Виды ансамблей

Содержание

Ансамбль

Ансамбль алгоритмов (методов) — метод, который использует несколько обучающих алгоритмов с целью получения лучшей эффективности прогнозирования, чем можно было бы получить от каждого обучающего алгоритма по отдельности.

Рассмотрим задачу классификации на K классов: $Y = \{1, 2, \ldots, K\}$.
Пусть имеется M классификаторов ("экспертов"): $f_1, f_2, \ldots, f_M$.
$f_m : X \to Y, f_m \in F, m = (1 \ldots M)$.

Тогда давайте посмотрим новый классификатор на основе данных:

Простое голосование: $f(x) = \max\limits_{k=1..K} \sum\limits_{i=1}^{M} I(f_i(x) = k)$.

Взвешенное голосование: $f(x) = \max\limits_{k=1..K} \sum\limits_{i=1}^{M} \alpha_i I(f_i(x) = k), \sum\limits_i \alpha_i = 1, \alpha_i > 0$.

Где $I(x) = \begin{cases} 1 & \text{x} = \text{true} \\ 0 & \text{x} = \text{false} \end{cases}$

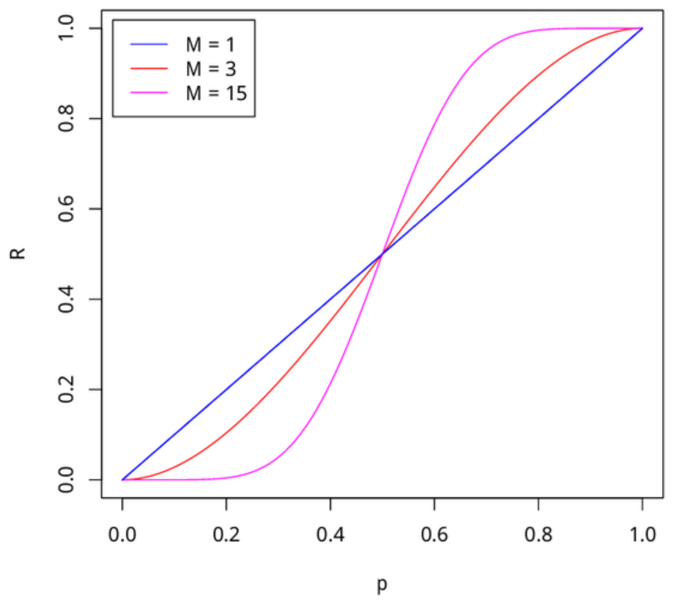
Теорема Кондорсе о присяжных

Теорема:

> Если каждый член жюри присяжных имеет независимое мнение, и если вероятность правильного решения члена жюри больше 0.5, то тогда вероятность правильного решения присяжных в целом возрастает с увеличением количества членов жюри, и стремится к единице.
> Если же вероятность быть правым у каждого из членов жюри меньше 0.5, то вероятность принятия правильного решения присяжными в целом монотонно уменьшается и стремится к нулю с увеличением количества присяжных.

Пусть M — количество присяжных, p — вероятность правильного решения одного эксперта, R — вероятность правильного решения всего жюри, m — минимальное большинство членов жюри $= \lfloor \frac{N}{2} \rfloor + 1$.

Тогда $R = \sum\limits_{i=m}^{M} C_M^i p^i (1-p)^{M-i}$



Вероятность правильного решения всего жюри (R) в зависимости от вероятности правильного решения одного эксперта (p) при разном количестве экспертов(M)

Бэггинг

Пусть имеется выборка X размера N. Количество классификаторов M.

Алгоритм использует метод бутстрэпа (англ. *bootstrap*):

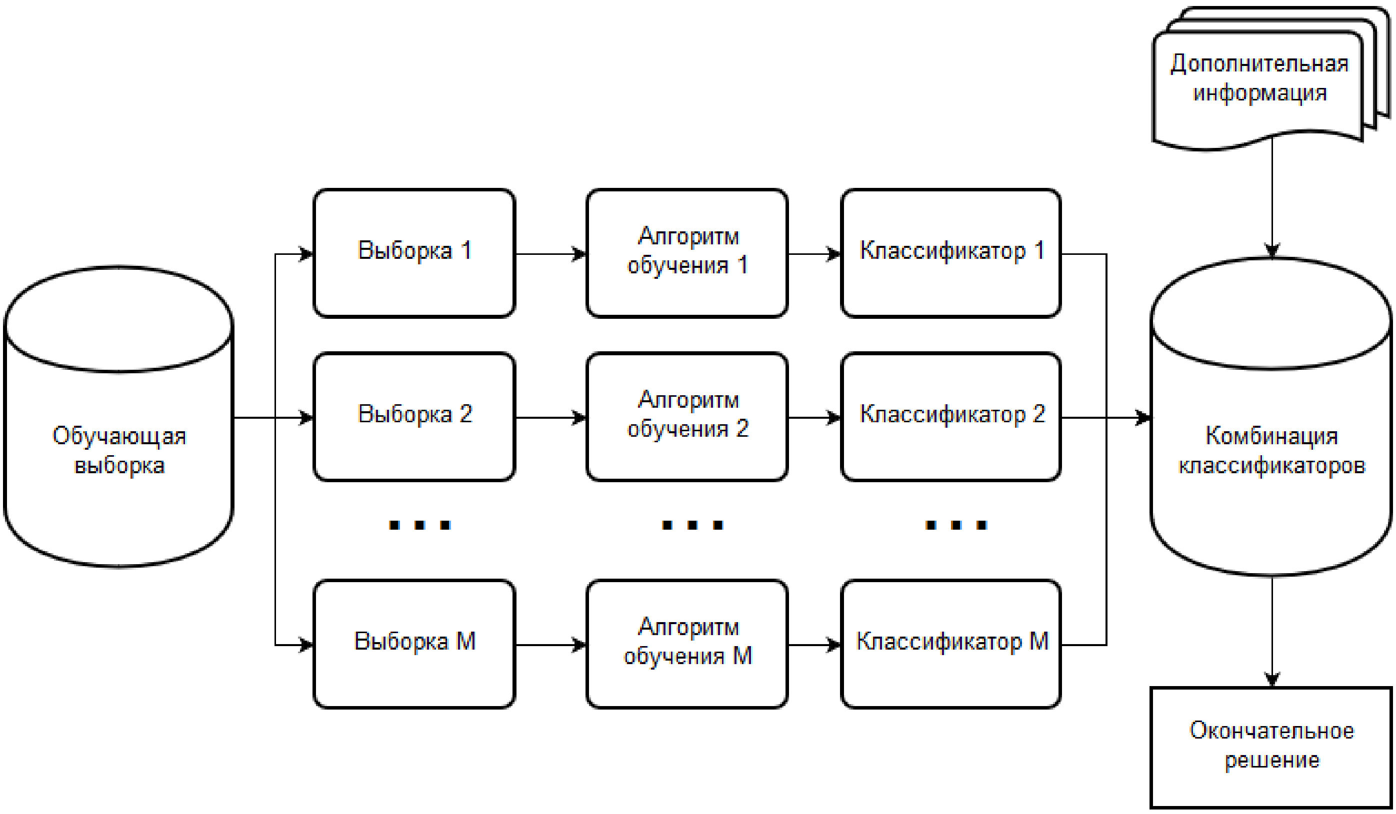
Из всего множества объектов равновероятно выберем N объектов с возвращением. Это значит, что после выбора каждого из объектов мы буде
Обозначим новую выборку через X_1. Повторяя процедуру M раз, сгенерируем M подвыборок $X_1 \dots X_M$. Теперь мы имеем достаточно боль

Шаги алгоритма бэггинг:

- Генерируется с помощью бутстрэпа M выборок размера N для каждого классификатора.
- Производится независимое обучения каждого элементарного классификатора (каждого алгоритма, определенного на своем подпространстве).
- Производится классификация основной выборки на каждом из подпространств (также независимо).
- Принимается окончательное решение о принадлежности объекта одному из классов. Это можно сделать несколькими разными способами, подробнее описано ниже.

Окончательное решение о принадлежности объекта классу может приниматься, например, одним из следующих методов:

- Консенсус: если все элементарные классификаторы присвоили объекту одну и ту же метку, то относим объект к выбранному классу.
- Простое большинство: консенсус достижим очень редко, поэтому чаще всего используют метод простого большинства. Здесь объекту присваивается метка того класса, который определило для него большинство элементарных классификаторов.
- Взвешивание классификаторов: если классификаторов четное количество, то голосов может получиться поровну, еще возможно, что для экспертов одна из групп параметров важна в большей степени, тогда прибегают к взвешиванию классификаторов. То есть при голосовании голос классификатора умножается на его вес.



Рассмотрим задачу регрессии с базовыми алгоритмами $b_1, b_2, \ldots, b_m$. Предположим, что существует истинная функция ответа для всех объектов y(x), а также задано распределение p(x) на объектах. В этом случае мы можем записать ошибку каждой функции регрессии:

$$\epsilon_i(x) = b_i(x) - y(x), y = 1, \ldots, n$$

и записать матожидание среднеквадратичной ошибки:

$$E_x(b_i(x) - y(x))^2 = E_x \epsilon_i^2(x)$$

Средняя ошибка построенных функций регрессии имеет вид:

$$E_1 = \frac{1}{n} E_x \sum_{i=1}^{n} \epsilon_i^2(x)$$

Предположим, что ошибки несмещены и некоррелированы:

$$E_x \epsilon_i(x) = 0, E_x \epsilon_i(x) \epsilon_j(x) = 0, i \neq j$$

Построим теперь новую функцию регрессии, усредняющую ответы уже построенных:

$$a(x) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} b_i(x)$$

Найдем ее среднеквадратичную ошибку:

$$E_n = E_x(\frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} (b_i(x) - y(x))^2 = E_x(\frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \epsilon_i)^2 = \frac{1}{n^2} E_x(\sum_{i=1}^{n} \epsilon_i^2(x) + \sum_{i \neq j} \epsilon_i(x) \epsilon_j(x)) = \frac{1}{n} E_1$$

Таким образом, усреднение ответов позволило уменьшить средний квадрат ошибки в n раз.

Бустинг

Бустинг (англ. boosting — улучшение) — это процедура последовательного построения композиции алгоритмов машинного обучения, когда каждый следующий алгоритм стремится компенсировать недостатки композиции всех предыдущих алгоритмов. Бустинг представляет собой жадный алгоритм построения композиции алгоритмов.

Пусть $h(x, a)$ — базовый классификатор, где a — вектор параметров.

Задача состоит в том, чтоб найти такой алгоритм $H_T(x) = \sum_{t=1}^{T} b_t h(x, a)$, где $b_t \in \mathbb{R}$ — коэффиценты, такие, чтобы минимизировать эмпирический риск $Q = \sum_i L(H_T(x_i), y_i) \to min$, где $L(H_T(x_i), y_i)$ — функция потерь.

Очевидно, что сложно найти сразу $\{(a_t, b_t)\}_{t=1}^{T}$. Основная идея в том, чтоб найти решение пошагово $H_t(x) = H_{t—1}(x) + b_t h(x, a_t)$. Таким образом мы сможем постепенно оценивать изменение эмпирического риска $Q^{(t)} = \sum_{i=1}^{l} L(H_t(x_i), y_i)$.

Алгоритмы бустинга:

- AdaBoost — адаптивный алгоритм бустинга, усиливающий классификаторы, объединяя их в «комитет». Чувствителен к шуму.
- BrownBoost — алгоритм бустинга, эффективный на зашумленных наборах данных
- GradientBoost — алгоритм бустинга, использующий идеи линейной регресии
- LogitBoost — алгоритм бустинга, использующий идеи логистической регресси

Реализации и применения бустинга

Реализации бустинга:

- XGBoost — одна из самых популярных и эффективных реализаций алгоритма градиентного бустинга на деревьях на 2019-й год.
- CatBoost — открытая программная библиотека, разработанная компанией Яндекс.
- LightGBM — библиотека для метода машинного обучения, основанная на градиентном бустинге (англ. gradient boosting).

Применение бустинга:

- поисковые системы
- ранжирования ленты рекомендаций
- прогноз погоды
- оптимизации расхода сырья
- предсказания дефектов при производстве.
- исследованиях на Большом адронном коллайдере (БАК) для объединения информации с различных частей детектора LHCb в максимально точное, агрегированное знание о частице.

Различия между алгоритмами

- Оба алгоритма используют N базовых классификаторов
  - Бустинг использует последовательное обучение
  - Бэггинг использует параллельное обучение
- Оба генерируют несколько наборов данных для обучения путем случайной выборки
  - Бустинг определяет вес данных, чтоб утяжелить тяжелые случаи
  - Бэггинг имеет невзвешенные данные
- Оба принимают окончательное решение, усредняя N классификаторов
  - В бустинге определяются веса для них
  - В бэггинге они равнозначны
- Оба уменьшают дисперсию и обеспечивают более высокую стабильность
  - Бэггинг может решить проблему переобучения

- Бустинг пытается уменьшить смещение, но может увеличить проблему переобучения

Примеры кода

Инициализация

```
from pydataset import data

#Считаем данные The Boston Housing Dataset[1]
df = data('Housing')
```

```
#Проверим данные
df.head().values
array([[42000.0, 5850, 3, 1, 2, 'yes', 'no', 'yes', 'no', 'no', 1, 'no'],
       [38500.0, 4000, 2, 1, 1, 'yes', 'no', 'no', 'no', 'no', 0, 'no'],
       [49500.0, 3060, 3, 1, 1, 'yes', 'no', 'no', 'no', 'no', 0, 'no'], ...
```

```
# Создадим словарь для слов 'no', 'yes'
d = dict(zip(['no', 'yes'], range(0,2)))
for i in zip(df.dtypes.index, df.dtypes):
    if str(i[1]) == 'object':
        df[i[0]] = df[i[0]].map(d)
df[‘price’] = pd.qcut(df[‘price’], 3, labels=[‘0’, ‘1’, ‘2’]).cat.codes

# Разделим множество на два
y = df['price']
X = df.drop('price', 1)
```

Бэггинг

```
# Импорты классификаторов
from sklearn.model_selection import cross_val_score
from sklearn.ensemble import BaggingClassifier, ExtraTreesClassifier, RandomForestClassifier
from sklearn.neighbors import KNeighborsClassifier
from sklearn.linear_model import RidgeClassifier
from sklearn.svm import SVC

seed = 1075
np.random.seed(seed)
# Инициализуруем классификаторы
rf = RandomForestClassifier()
et = ExtraTreesClassifier()
knn = KNeighborsClassifier()
svc = SVC()
rg = RidgeClassifier()
clf_array = [rf, et, knn, svc, rg]

for clf in clf_array:
    vanilla_scores = cross_val_score(clf, X, y, cv=10, n_jobs=-1)
    bagging_clf = BaggingClassifier(clf, max_samples=0.4, max_features=10, random_state=seed)
    bagging_scores = cross_val_score(bagging_clf, X, y, cv=10, n_jobs=-1)
    print "Mean of: {1:.3f}, std: (+/-) {2:.3f [{0}]"
                       .format(clf.__class__.__name__,
                       vanilla_scores.mean(), vanilla_scores.std())
    print "Mean of: {1:.3f}, std: (+/-) {2:.3f} [Bagging {0}]\n"
                       .format(clf.__class__.__name__,
                        bagging_scores.mean(), bagging_scores.std())
```

```
#Результат
Mean of: 0.632, std: (+/-) 0.081 [RandomForestClassifier]
Mean of: 0.639, std: (+/-) 0.069 [Bagging RandomForestClassifier]

Mean of: 0.636, std: (+/-) 0.080 [ExtraTreesClassifier]
Mean of: 0.654, std: (+/-) 0.073 [Bagging ExtraTreesClassifier]

Mean of: 0.500, std: (+/-) 0.086 [KNeighborsClassifier]
Mean of: 0.535, std: (+/-) 0.111 [Bagging KNeighborsClassifier]

Mean of: 0.465, std: (+/-) 0.085 [SVC]
Mean of: 0.535, std: (+/-) 0.083 [Bagging SVC]

Mean of: 0.639, std: (+/-) 0.050 [RidgeClassifier]
Mean of: 0.597, std: (+/-) 0.045 [Bagging RidgeClassifier]
```

Бустинг

```
ada_boost = AdaBoostClassifier()
grad_boost = GradientBoostingClassifier()
xgb_boost = XGBClassifier()
boost_array = [ada_boost, grad_boost, xgb_boost]
eclf = EnsembleVoteClassifier(clfs=[ada_boost, grad_boost, xgb_boost], voting='hard')

labels = ['Ada Boost', 'Grad Boost', 'XG Boost', 'Ensemble']
for clf, label in zip([ada_boost, grad_boost, xgb_boost, eclf], labels):
    scores = cross_val_score(clf, X, y, cv=10, scoring='accuracy')
    print("Mean: {0:.3f}, std: (+/-) {1:.3f} [{2}]".format(scores.mean(), scores.std(), label))
```

```
# Результат
Mean: 0.641, std: (+/-) 0.082 [Ada Boost]
Mean: 0.654, std: (+/-) 0.113 [Grad Boost]
Mean: 0.663, std: (+/-) 0.101 [XG Boost]
Mean: 0.667, std: (+/-) 0.105 [Ensemble]
```

См. также

- Бустинг, AdaBoost
- XGBoost
- CatBoost

Примечания

1. The Boston Housing Dataset (http://www.cs.toronto.edu/~delve/data/boston/bostonDetail.html)

Источники информации

- https://github.com/Microsoft/LightGBM
- https://github.com/dmlc/xgboost
- https://ru.wikipedia.org/wiki/CatBoost
- https://quantdare.com/what-is-the-difference-between-bagging-and-boosting/
- https://medium.com/@rrfd/boosting-bagging-and-stacking-ensemble-methods-with-sklearn-and-mlens-a455c0c982de