-validated committees	**k обучений на (k-1)-м фолде**

Особенности ансамблирования

Не всегда получается «как было задумано»…






```
model =
BaggingClassifier(base_estimator=LogisticRegression(),
                                    n_estimators=100,
                                    max_samples=1.0,
                                    max_features=1.0,
                                    bootstrap=True,
                                    bootstrap_features=False,
                                    oob_score=False,
                                    warm_start=False,
                                    n_jobs=None,
                                    random_state=None,
                                    verbose=0)

model.fit(X, y)
```

Бэгинг (Bagging)

1. Цикл по t **(номер базового алгоритма)**

1.1. Взять подвыборку $[X', y']$ **обучающей выборки** $[X, y]$

1.2. Обучить t**-й базовый алгоритм на этой подвыборке:**

$$b_t = \text{fit}(X', y')$$

2. Ансамбль

$$a(x) = \frac{1}{n}\left(b_1(x) + \ldots + b_n(x)\right)$$

(для задач регрессии).

Вероятность отбора при бутстрепе (при $m \to \infty$**):** $1 - \frac{1}{e} \approx 0.632$

Каждый базовый алгоритм обучается ~ на 63% данных

Остальные называются – out-of-bag-наблюдениями (OOB)

~процедура снижения variance в статистическом обучении

OOB-prediction

На OOB-части выборки можно получить ответы алгоритма

Пусть на i-й итерации это часть: OOB_i

и мы построили алгоритм b_i

OOB-ответы бэгинга (OOB-prediction)

$$a_{\mathrm{OOB}}(x_j) = \frac{1}{|\{i : x_j \in \mathrm{OOB}_i\}|} \sum_{i:\, x_j \in \mathrm{OOB}_i} b_i(x_j)$$

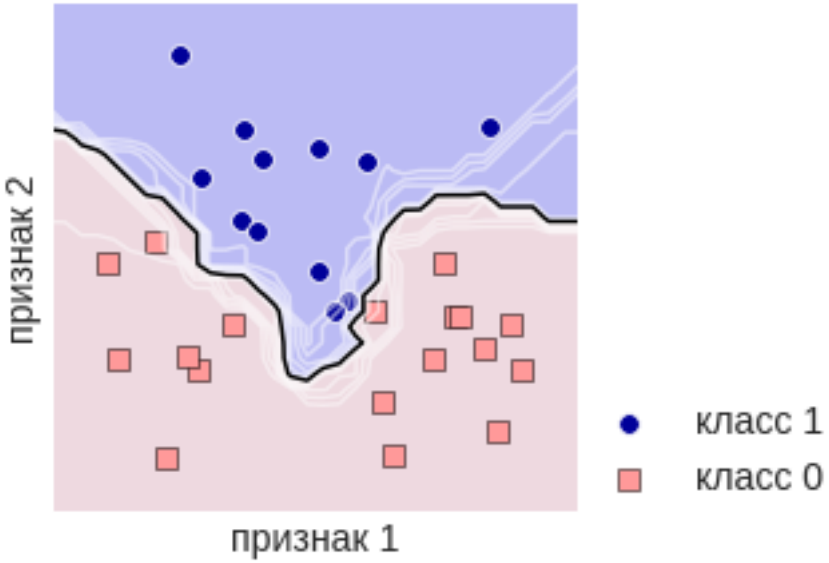
Можно вычислить
OOB-ошибку бэгинга

хорошая оценка ошибки на тесте
похожа на CV-ошибку…

Устойчивость (stable learners) модели –

незначительное изменение оптимальных параметров при взятии подвыборки (SVM, kNN k>3)

В бэгинге используются неустойчивые модели (high variance)!
Но несмещённые (small bias)!
Но тут нет хороших теоретических результатов…



Пример – если выбрать правильную базовую модель для бэгинга

Здесь – kNN(1)

Идеи для бэгинга…

Часто признаки делятся / можно разделить на группы:

- **по источнику данных (БКИ1, БКИ2, …)**
- **по типу признака (вещественный, категориальный, …)**
- **по кодированию (OHE, hash, label, …)**
- **по способу агрегирования (PCA, t-SNE, кластеризация,…)**

Иногда объекты:

- **по источнику данных**
- **по времени**
- **по значениям каких-то признаков (в том числе по кластерам)**

– эти деления можно использовать при формировании подвыборок… вопрос – как?

Случайный лес (Random Forest)

дальнейшие улучшения независимости базовых классификаторов

бэгинг + случайности при построении деревьев

отдельная лекция

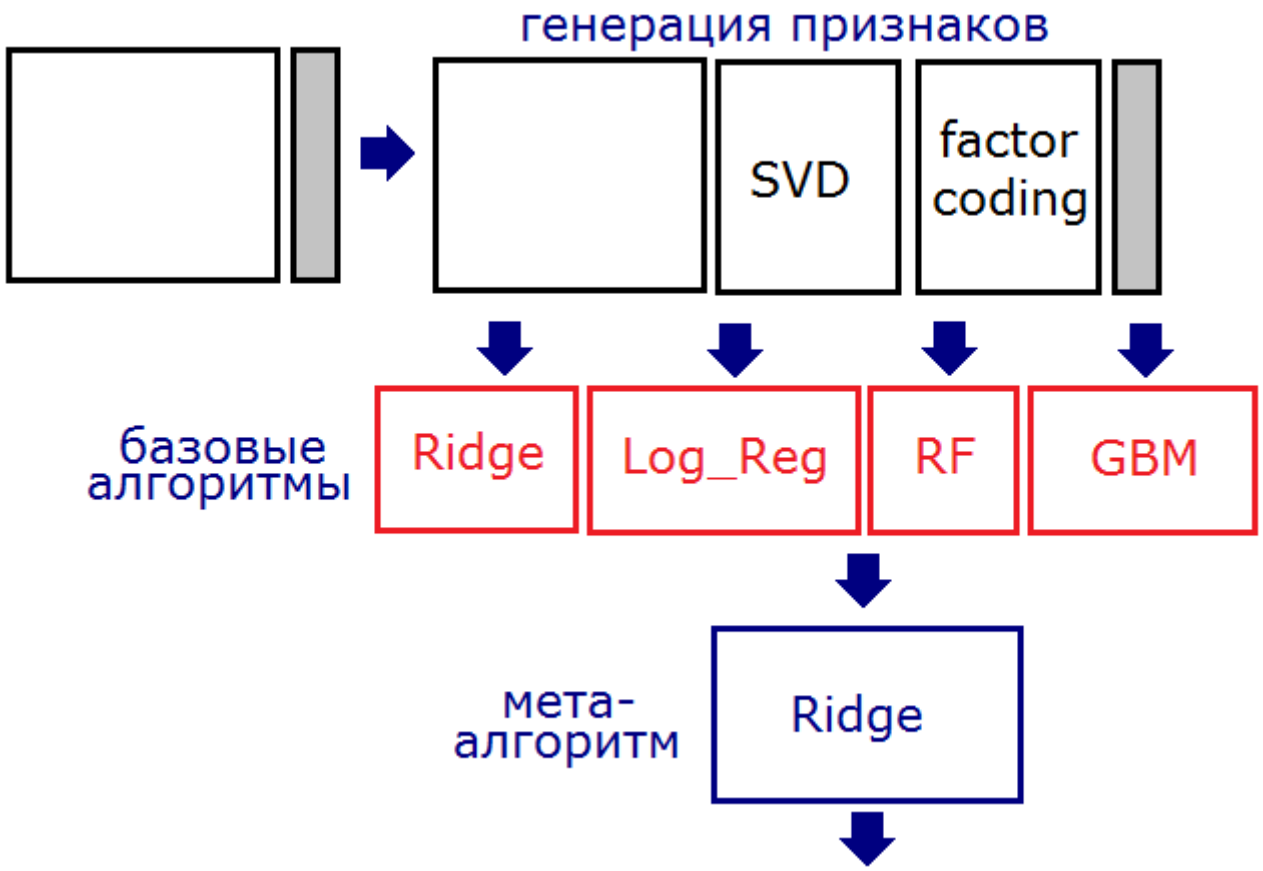
Стекинг (stacking)

Идея: хорошо усреднять алгоритмы, но почему именно усреднять?

$$a(x) = b\big(b_1(x), \ldots, b_n(x)\big)$$

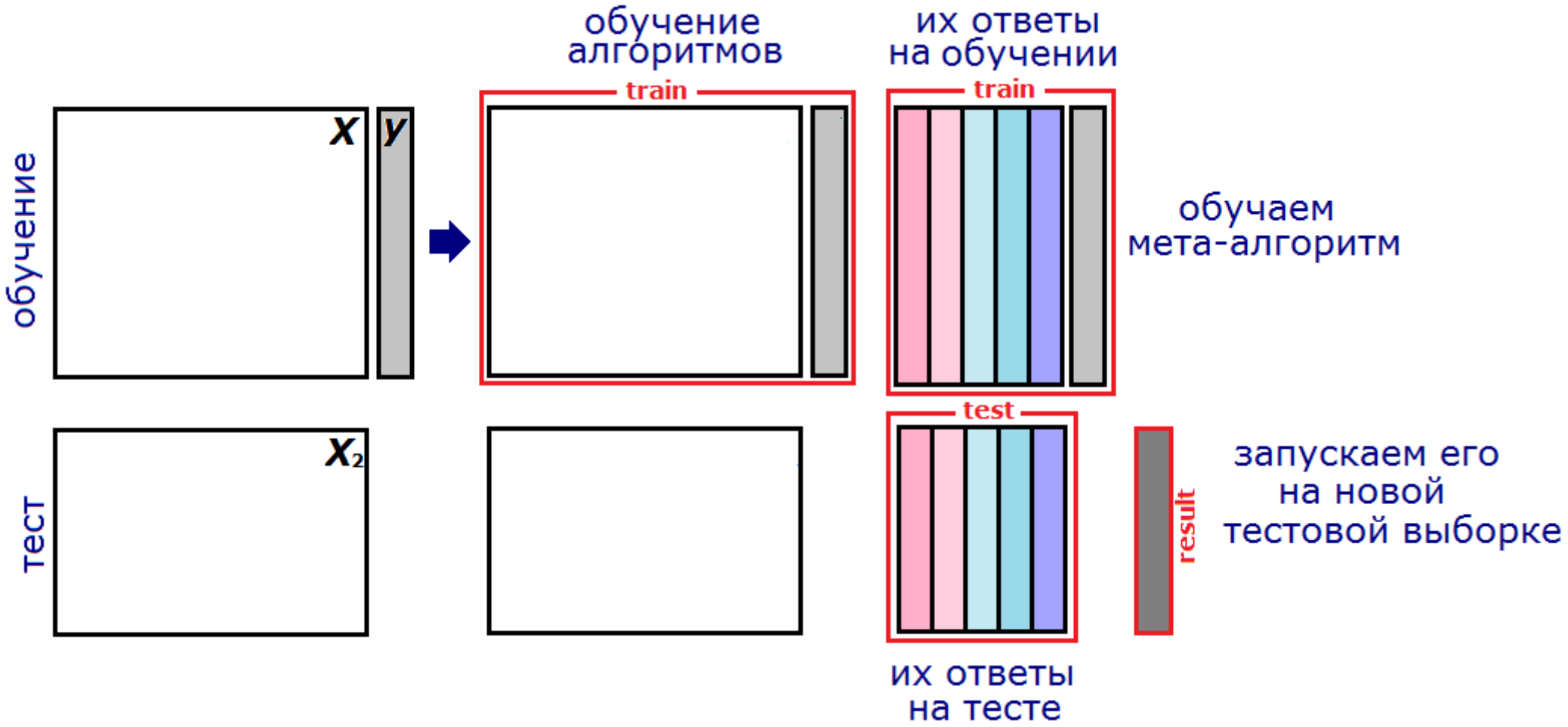
b – мета-алгоритм,
который нужно отдельно настроить!

Стекинг



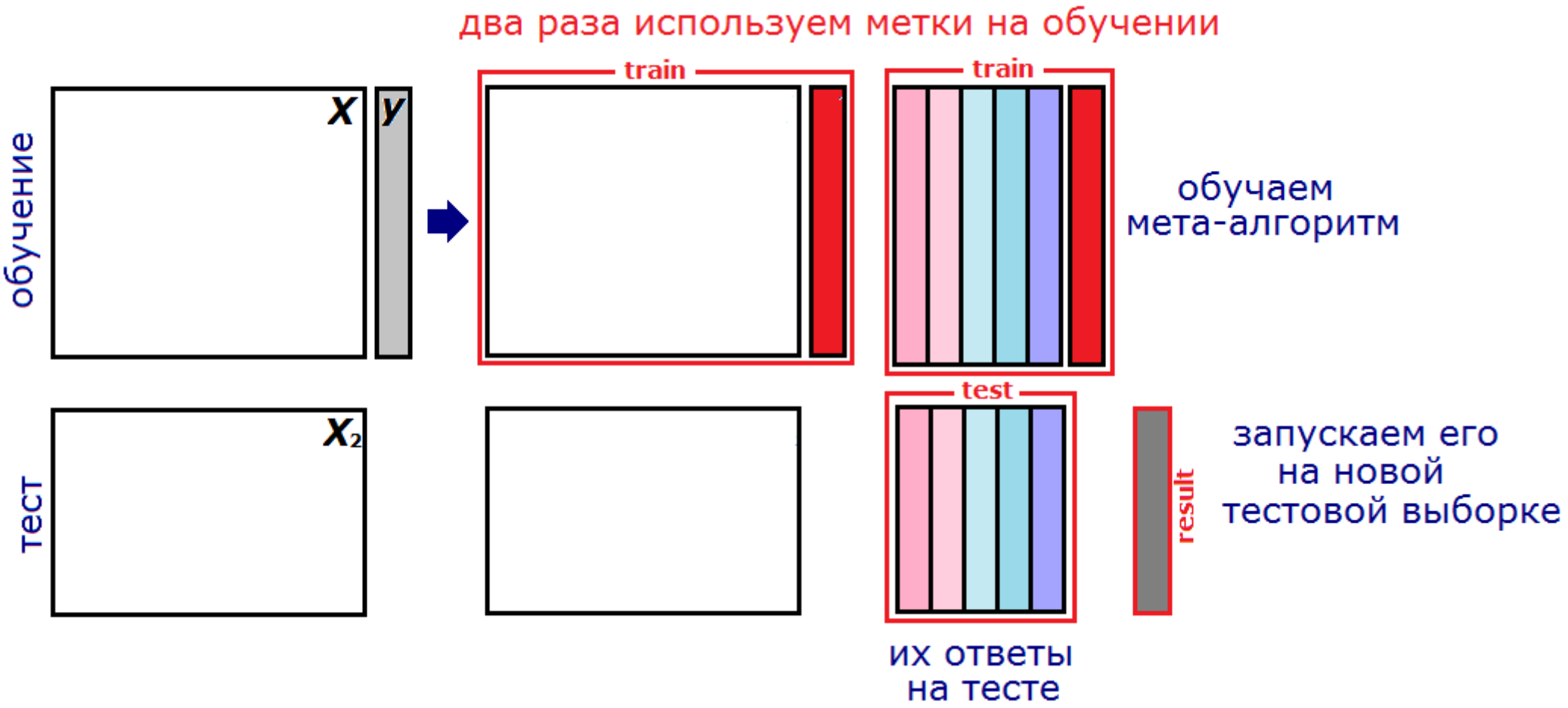
Используем ответы алгоритмов как признаки для нового мета-алгоритма машинного обучения

Наивная форма стекинга

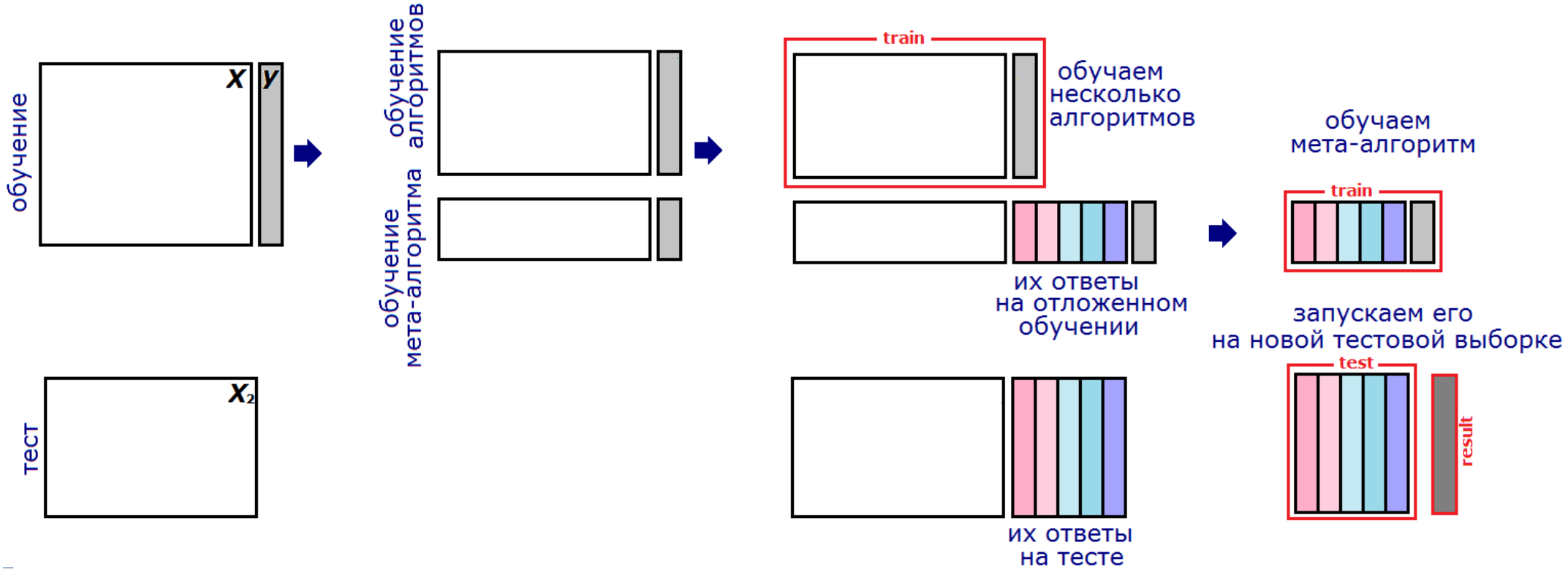


что здесь неправильно?

Наивная форма стекинга



Блендинг (простейшая форма стекинга)



Блендинг

– термин введён победителями конкурса Netflix

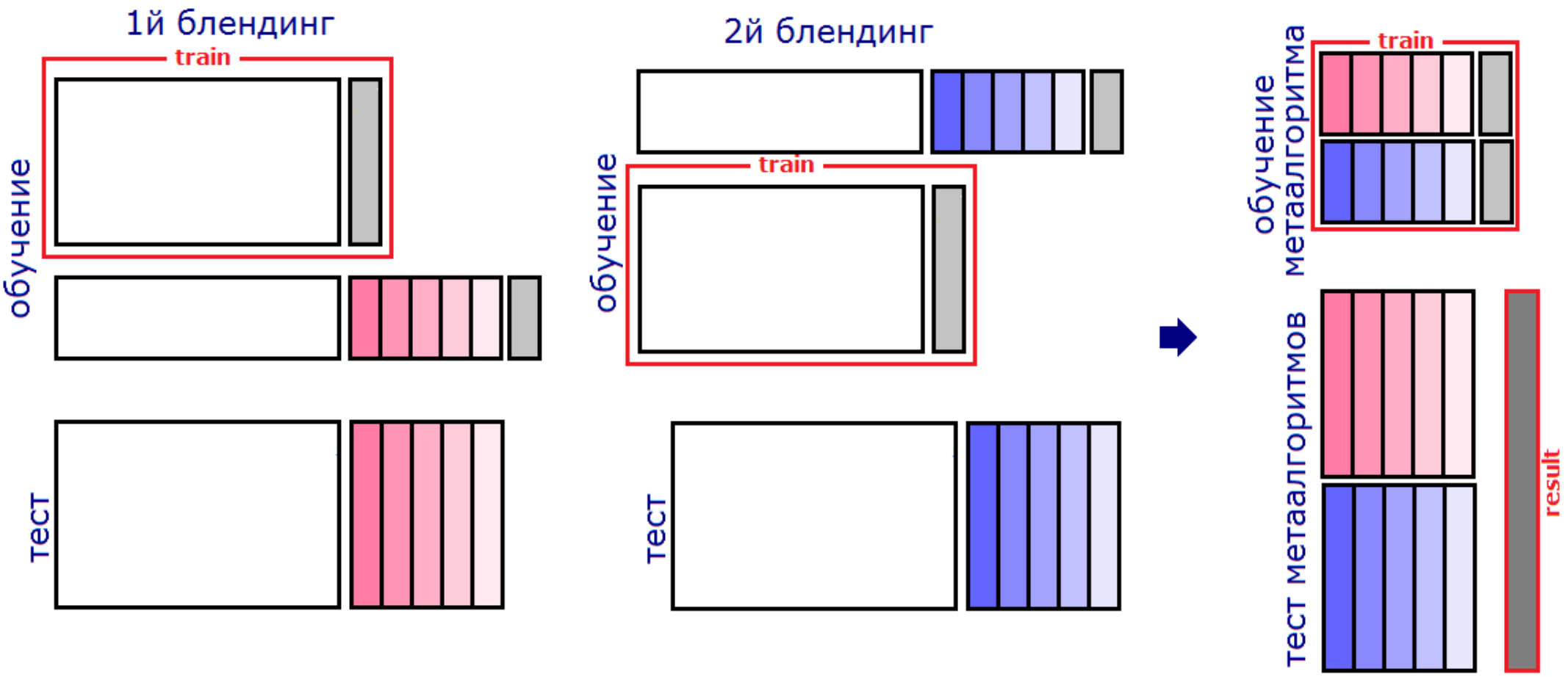
Сейчас блендингом называются простейшие формы стекинга

Недостатки

Используется не вся обучающяя выборка

- можно усреднить несколько стекингов
- можно «состыковать»

Блендинг

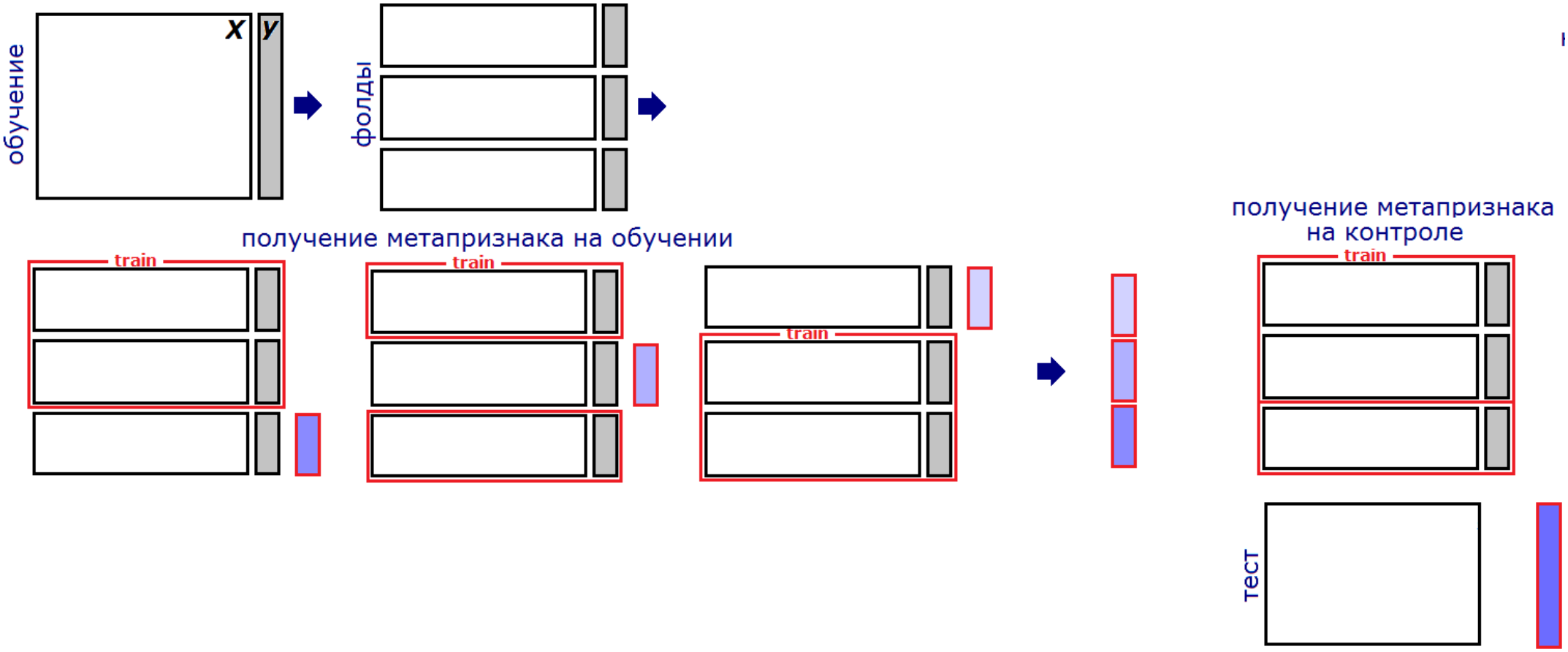


Состыковка таблиц

- Долго и не всегда лучше по качеству
- Ответы всё равно надо будет усреднить

Стекинг

Хотим использовать всю обучающую выборку



Стекинг

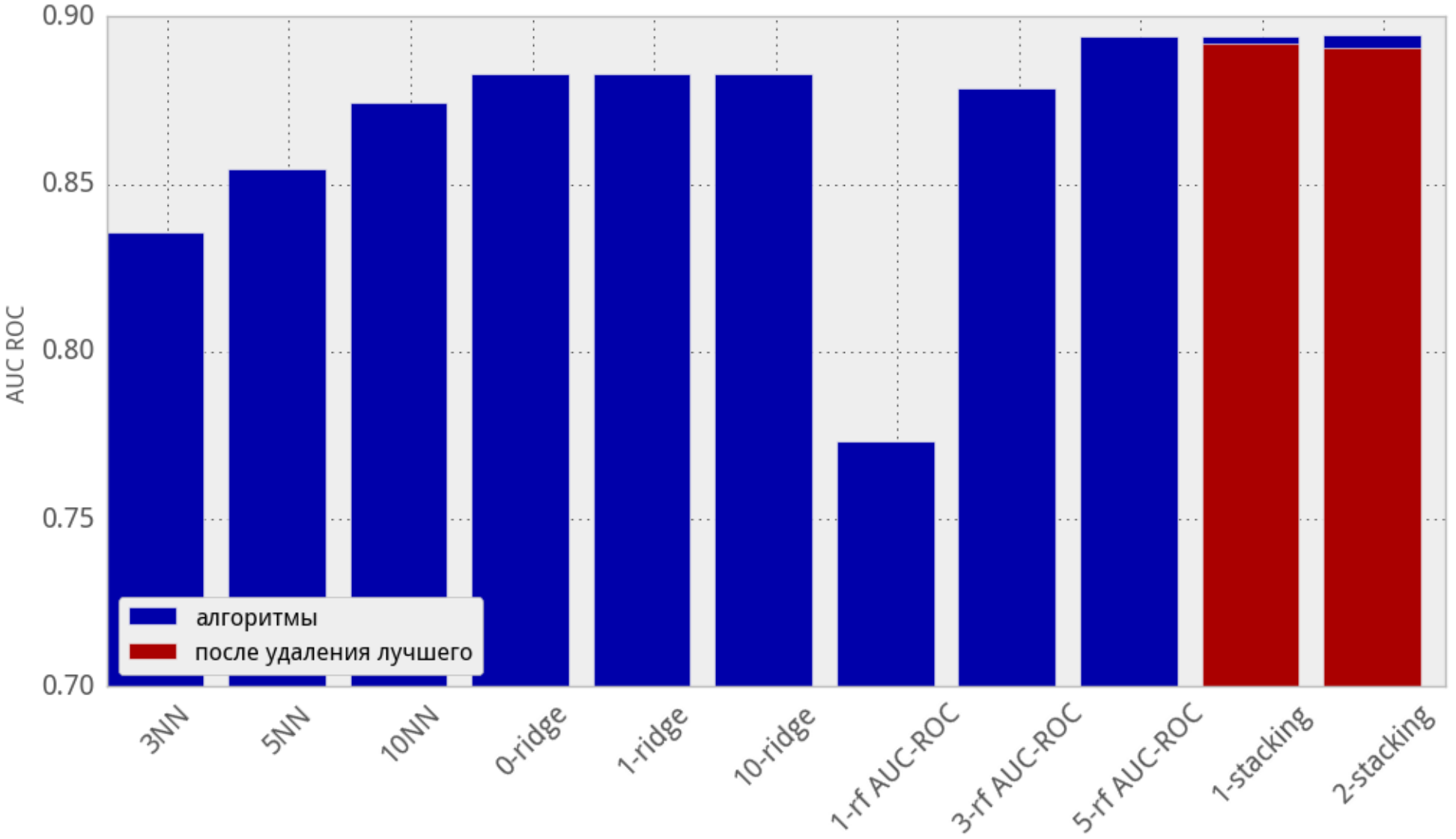
также можно брать разные разбиения и усреднять

Недостаток

Метапризнаки на обучении и тесте разные!

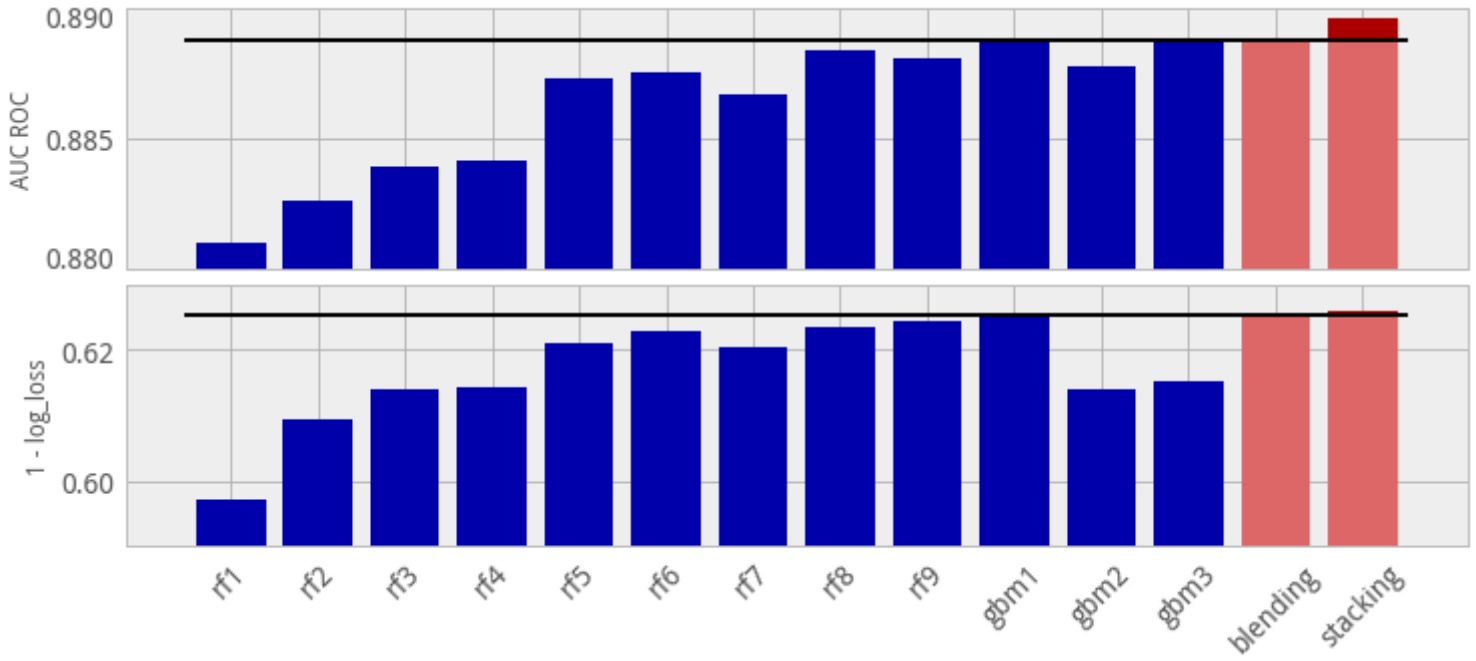
- регуляризация
- нормальный шум к метапризнакам

Стекинг



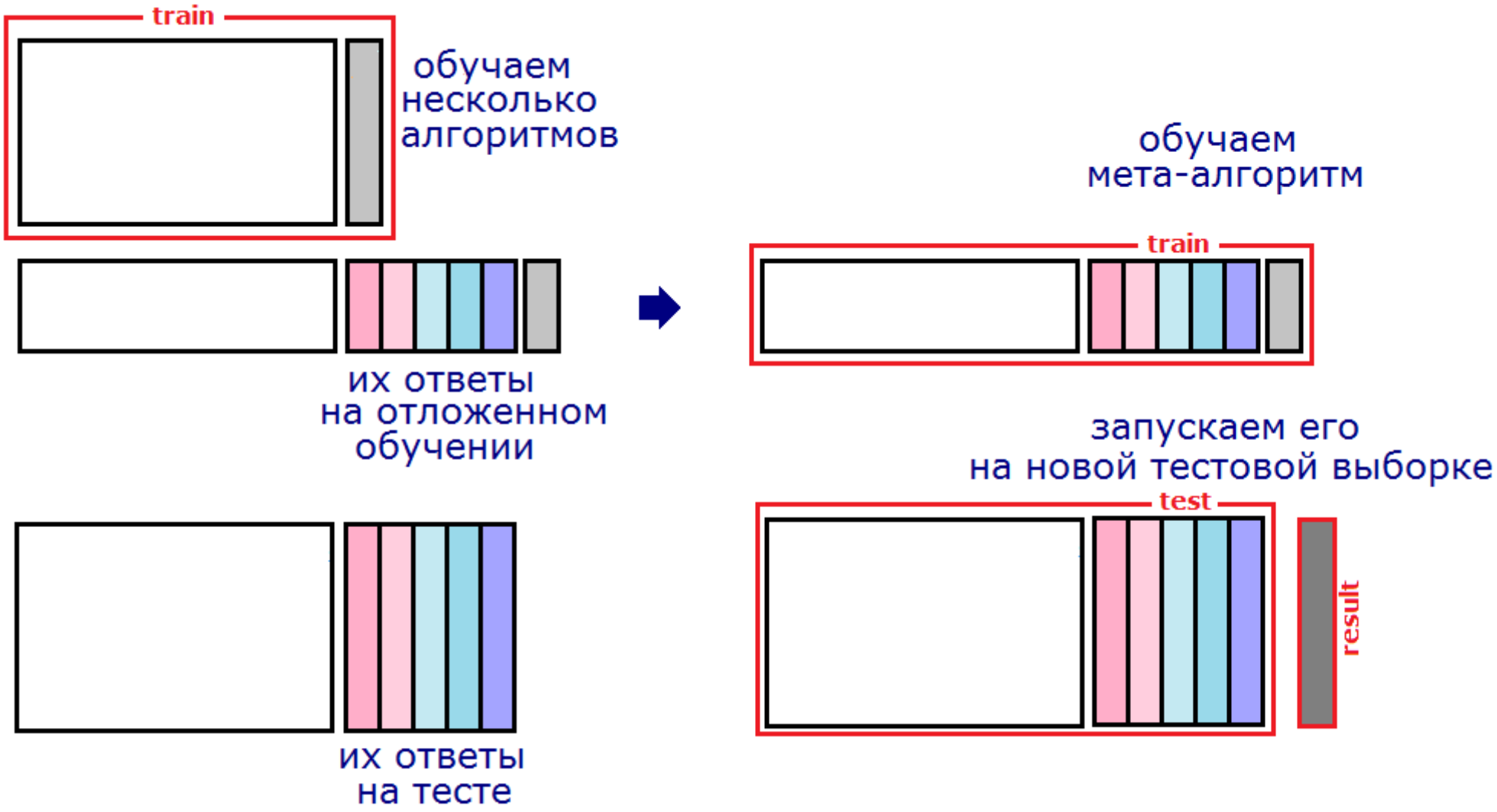
Не сильно повышает качество...

Стекинг



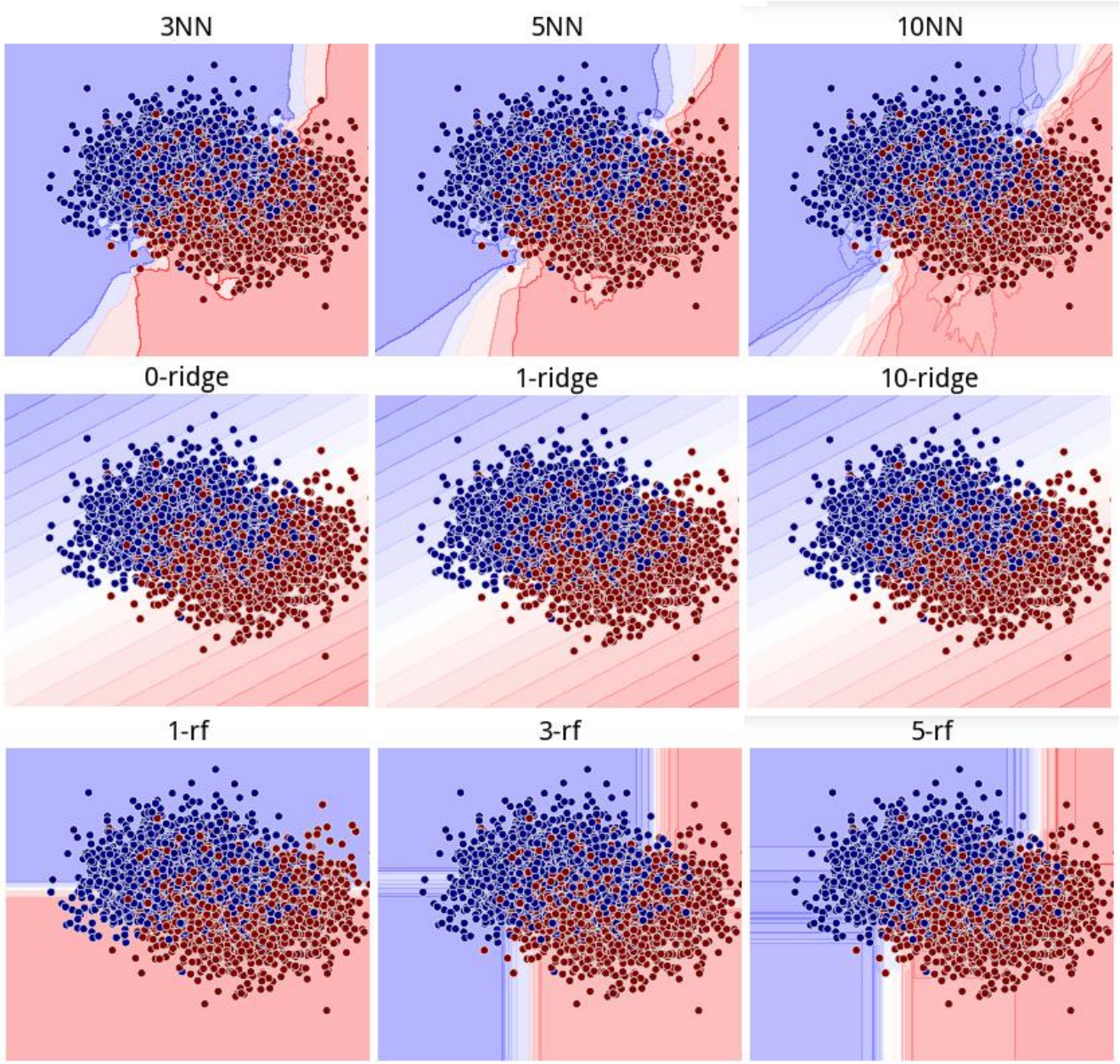
На данных реальной задачи mlbootcamp

Использование признаков с мета-признаками

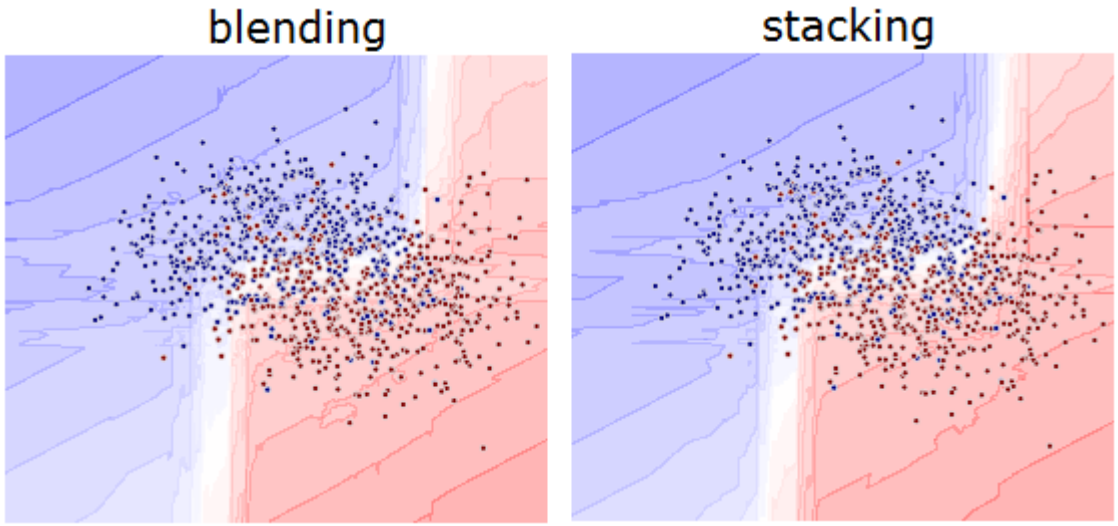


можно добавлять результаты обучения без учителя…

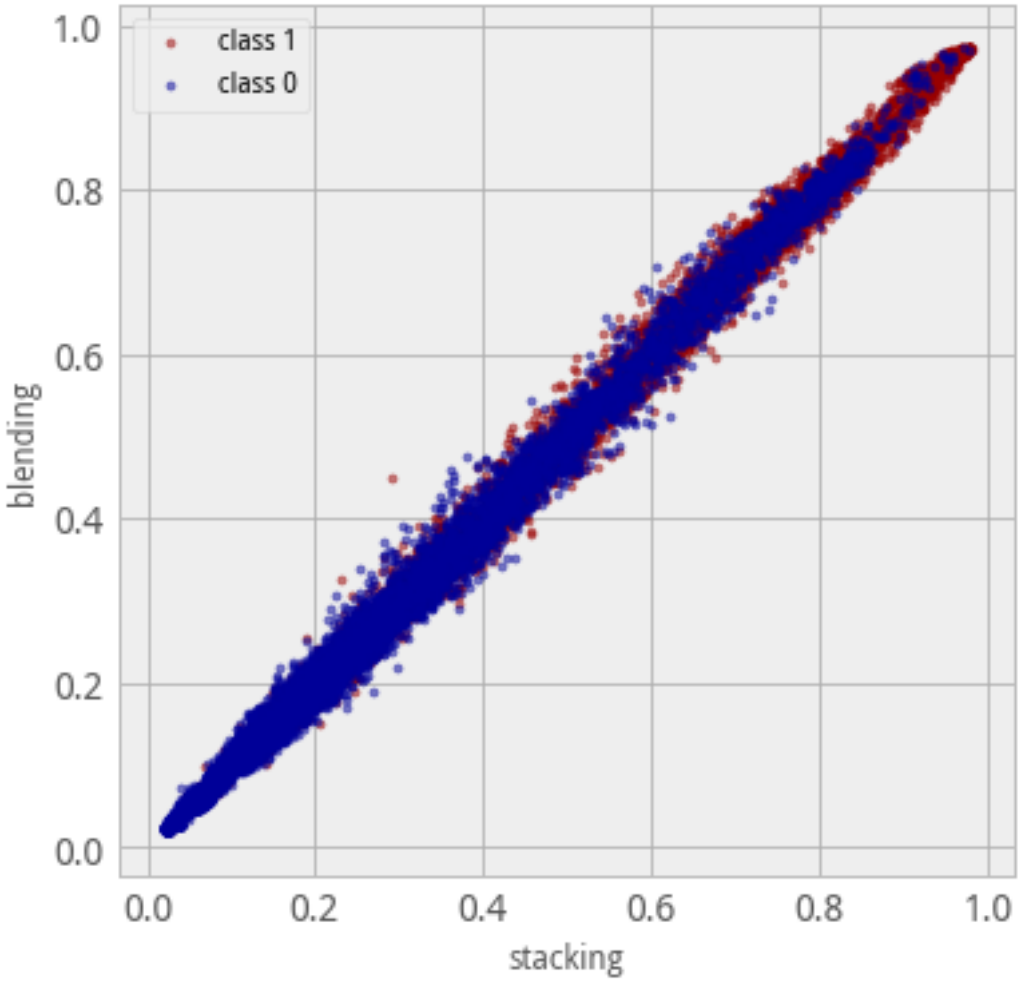
Геометрия стекинга

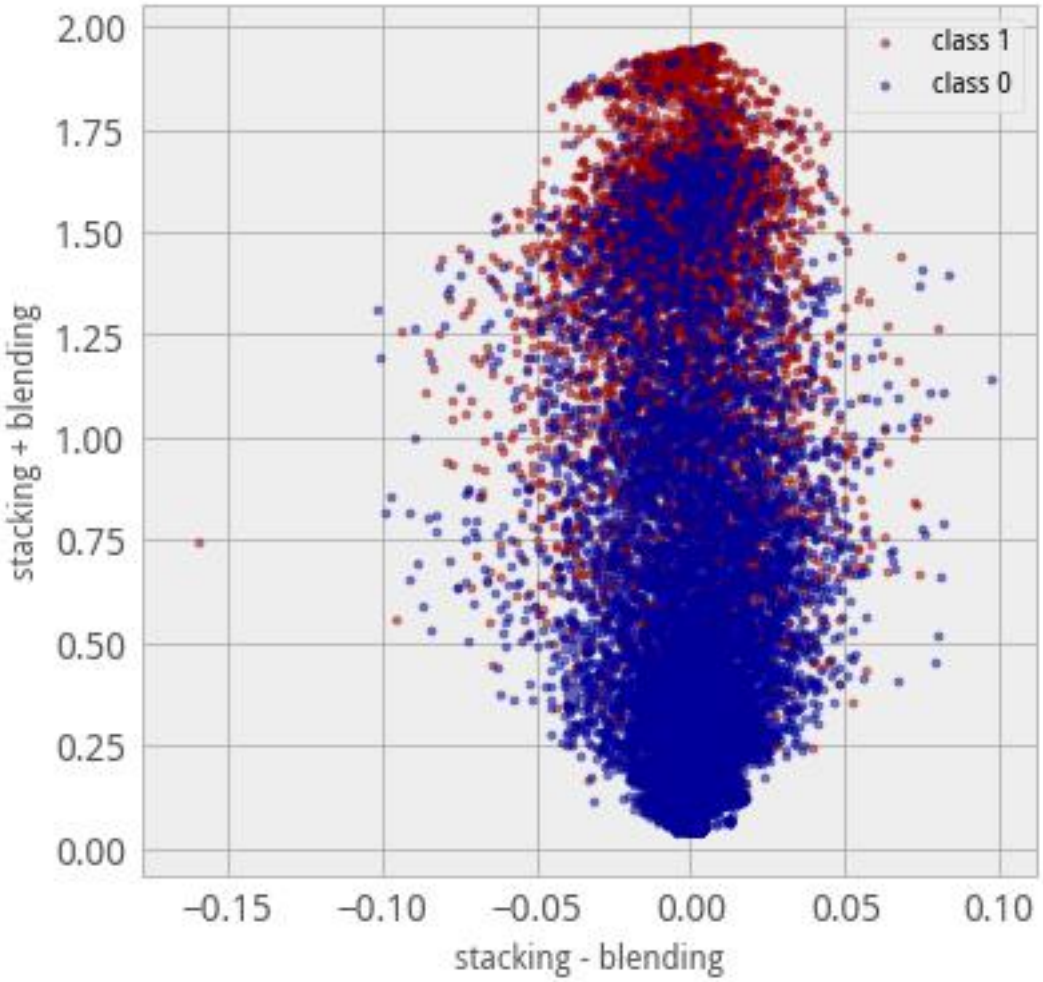


Геометрия стекинга



Стекинг vs Блендинг





Результаты очень похожи...

Стекинг

- **Нужны достаточно большие выборки**

- **Заточен на работу алгоритмов разной природы**

Но для каждого м.б. своё признаковое пространство

- **Хорош на практике (бизнес-задачи)**

Пример: регрессоры + RF =
устойчивость к аномальным значениям признаков

- **Метаалгоритм должен минимизировать целевую функцию**

Не всё так просто… log_regs + log_reg может не справится с Log_loss

- **Многоуровневый стекинг**

Оправдан только в спортивном анализе данных

Стекинг

- **Пространство метапризнаков удобнее признакового, но признаки сильно коррелированны**

Но нет хорошей теории на эту тему

- **базовые алгоритмы не сильно оптимизируют,**
- **настраиваются не на целевой признак (на его квадрат, на разницу между каким-то признаком и целевым),**
- **используют модели ориентированные на разные функционалы качества,**
- **пополняют множество базовых алгоритмов алгоритмами, которые решают другую задачу (например кластеризаторами).**

ECOC
= Error-Correcting Output Code

Пусть есть задача с L классами,
а у нас классификаторы на 2 класса

1. One-vs-All – каждый класс отделяем от остальных

```
0 – 1000
1 – 0100
2 – 0010
3 – 0001
```

2. One-vs-One – попарно классы друг от друга

```
0 – 111---
1 – 0--11-
2 – -0-0-1
3 – --0-00
```

ECOC

3. Допустима произвольная кодировка классов:

```
0 – 00
1 – 10
2 – 01
3 – 11
```

4. В том числе, с помощью ECOC

```
0 – 000111
1 – 011100
2 – 101010
3 – 110001
```

Бустинг: Forward stagewise additive modeling (FSAM)

Центральная идея бустинга

Задача регрессии

$$(x_i, y_i)_{i=1}^m$$

функция ошибки

$$L(y, a)$$

уже есть алгоритм $a(x)$ **строим** $b(x)$**:**

$$a(x_i) + b(x_i) = y_i, i \in \{1,2,\ldots,m\}.$$

Надо:

$$\sum_{i=1}^{m} L(y_i, a(x_i) + b(x_i)) \to \min,$$

Бустинг: Forward stagewise additive modeling (FSAM)

0. Начать с $a_0(x) \equiv 0$

1. Цикл

$$(b,\eta) = \arg\min_{b,\eta} \sum_{i=1}^{m} L(y_i, a_{k-1}(x_i) + \eta b(x_i))$$

$$a_k = a_{k-1} + \eta b$$

Пример: L_2–бустинг

$$\eta = 1,\ L(y,a) = (y-a)^2$$

$$\sum_{i=1}^{m} (y_i - a_{k-1}(x_i) - b(x_i))^2 \to \min$$

тут м.б. обычная регрессия

градиентный бустинг – отдельная лекция…

AdaBoost: постановка задачи

– FSAM для бинарной задачи классификации $Y = \{+1, -1\}$

базовые классификаторы генерируют классы

$$b(x) \in \{+1, -1\}$$

Ансамбль

$$a(x) = \operatorname{sgn}\left(\sum_{j=1}^{s} \alpha_j b_j(x) \right)$$

exponential loss

$$L(y, a) = \exp\left(-y \sum_{j=1}^{s} \alpha_j b_j(x) \right)$$

AdaBoost: весовая схема

У каждого объекта – вес (распределение!)

$$\sum_{t=1}^{m} w^t = 1$$

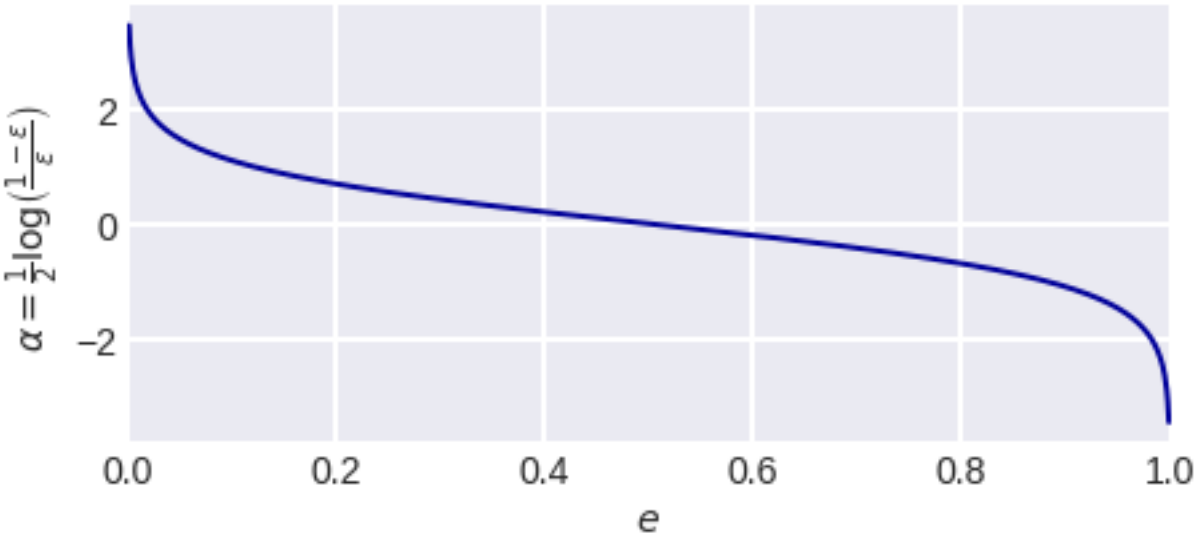
«ошибка, порождённая распределением» (не имеет общего с экспоненциальной ошибкой – просто обозначение) **–**

$$e(a) = \sum_{\substack{t=1, \\ a(x^t) \neq y(x^t)}}^{m} w^t$$

AdaBoost: алгоритм

0. Зададим начальное вероятностное распределение (веса)	$W = \left(\frac{1}{m}, \ldots, \frac{1}{m}\right)$
1. Цикл по j **от 1 до** s	
1.1. Построить классификатор b_j**, который допускает ошибку** $e(b_j)$	**(вычисляется по распределению** W**) предполагаем, что** $0 < e(b_j) < 0.5$
1.2. Пусть $\alpha_j = \frac{1}{2}\ln\left(\frac{1-e(b_j)}{e(b_j)}\right)$ **«Перестроить» распределение** $W = (w^1, \ldots, w^m)$**:**	$w^t = \frac{w^t \exp(-\alpha_j y(x^t) b_j(x^t))}{\sum_{t=1}^{m} w^t \exp(-\alpha_j y(x^t) b_j(x^t))}$

AdaBoost: коэффициент



Зависимость коэффициента от ошибки

вариант: перенастраивать веса только объектов, на которых ошибки…

AdaBoost: вывод формул

экспоненциальная ошибка:

$$L(y,a(x)) = \exp\left(-y\sum_{j=1}^{s}\alpha_j b_j(x)\right)$$

распишем (выделим последний «только что построенный» базовый)

$$\sum_{t=1}^{m} w_t \exp\left(\underbrace{-y_t\sum_{j=1}^{s-1}\alpha_j b_j(x_t)}_{H} - y_t\alpha_s b_s(x_t)\right) = \exp(H)\sum_{t=1}^{m} w_t \exp\left(-y_t\alpha_s b_s(x_t)\right)$$

можно множитель не учитывать

$$\sum_{t=1}^{m} w_t \exp\left(-y_t\alpha_s b_s(x_t)\right) = \sum_{t:y_t=a_s(x_t)} w_t \exp\left(-\alpha_s\right) + \sum_{t:y_t\neq a_s(x_t)} w_t \exp\left(\alpha_s\right) =$$

$$= (1-e)\exp\left(-\alpha_s\right) + e\exp\left(\alpha_s\right)$$

AdaBoost: вывод формул

в итоге ошибка $\propto (1-e)\exp(-\alpha_s)+e\exp(\alpha_s)$

если хотим найти оптимальный множитель, продифференцируем и приравняем к нулю

$$\alpha_s = \frac{1}{2}\log\frac{1-e}{e}$$

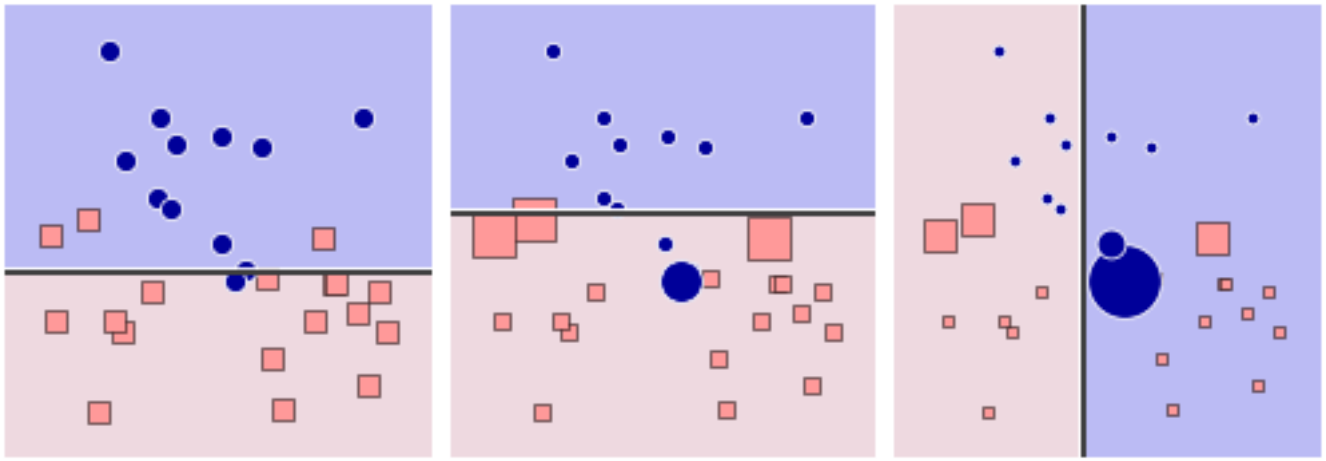
теперь смотрим на формулу ошибки

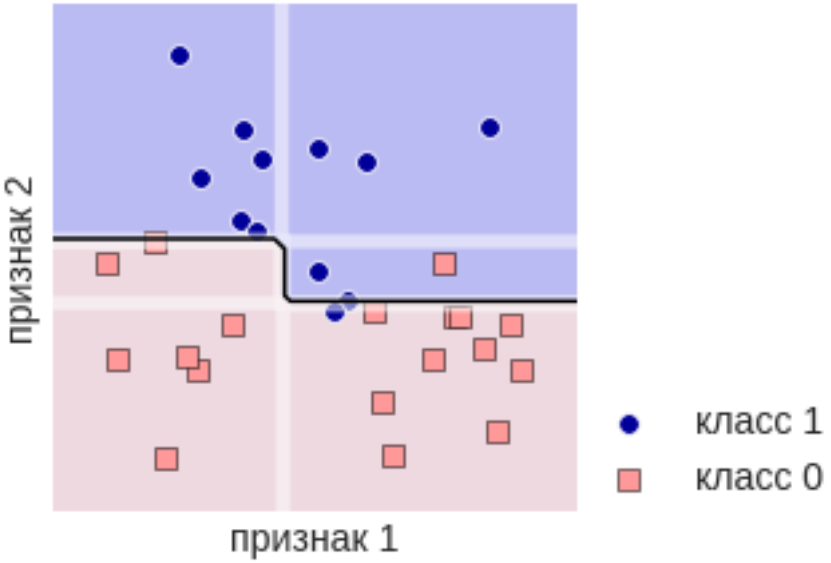
$$\exp(H)\sum_{t=1}^{m} w_t \exp\left(-y_t \alpha_s b_s(x_t)\right)$$

и пересчёта весов… это просто учёт в весах новых ответов

всегда происходит умножение…

AdaBoost: пример



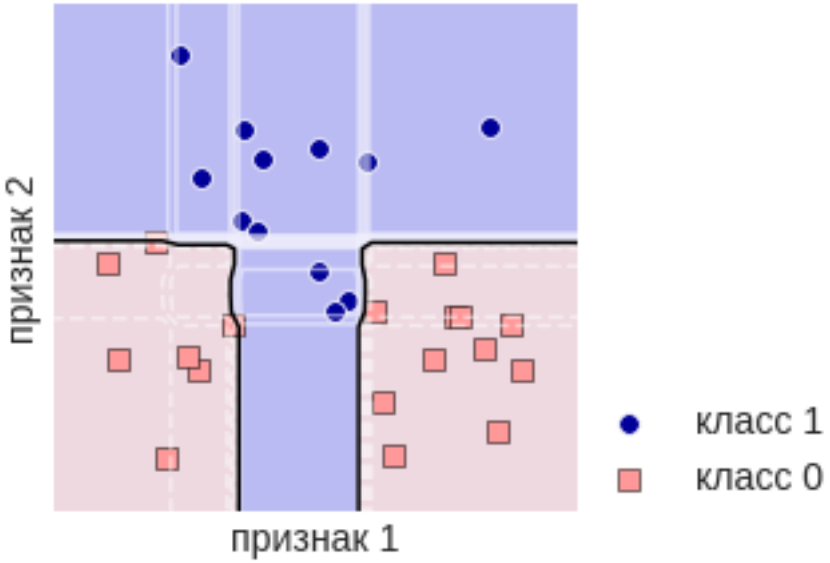


объектов пропорционален весу…

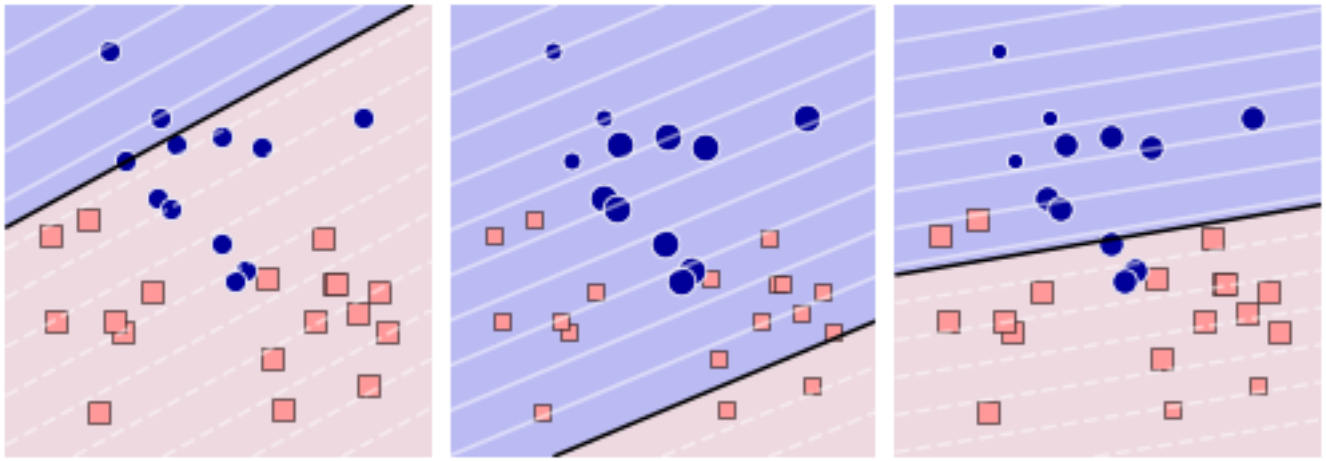
– полученная комбинация классификаторов

AdaBoost: минутка кода

```
from sklearn.ensemble import AdaBoostClassifier
from sklearn.tree import DecisionTreeClassifier
model =
AdaBoostClassifier(base_estimator=DecisionTreeClassifier(max_depth=1),
                           n_estimators=20, learning_rate=1.0,
                           algorithm='SAMME.R', random_state=1)
model.fit(X, y)
```



AdaBoost: недостатки



Бустинг плох, когда есть выбросы.

В приведённом примере бустинг плох над логистической регрессией (над стабильными алгоритмами)!

Ручные методы ансамблирования

Метод Ефимова

- y_{FE} - Functional Ensembling response
- y_{GBM} - Generalized Boosting response

	$y_{FE} \le 0.1$	$0.1 < y_{FE} < 0.9$	$y_{FE} \ge 0.9$
$y_{GBM} \le 0.1$	min	min	0.55
$y_{GBM} \le 0.1$	0.1	mean	0.9
$y_{GBM} \ge 0.9$	0.75	max	max

Amazon Employee Access Challenge

Итог: ключевые идеи ансамблирования

1. Объединение ответов разных алгоритмов

усреднение / голосование / стекинг …

2. Повышения разнообразия / независимости базовых алгоритмов

«варьирование» признаков, объектов, моделей, в модели и т.п.

Использование подвыборок / весов

3. Ансамблирование: параллельное и последовательное

Parallel ensembles – все алгоритмы строятся независимо

Идея: усреднить (high complexity, low bias)-модели, для снижения variance

Sequential ensembles – алгоритмы строятся последовательно

Общая классификация главных мета-алгоритмов

	разброс (model's variance)	смещение (model's bias)	функциональная выразимость	основа техники
Bagging «среднее»	уменьшает			bootstrap
Boosting «взвешенное среднее»		уменьшает	(увеличивает)	градиентный спуск (сейчас)
Stacking Мета-алгоритм	(уменьшает)	(уменьшает)	увеличивает	суперпозиция алгоритмов