

Задача восстановления зависимости $y: X \rightarrow Y$ по точкам обучающей выборки (x_i, y_i) , $y_i = y(x_i)$, $i = 1, \dots, \ell$.

Определение

Линейной композицией базовых алгоритмов $a_t(x) = C(b_t(x))$, $t = 1, \dots, T$, называется суперпозиция функций

$$a(x) = C\left(\sum_{t=1}^T \alpha_t b_t(x)\right),$$

где $C: \mathbb{R} \rightarrow Y$ — решающее правило, $\alpha_t \geq 0$.

- **Пример 1:** классификация на 2 класса, $Y = \{-1, +1\}$;
 $C(b) = \text{sign}(b)$, $a(x) = \text{sign}(b(x))$,
 $b: X \rightarrow \mathbb{R}$ — дискриминантная функция.
- **Пример 2:** регрессия, $Y = \mathbb{R}$,
 $C(b) = b$, $a(x) = b(x)$, решающее правило не используется.

Линейная композиция базовых алгоритмов:

$$b(x) = \sum_{t=1}^T \alpha_t b_t(x), \quad x \in X, \quad \alpha_t \in \mathbb{R}_+.$$

Функционал качества с произвольной функцией потерь $\mathcal{L}(b, y)$:

$$Q(\alpha, b) = \sum_{i=1}^{\ell} \mathcal{L} \left(\underbrace{\sum_{t=1}^{T-1} \alpha_t b_t(x_i)}_{u_{T-1,i}} + \alpha b(x_i), y_i \right) \rightarrow \min_{\alpha, b}.$$

$\underbrace{\hspace{10em}}_{u_{T,i}}$

Ищем вектор $u = (b(x_i))_{i=1}^{\ell}$ из R^{ℓ} , минимизирующий $Q(\alpha, b)$.

$u_{T-1} = (u_{T-1,i})_{i=1}^{\ell}$ — текущее приближение вектора u

$u_T = (u_{T,i})_{i=1}^{\ell}$ — следующее приближение вектора u

Friedman G. Greedy Function Approximation: A Gradient Boosting Machine. 1999.

- Градиентный метод минимизации $Q(u) \rightarrow \min, u \in \mathbb{R}^\ell$:

u_0 := начальное приближение;

$$u_{T,i} := u_{T-1,i} - \alpha g_i, \quad i = 1, \dots, \ell;$$

$g_i = \mathcal{L}'(u_{T-1,i}, y_i)$ — компоненты вектора градиента,
 α — градиентный шаг.

- Добавление базового алгоритма b_T :

$$u_{T,i} := u_{T-1,i} + \alpha b_T(x_i), \quad i = 1, \dots, \ell$$

Будем искать такой базовый алгоритм b_T , чтобы вектор $(b_T(x_i))_{i=1}^\ell$ приближал вектор антиградиента $(-g_i)_{i=1}^\ell$:

$$b_T := \arg \max_b \sum_{i=1}^{\ell} (b(x_i) + g_i)^2$$

Алгоритм градиентного бустинга (Gradient Boosting)

Вход: обучающая выборка X^ℓ ; **параметр** T ;

Выход: базовые алгоритмы и их веса $\alpha_t b_t$, $t = 1, \dots, T$;

1: инициализация: $u_i := 0$, $i = 1, \dots, \ell$;

2: **для всех** $t = 1, \dots, T$

3: найти базовый алгоритм, приближающий градиент:

$$b_t := \arg \min_b \sum_{i=1}^{\ell} (b(x_i) + \mathcal{L}'(u_i, y_i))^2;$$

4: решить задачу одномерной минимизации:

$$\alpha_t := \arg \min_{\alpha > 0} \sum_{i=1}^{\ell} \mathcal{L}(u_i + \alpha b_t(x_i), y_i);$$

5: обновить значения композиции на объектах выборки:

$$u_i := u_i + \alpha_t b_t(x_i); \quad i = 1, \dots, \ell;$$