Лекция 7. Композиции алгоритмов

Основы интеллектуального анализа данных

Полузёров Т. Д.

БГУ ФПМИ

1. Общие принципы
   - Композиция
   - Агрегирующая функция
2. Беггинг
   - Смещение и разброс
   - Некоррелированность алгоритмов
   - Случайный лес
3. Бустинг
   - Градиентный бустинг

Общие идеи

Имеется размеченная выборка $X^\ell = (x_i, y_i)_{i=1}^\ell \subset \mathbb{X} \times \mathbb{Y}$.
Задача — приблизить истинную зависимость $y^* : \mathbb{X} \to \mathbb{Y}$

Ранее мы строили один сильный алгоритм $a(x) := C(b(x))$, такой что $\mathbb{X} \xrightarrow{b} \mathbb{R} \xrightarrow{C} \mathbb{Y}$.

Быть может лучше использовать несколько базовых алгоритмов $(b_i(x))_{i=1}^k$, а затем учесть ответы их всех $a(x) = C(F(b_1(x), \ldots, b_k(x)))$. Тоесть $\mathbb{X} \xrightarrow{b} \mathbb{R}^k \xrightarrow{F} \mathbb{R} \xrightarrow{C} \mathbb{Y}$

Здесь C — решающее правило, F — агрегирующая операция.

Для наших целей неважно как именно реализованы базовые алоритмы, они лишь должны поддерживать интерфейс

- $fit(X, Y)$ — обучиться по выборке $X = (x, y)$
- $predict(X)$ — выдать прогнозы $\hat{y} = b(X)$

Мы же сфокусируемся на построении композиции и улучшении итогового качества. А именно: выбрать агрегирующую функцию и предложть метод обучения композиции.

Общие требования к F:

- $\min b_i \leq F(b_1, \ldots, b_k) \leq \max b_i$
- $F(b_1(x), \ldots, b_k(x))$ монотонно не убывает по всем b_i

Примеры агрегирующих функций

- простое голосование

$$F(b_1, \ldots, b_k) = \frac{1}{k} \sum_{i=1}^{k} b_i(x)$$

- взвешенное голосование, $\sum_{i=1}^{k} \alpha_i = 1, \;\; \alpha_i \geq 0$

$$F(b_1, \ldots, b_k) = \sum_{i=1}^{k} \alpha_i b_i(x)$$

- смесь алгоритмов с функциями компетентности $g : \mathbb{X} \to \mathbb{R}$

$$F(b_1, \ldots, b_k) = \sum_{i=1}^{k} g_i(x) b_i(x)$$

Функионал риска

Рассмотрим задачу регрессии с квадратичной функцией потерь. Качество алгоритма a:

$$Q(a) = \mathbb{E}_x \, \mathbb{E}_{X,\varepsilon}[y(x,\varepsilon) - a(x,X)]^2$$

- X — обучающая выборка
- $y = f(x) + \varepsilon$ — целевая зависимость, наблюдаемая с точностью до шума ε
- $a(x,X)$ — ответ алгоритма в точке x, обученного по выборке X
- $\mathbb{E}_x$ — среднее по всем тестовым точкам,
- $\mathbb{E}_{X,\varepsilon}$ — среднее по всем обучающим выборкам и случайному шуму

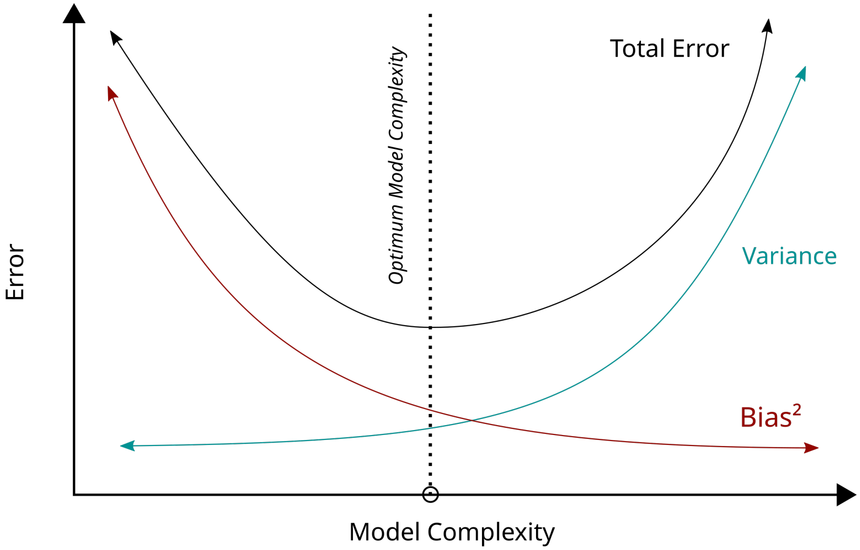
Смещение и разброс

Ошибку можно представить в виде трех слагаемых:

$$Q(a) = \mathbb{E}_x\, bias_X^2(a) + \mathbb{E}_x\, variance_X(a) + \sigma^2$$

где

- $bias_X(a) = f(x) - \mathbb{E}_x[a(x, X)]$ — смещение
- $variance(a) = \mathbb{E}_X[a(x, X) - \mathbb{E}_x[a(x, X)]]^2$ — разброс
- $\sigma^2 = \mathbb{E}_x\, \mathbb{E}_\varepsilon[y(x, \varepsilon) - f(x)]^2$ — неустранимый шум


Error
Optimum Model Complexity
Total Error
Variance
Bias²
Model Complexity

Ошибка простого голосвания

Рассмотрим композицию — простое голосование

$$a(x) = \frac{1}{k}\left(b_1(x) + \cdots + b_k(x)\right)$$

Как зависит смещние и разброс композиции от базового алгоритма b?

Смещение композиции

$$
\begin{aligned}
bias_X(a) = f(x) - \mathbb{E}_X[a(x, X)] = \\
= f(x) - \mathbb{E}_X\left[\sum_{i=1}^{k} \frac{1}{k} b(x, X^i)\right] = \\
= f(x) - \mathbb{E}_X\, b(x, X) = \\
= bias_X(b)
\end{aligned}
$$

Смещение ансамбля определяется смещением базового алгоритма.

Разброс композиции

$$
\begin{aligned}
variance_X(a) &= \mathbb{E}_X[a(x,X) - \mathbb{E}_x[a(x,X)]]^2 = \\
&= \mathbb{E}_X\left[\frac{1}{k}\sum_{i=1}^{k} b_i - \mathbb{E}_X\left[\frac{1}{k}\sum_{i=1}^{k} b_i\right]\right]^2 = \\
&= \frac{1}{k^2}\,\mathbb{E}_X\left[\sum_{i=1}^{k}(b_i - \mathbb{E}_X\, b_i)\right]^2 = \\
&= \frac{1}{k^2}\sum_{i=1}^{k} variance_X(b_i) + \frac{1}{k^2}\sum_{i\neq j} cov(b_i, b_j)
\end{aligned}
$$

Некоррелированные базовые алгоритмы

В случае если базовые алгоритмы некоррелированны, то

$$
\begin{aligned}
variace_X(a) = \frac{1}{k^2}\sum_{i=1}^{k} variance_X(b_i) = \\
= \frac{1}{k^2}\sum_{i=1}^{k} variance_X(b) = \\
= \frac{1}{k} variance_X(b)
\end{aligned}
$$

Используя некоррелированную композицию алгоритмов, можно добиться уменьшения разброса в k раз!

Как добиться некоррелированности?

На практике строгое выполнение требования некоррелированности — необязательно, достаточно, чтобы базовые алгоритмы были непохожи друг на друга.

Два способа увеличить непохожесть, строить $b_i(x)$:

- по случайной подвыборке объектов
- по псевдовыборке исходных объектов — **бутстрап**
- по случайному подмножеству признаков — **метод случайных подпространст**

Бутстреп

Пусть имеется выборка X объема ℓ.

С помощью случайного **выбора с возвращением** сформируем новую «выборку» X^1 тоже объема ℓ. Полученную подвыборку называют **псевдовыборкой**.
Проделаем эту операцию k раз и получим $\{X^1, \ldots, X^k\}$ псевдовыборок.

Такой метод получения псевдовыборок называется **бутстрепом** (bootstrap).

Применяется в статистике для проверки гипотез, построения доверительных интервалов ...

Бэггинг

Беггинг (bootstrap aggregation) — простое голосование, где при построении базовых алгоритмов используется бутстрап и метод случайных подпространств.

Можно внести модификации:

- ввести порог α и не добавлять b_i если не достигает нужного качества
- обучение b_i идет не по всей выборке $U_i \subset X^\ell$— можно оценить качество на невиданных данных $X^\ell \setminus U_i$

Общий алгоритм обучения бэггинга

Data: обучающая выборка X^ℓ,
k — длина копозиции,
α — порог качества
Result: базовые алгоритмы $b_1, \dots, b_k$
for $i = 1, \dots, k$ **do**
  $U_i :=$ случайная подвыбрка размера $\ell^{'}$
  $G_i :=$ случайное подмножество признаков размера $n^{'}$
  обучить b_i по G_i и U_i
  if $Q(b_i, U_i) < \alpha$ **then**
    добавить b_i в композицию
  end
  оценить качество $Q(b_i, X^\ell \setminus U_i)$ на отложенных данных
end

Случайный лес

Случайный лес (Random Forest) — бэггинг над решающими деревьями.

Остаются вопросы

- Какой глубины h строить деревья?
- Сколько признаков $n^{'}$ использовать для обучения?
- Сколько деревьев k использовать в композиции?

Глубина деревьев

Ошибка состоит из смещения и разброса. Разброс снижается за счет композиции, а смещение определяется смещением базового дерева. Поэтому необходимо использовать **деревья с низким смещением**.

- Неглубокие деревья имеют малое число параметров и поэтому строят только верхнеуровневые зависимости. При разных обучающих подвыборках алгоритмы не будут значительно отличатся (низкий разброс, высокое смещение).
- Глубокие деревья наоборот чересчур сильно подстраиваются под данные, поэтому имеют сильный разброс, но низкое смещение.

Используем **глубокие деревья**.

Число признаков

Большое число признаков обеспечивает слабое различие деревьев, поэтому эффект от бэггинга — слабый.
С другой стороны, используя малое число признаков, базовые деревья будут слабыми.

Практическая рекомендация:

- Для задач регрессии — $n^{'} = \lfloor n/3 \rfloor$
- Для задач классификации — $n^{'} = \lfloor \sqrt{n} \rfloor$

Размер ансамбля

С ростом числа деревьев снижается разброс, но число признаков и вариантов подвыборок — ограничены. Поэтому бесконечно уменьшать разброс не получится.

Имеет смысл построить график зависимости ошибки от числа деревьев и остановиться в тот момент, когда ошибка перестанет значимо уменьшатся

Так же ограничением может выступать время работы ансамбля. Большее число деревьев — большее время принятия решения. Однако, алгоритмы стоятся независимо друг от друга и это позволяет распаралеливать построение отдельных деревьев.

Переход к взвешенному голосованию

Пусть уже построен набор базовых алгоритмов $b_1, \dots, b_k$.
Взвешенная композиция

$$a(x) = \sum_{i=1}^{k} \alpha_i b_i(x)$$

есть ни что иное как линейная модель с новыми признаками — ответами базовых моделей.

Настройка параметров

$$Q(\alpha) = \sum_{i=1}^{\ell} \mathcal{L}(a(x_i, \alpha), y_i) \to \min_{\alpha}$$

Идея бустинга

За основу возьмем взвешенное голосование

$$a(x) = \sum_{i=1}^{k} \alpha_i b_i(x)$$

Задан функционал качества

$$Q(a) = \sum_{i=1}^{\ell} \mathcal{L}(a(x_i), y_i)$$

Основная идея — строить последовательность $b_1, \cdots, b_k$ жадным способом. На итерации t считаем вычисленными и зафиксированными $\alpha_1 b_1, \ldots, \alpha_{t-1} b_{t-1}$.

Градиентный бустинг

Рассмотрим наиболее общий алгоритм бустинга — градиентный бустинг.

Градиентный спуск для скалярной функции $Q(a) \to \min$ в пространстве ответов на обучающей выборке.
Строится последовательность точек

$$a_t = a_{t-1} - \alpha_t \frac{\partial Q}{\partial a}\Big|_{a=a_{t-1}}$$

Схоже с добавлением нового базового алгоритма на каждой итерации.

Будем строить композицию, где b_t приближает $\frac{\partial Q}{\partial a}$ в точке a_{t-1}

$$b_t(x) \approx -\frac{\partial Q}{\partial a}\Big|_{a=a_{t-1}}$$

Приближение антиградиента

Приближение антиградиента можно сформулиоровать так

$$g_{t-1,i} = \left(-\frac{\partial Q}{\partial a}\Big|_{a=a_{t-1}} \right)_i$$

— i-я компонента градиента, вычисленного в точке a_{t-1} на всех объектах выборки

$$b_t(x) = \arg\max_{b \in B} \sum_{i=1}^{\ell} \left(b(x_i) - g_{t-1,i}\right)^2$$

Тоесть b_t решает задачу регрессии, приближая антиградиент функции потерь.

Алгоритм градиентного бустинга

Data: обучающая выборка X^ℓ,
Result: базовые алгоритмы и веса $\alpha_1 b_1, \dots, \alpha_k b_k$
Построить первый алгоритм $b_1(x)$
for $t = 2, \dots, k$ **do**
  Вычислить
  $g := -\frac{\partial Q}{\partial a}|_{a=a_{t-1}}$
  Обучить алгоритм b: $x \to g$
  $b_t := \arg\min_b \sum_{j=1}^{\ell} \left(b(x_i) - g_i\right)^2$
  Подобрать α_t
  $\alpha_t := \arg\min_{\alpha>0} \sum_{j=1}^{\ell} L(a_{t-a} + \alpha b_t(x_j), y_j)$
end

Заключение

- Композиции позволяют решать сложные задачи
- Почти всегда базовые алгоритмы — решающие деревья
- Строить композиции целиком — сложно. Поэтому базовые алгоритмы строятся по одному
- Построение беггинга можно распаралелить. Бустинга — нет
- Обобщающая способность бустинга не ухудшается с ростом композиции