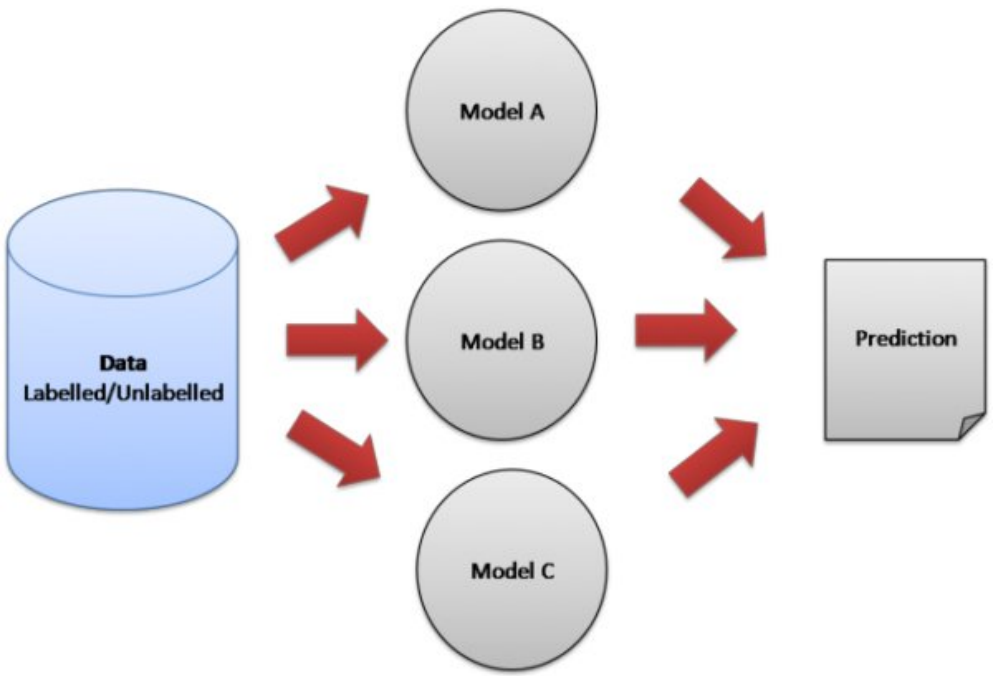
Композиции алгоритмов

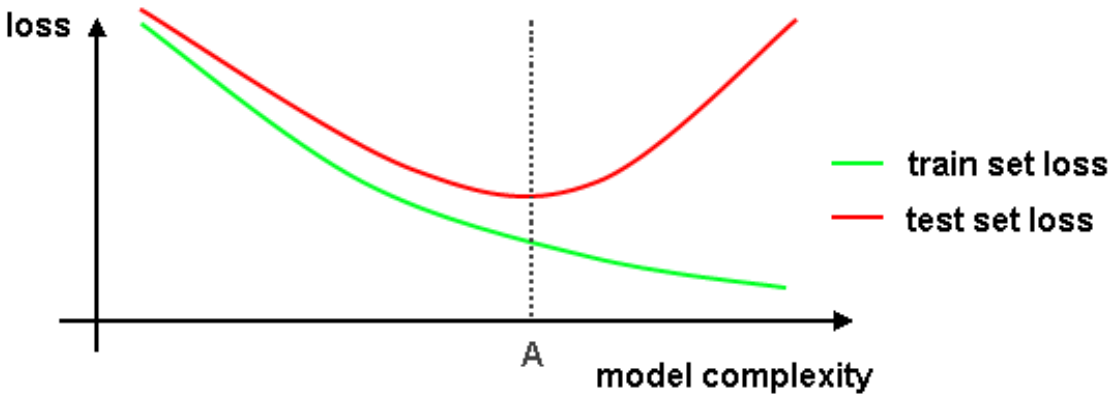
Виктор Китов

v.v.kitov@yandex.ru



Содержание

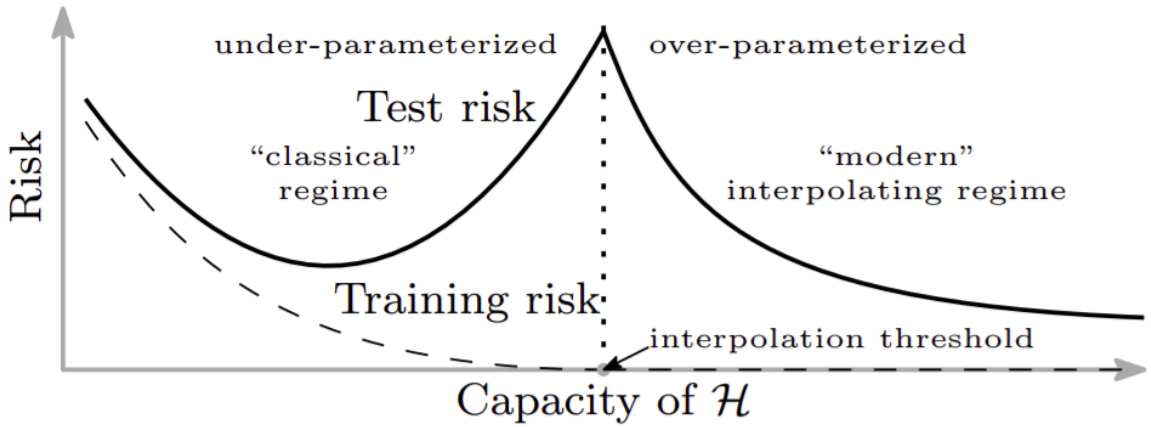
Средние потери в зависимости от сложности модели



Комментарии:

- ожидаемые потери на тестовой выборке выше потерь на обучающей.
- слева от A: модель слишком простая, недообучение.
- справа от A: модель слишком сложная, переобучение

Дальнейшее усложнение модели



- Некоторые эмпирические наблюдения свидетельствуют, что для слишком сложных моделей (многослойные нейросети) качество выше ожиданий.
- Феномен double descent risk curve[1].

[1] Belkin, M., Hsu, D., Ma, S., & Mandal, S. (2019). Reconciling modern machine-learning practice and the classical bias–variance trade-off.

Разложение на смещение и разброс

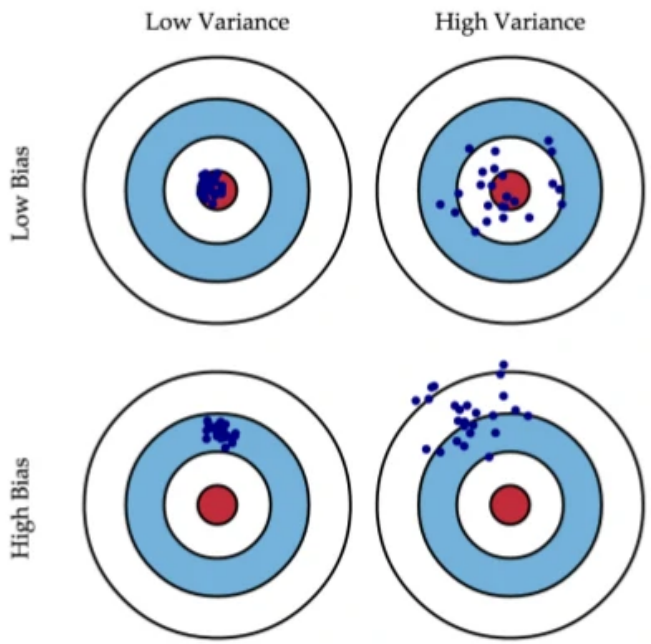
- Распределение реальных данных $y = f(x) + \varepsilon$
  - шум не зависит от x и старых наблюдений
  - хотим оценить $f(x)$
- Зависимость оценивается по $(X, Y) = \{(x_n, y_n),\ n = 1, 2...N\}$.
- Восстановленная зависимость $\widehat{f}(x)$.
- x - фикс. объект для прогноза.
- Шум ε не зависит от X, Y, $\mathbb{E}\varepsilon = 0$

Разложение на смещение и разброс (bias-variance decomposition)

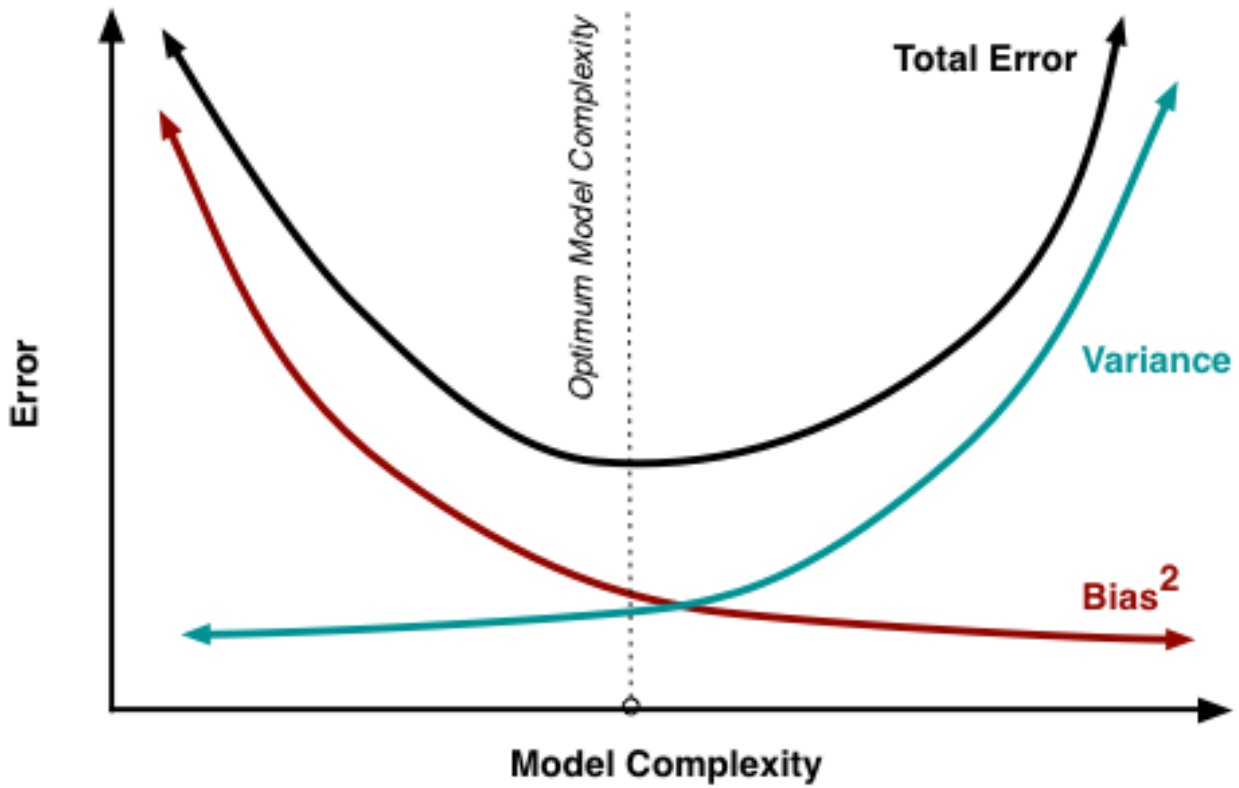
$$\mathbb{E}_{X,Y,\varepsilon}\{[\widehat{f}(x) - y(x)]^2\} = \left(\mathbb{E}_{X,Y}\{\widehat{f}(x)\} - f(x)\right)^2 + \mathbb{E}_{X,Y}\left\{[\widehat{f}(x) - \mathbb{E}_{X,Y}\widehat{f}(x)]^2\right\} + \mathbb{E}\varepsilon^2$$

Интуиция разложения

$$\mathbb{E}_{X,Y,\varepsilon}\{[\widehat{f}(x) - y(x)]^2\} = \left(\mathbb{E}_{X,Y}\{\widehat{f}(x)\} - f(x)\right)^2 + \mathbb{E}_{X,Y}\left\{[\widehat{f}(x) - \mathbb{E}_{X,Y}\widehat{f}(x)]^2\right\} + \mathbb{E}\varepsilon^2$$



Средние потери в зависимости от сложности модели



Доказательство разложения

Обозначим для краткости $f = f(x)$, $\widehat{f} = \widehat{f}(x)$, $\mathbb{E} = \mathbb{E}_{X,Y,\varepsilon}$.

Доказательство разложения

Обозначим для краткости $f = f(x)$, $\widehat{f} = \widehat{f}(x)$, $\mathbb{E} = \mathbb{E}_{X,Y,\varepsilon}$.

$$\begin{aligned}\mathbb{E}\left(\widehat{f}-f\right)^2 &= \mathbb{E}\left(\widehat{f}-\mathbb{E}\widehat{f}+\mathbb{E}\widehat{f}-f\right)^2 = \mathbb{E}\left(\widehat{f}-\mathbb{E}\widehat{f}\right)^2 + \left(\mathbb{E}\widehat{f}-f\right)^2 \\ &+ 2\mathbb{E}\left[(\widehat{f}-\mathbb{E}\widehat{f})(\mathbb{E}\widehat{f}-f)\right] \\ &= \mathbb{E}\left(\widehat{f}-\mathbb{E}\widehat{f}\right)^2 + \left(\mathbb{E}\widehat{f}-f\right)^2\end{aligned}$$

т.к. $(\mathbb{E}\widehat{f}-f)$ - константа относительно X, Y,
$\mathbb{E}\left[(\widehat{f}-\mathbb{E}\widehat{f})(\mathbb{E}\widehat{f}-f)\right] = (\mathbb{E}\widehat{f}-f)\mathbb{E}(\widehat{f}-\mathbb{E}\widehat{f}) = 0.$

$$\begin{aligned}\mathbb{E}\left(\widehat{f}-y\right)^2 &= \mathbb{E}\left(\widehat{f}-f-\varepsilon\right)^2 = \mathbb{E}\left(\widehat{f}-f\right)^2 + \mathbb{E}\varepsilon^2 - 2\mathbb{E}\left[(\widehat{f}-f)\varepsilon\right] \\ &= \mathbb{E}\left(\widehat{f}-\mathbb{E}\widehat{f}\right)^2 + \left(\mathbb{E}\widehat{f}-f\right)^2 + \mathbb{E}\varepsilon^2\end{aligned}$$

$\mathbb{E}\left[(\widehat{f}-f)\varepsilon\right] = \mathbb{E}\left[(\widehat{f}-f)\right]\mathbb{E}\varepsilon = 0$, поскольку ε не зависит от X, Y.

Содержание

Композиции алгоритмов

- Композиция алгоритмов (ансамбль моделей, ensemble learning):

$$\widehat{y}(x) = G(f_1(x), ...f_M(x))$$

  - $f_1(x), ...f_M(x)$ - базовые модели=признаки для $G(\cdot)$
  - $G(\cdot)$ - агрегирующая модель, мета-модель
- Используется в
  - обучении с учителем (регрессия, классификация)
  - без учителя (кластеризация)

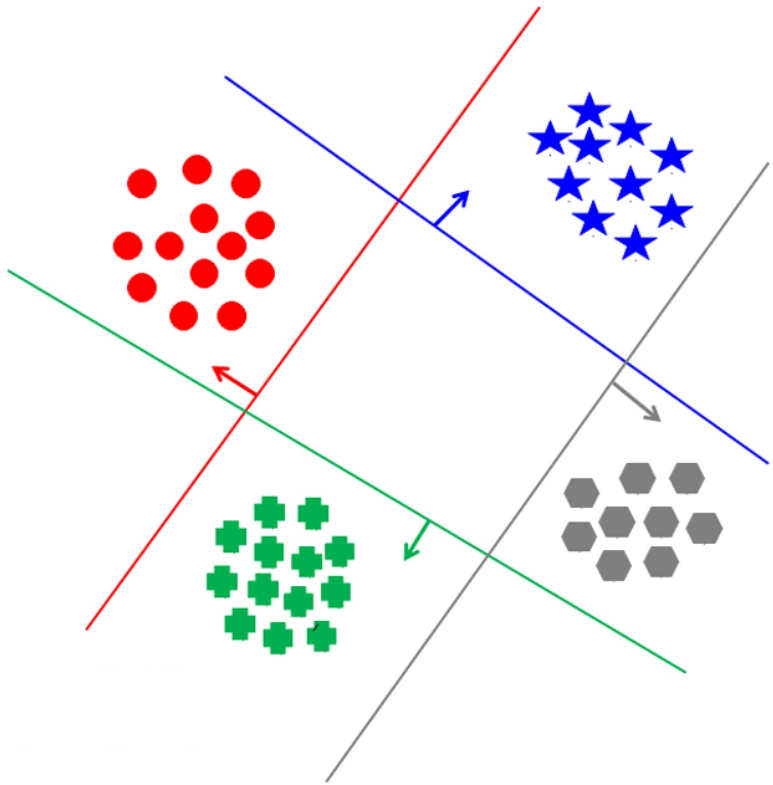
Мотивация композиций

Мотивация:

- борьба с переобучением $f_1(x), ...f_M(x)$: простая $G(\cdot)$
- борьба с недообучением $f_1(x), ...f_M(x)$: сложная $G(\cdot)$
- каждая $f_1(x), ...f_M(x)$ отвечает за свою область признакового пространства (mixture of experts)
  - $G(\cdot)$ назначает одного из экспертов
- построение $\widehat{y}(x)$ декомпозируется на решение подзадач $f_1(x), ...f_M(x)$
- ускорение обучения
  - например, усреднение ядерных SVM на подвыборках

Многоклассовая классификация

Многоклассовая классификация бинарными классификаторами (один против всех, один против одного, коды, исправляющие ошибки):



Последовательное решение, признаки разной природы

Последовательное решение

- Разделим классы: 1,2,"3+4"
  - если "3+4", применим модель, разделяющую 3 от 4.
- Прогнозирование стоимости квартир:
  - определяем тип покупки: для жилья/для инвестиций
  - для жилья: комфорт, индивидуальные вкусы и т.д.
  - для инвестиций: обменные курсы, процент по вкладам, рост рынка акций и т.д.
- Определение людей по фото:
  - определяем ракурс: фас/профиль
  - одна модель определяет людей по фото в фас
  - другая определяет людей по фото в профиль

Признаки разной природы

- Идентификация человека по разнородной информации: по голосу, по лицу, по поведению, и т.д.

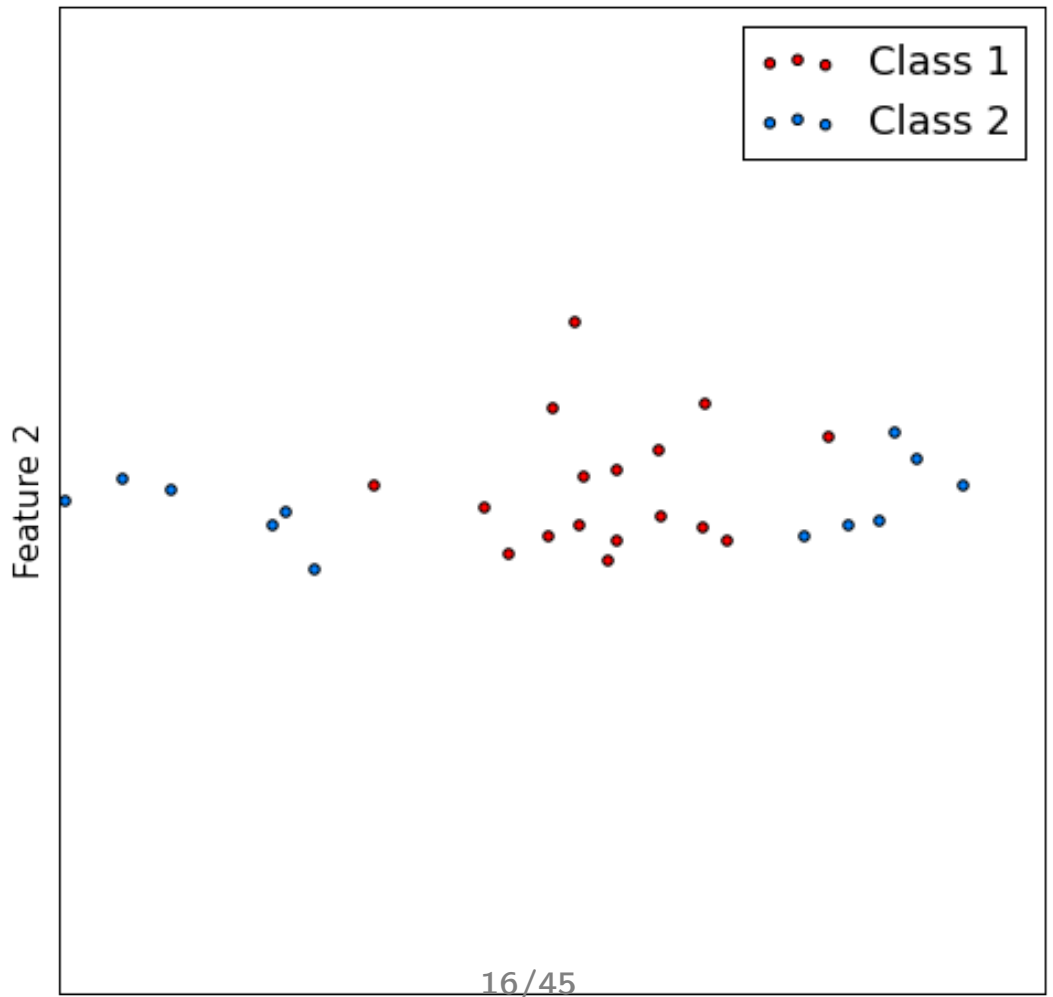
Борьба с переобучением

- Предположим $f_1(x), ...f_M(x)$ - слишком простые модели.
- Можем повысить сложность, применяя сложную мета-модель:

$$\widehat{y}(x) = G(f_1(x), ...f_M(x))$$

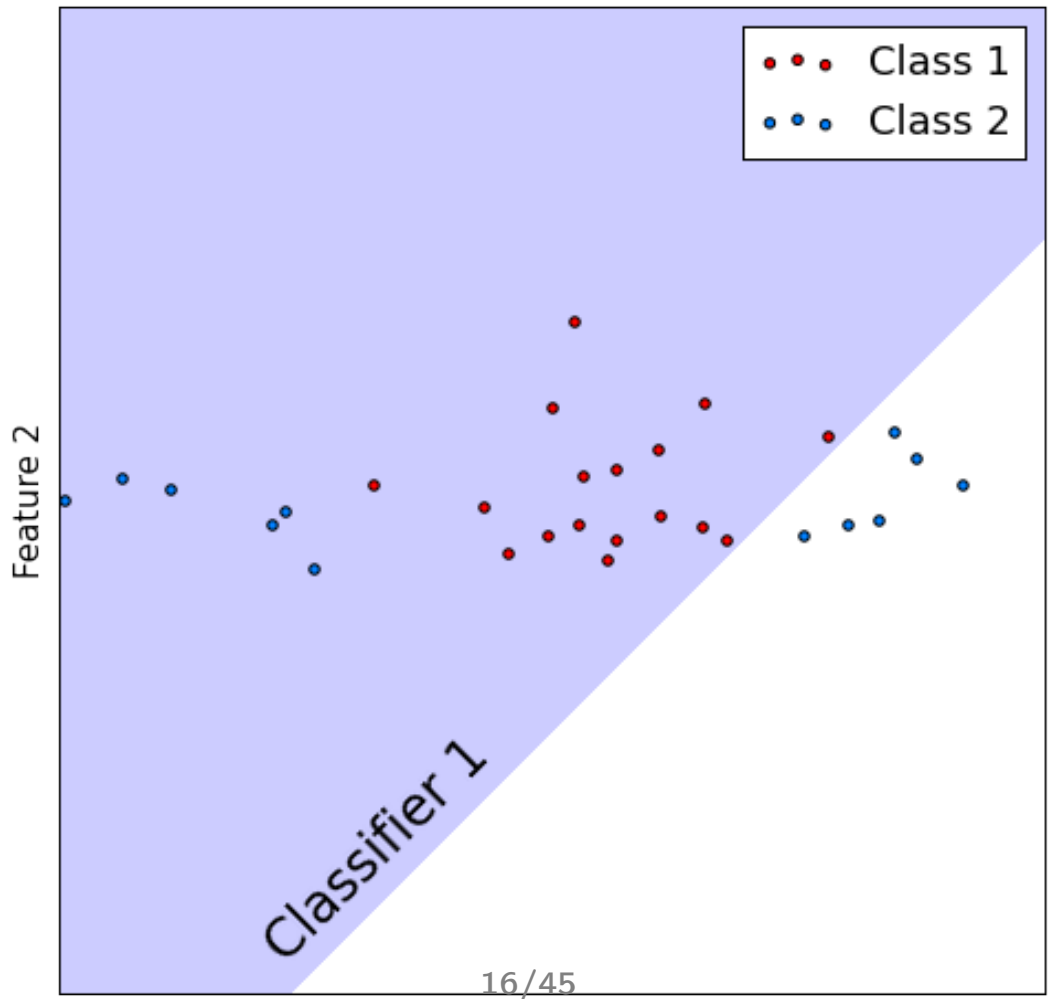
Пример

Выборка



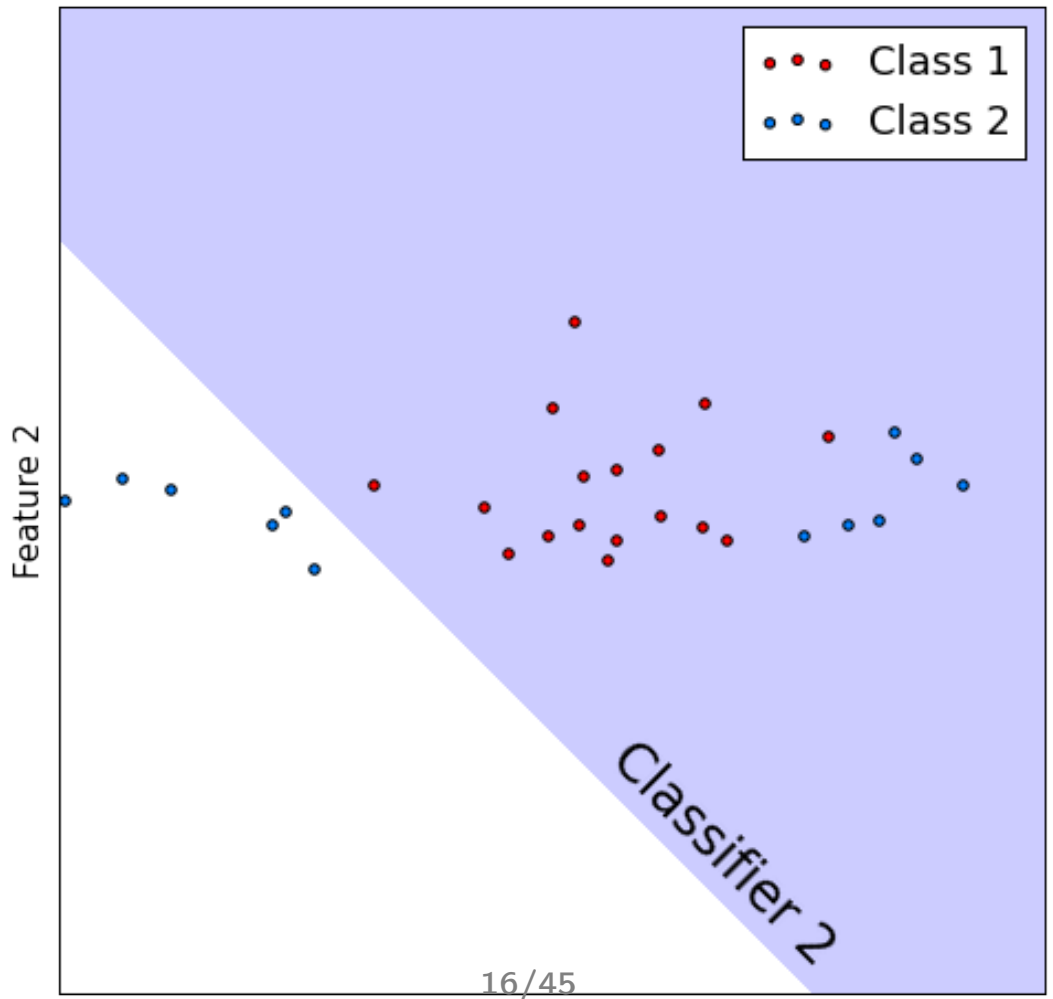
Пример

Классификатор 1



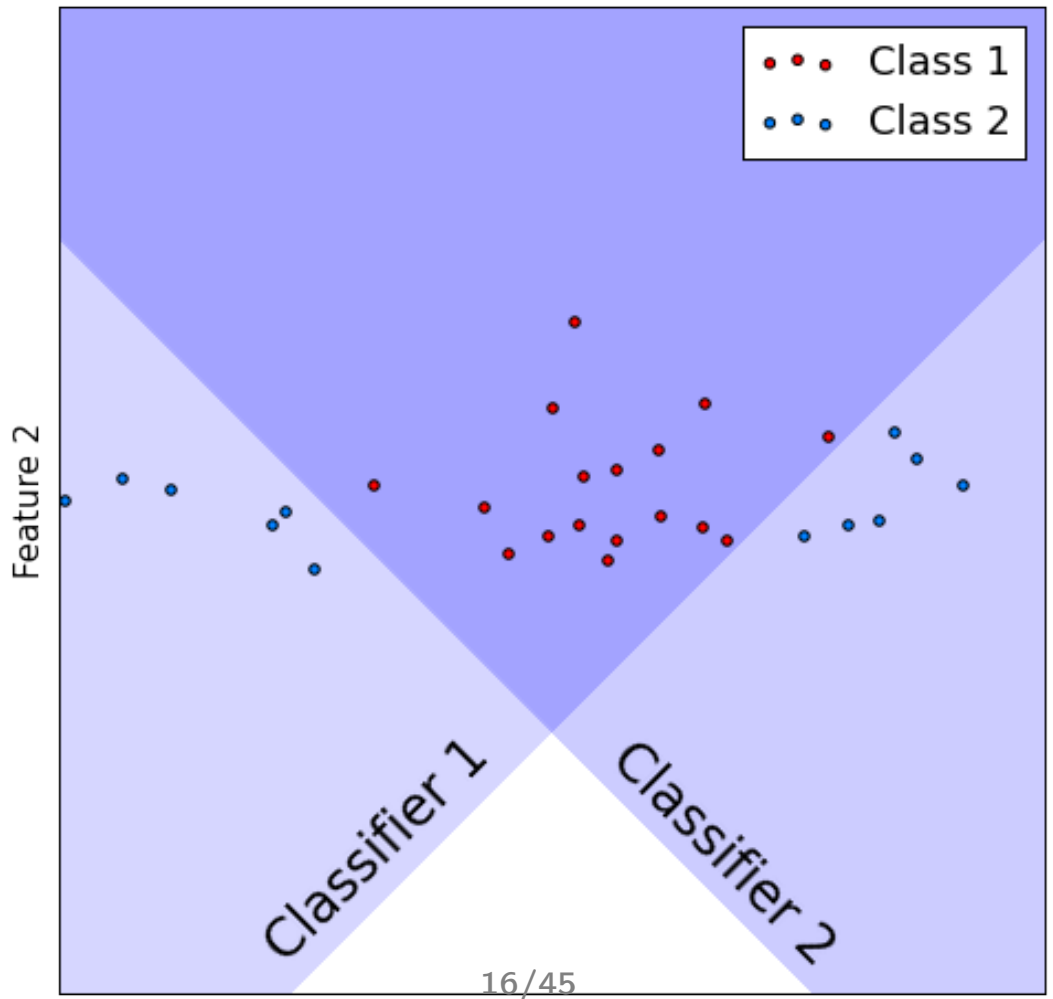
Пример

Классификатор 2



Пример

(Классификатор 1) AND (классификатор 2)



Борьба с переобучением

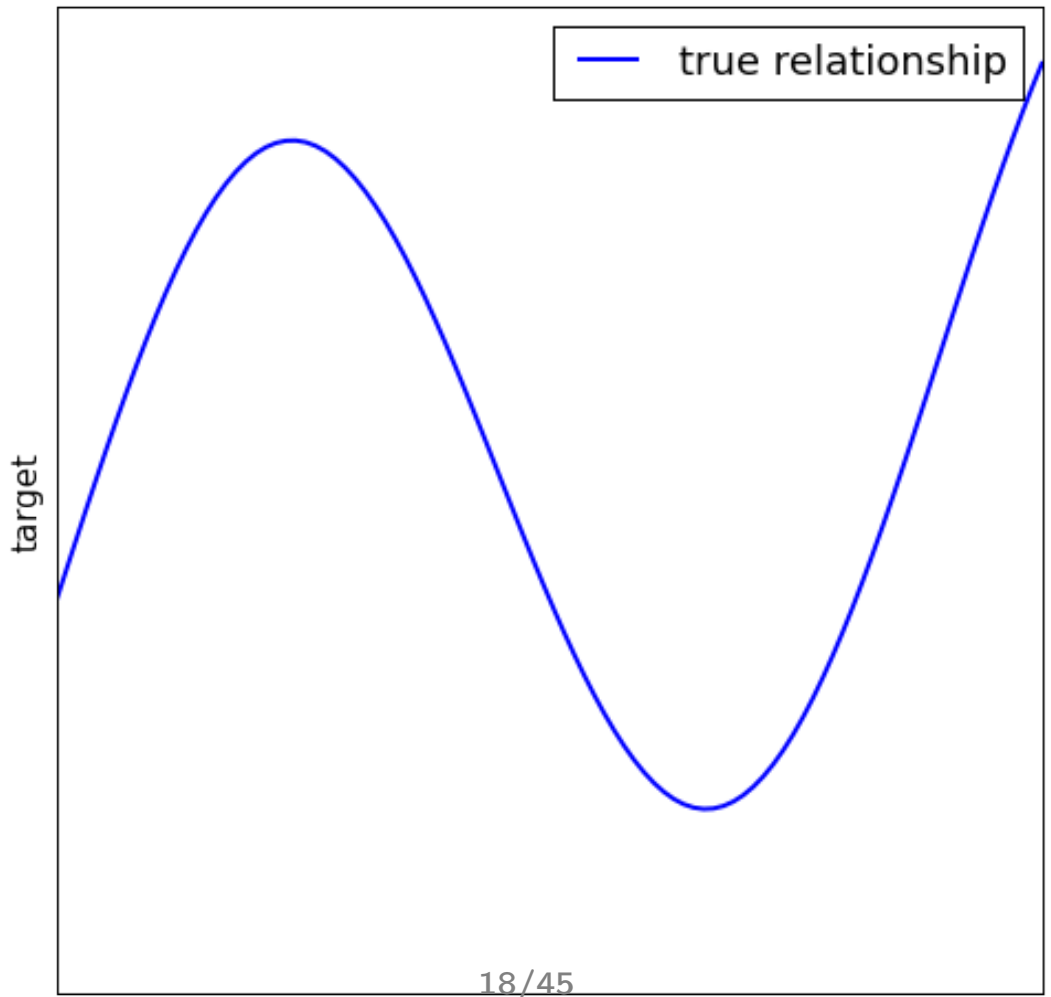
- $f_1(x), ...f_M(x)$ слишком сложные (переобученные модели)
  - решающие деревья большой глубины на разных подвыборках
  - глубокие нейросети
    - обученные из разных начальных приближений
    - разной архитектуры
- Регрессия: сделаем устойчивый прогноз за счет усреднения

$$\widehat{y}(x) = \frac{1}{M}\sum_{m=1}^{M} f_m(x)$$

- Классификация: прогноз=самый частый класс из $\{f_1(x), ...f_M(x)\}$.

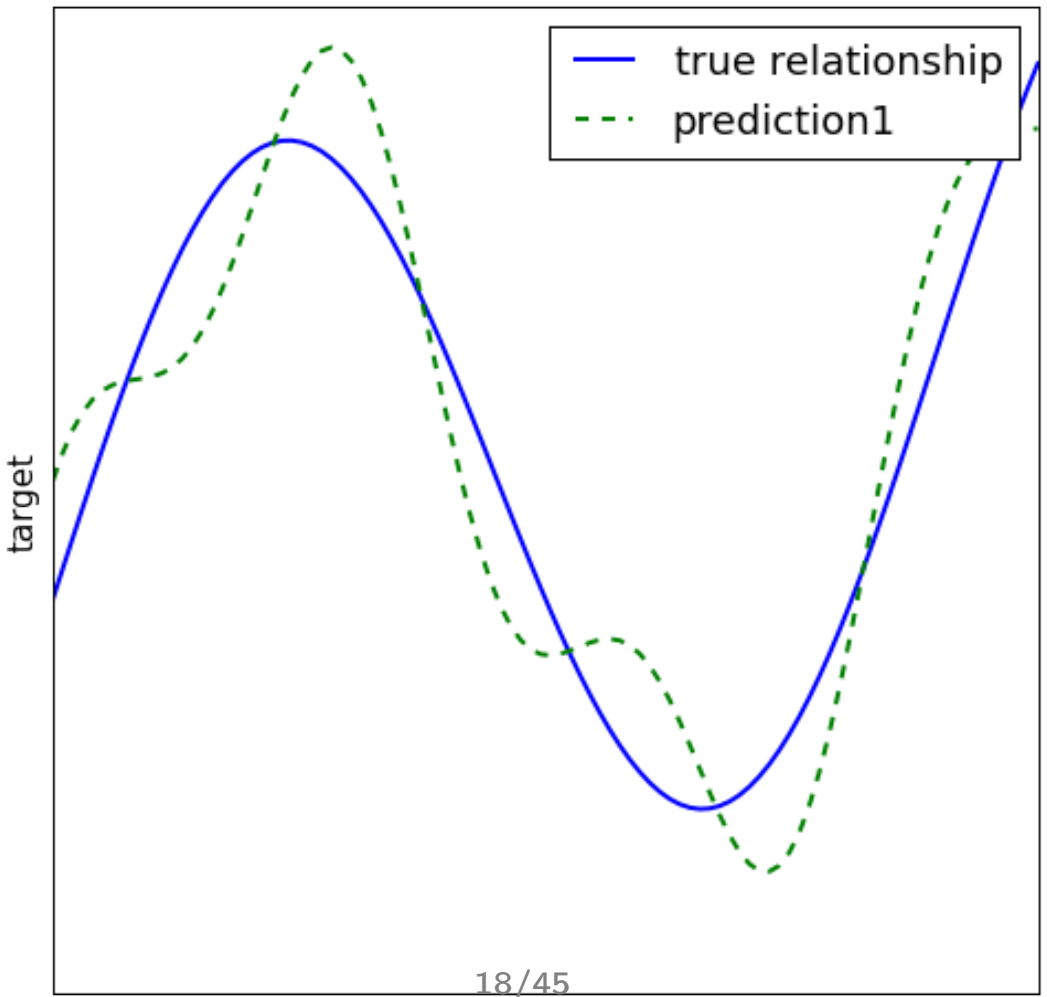
Регрессия: переобучение

Целевая зависимость



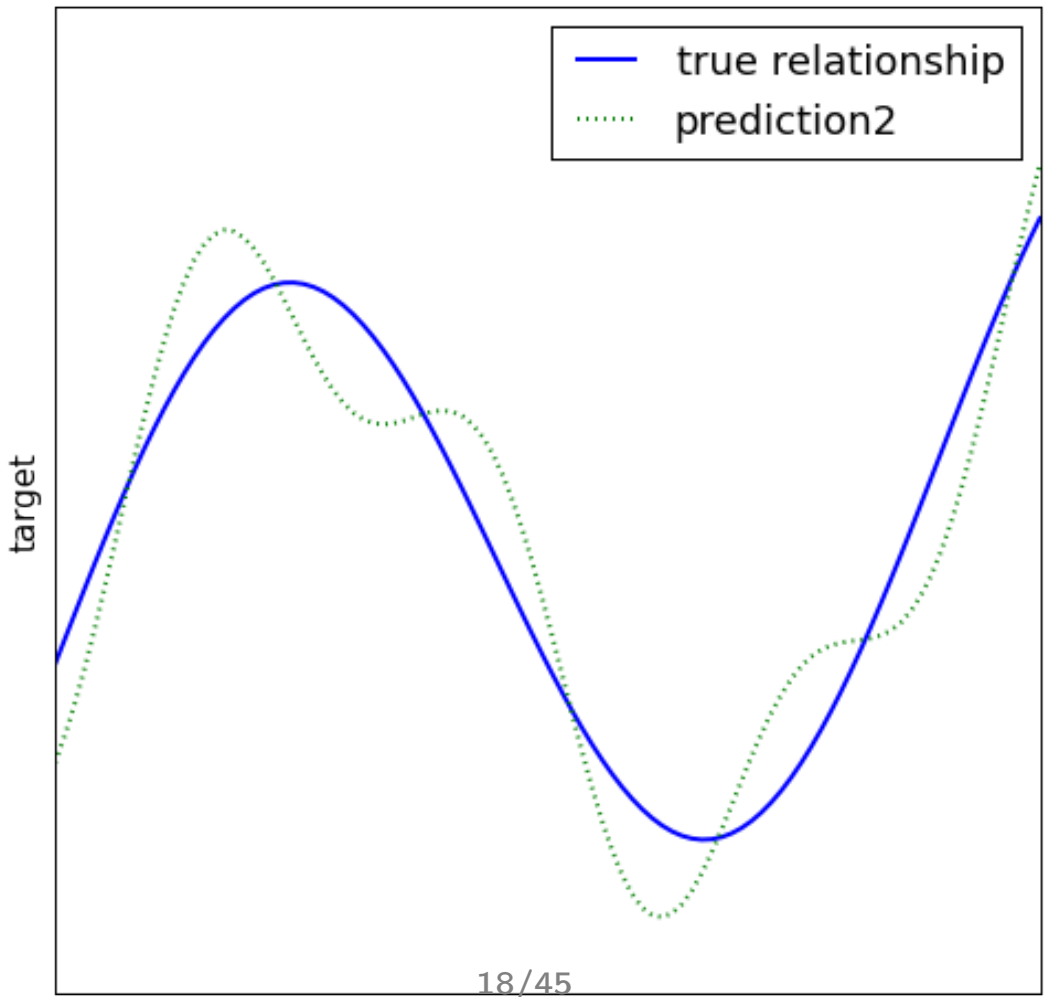
Регрессия: переобучение

Модель 1.



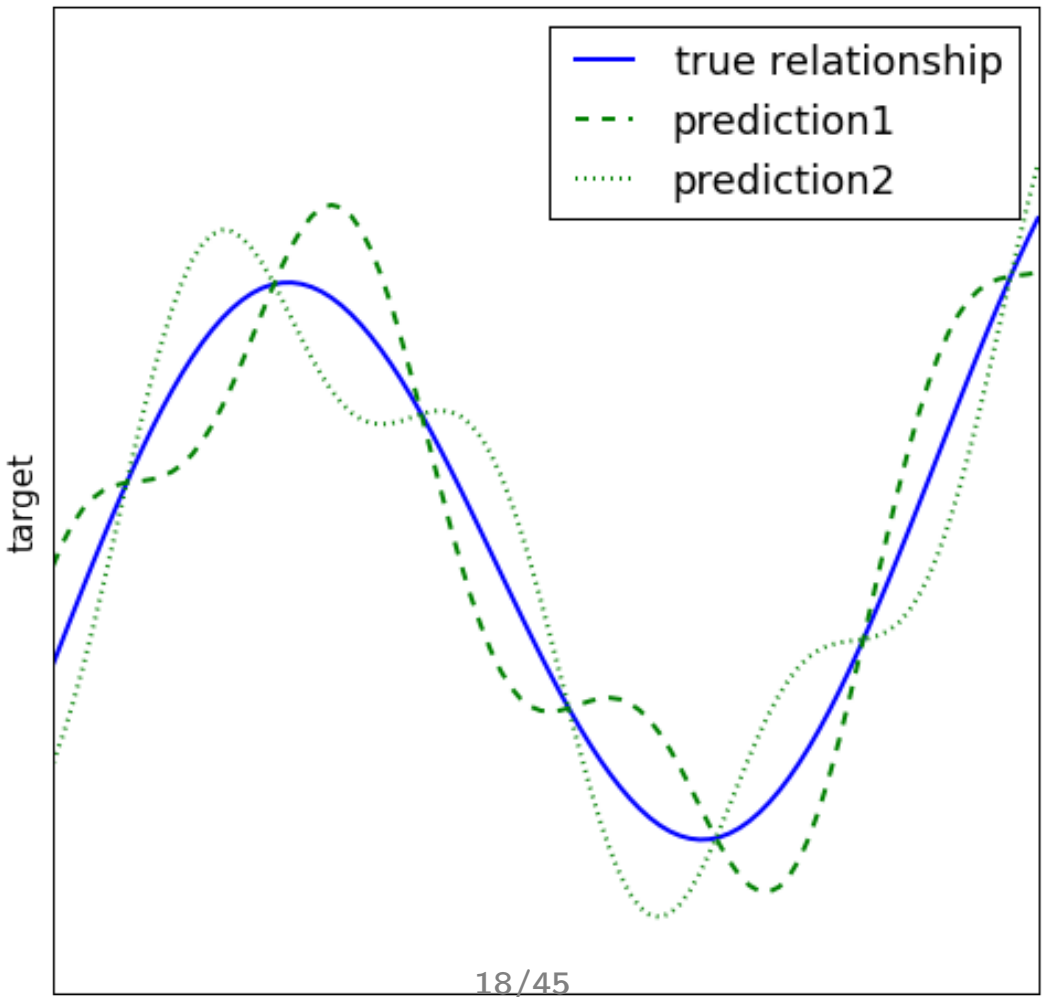
Регрессия: переобучение

Модель 2.



Регрессия: переобучение

Среднее модели 1 и 2 дает более точный прогноз.



Голосование большинства (против переобучения)

- Рассмотрим M бинарных классификаторов $f_1(x), ...f_M(x)$.
- Пусть $p(f_m(x) \neq y) = p < 0.5 \, \forall m$
- Пусть модели ошибаются независимо друг от друга.
- Пусть $G(x)$ - выбор самого частого класса.
- Тогда $p(G(x) \neq y) \to 0$ при $M \to \infty$[2]

[2] Докажите это утверждение.

Взвешенное усреднение (против переобучения)

- **Разложение неоднозначности** (ambiguity decomposition): пусть (x, y) прогнозируется с помощью регрессии $G(x) = \sum_{m=1}^{M} w_m f_m(x)$, $w_m \geq 0$, $\sum_m w_m = 1$. Тогда

$$\underbrace{(G(x) - y)^2}_{\text{ensemble error}} = \underbrace{\sum_m w_m (f_m(x) - y)^2}_{\text{base learner error}} - \underbrace{\sum_m w_m (f_m(x) - G(x))^2}_{\text{ambiguity}}$$

- Композиция дает точные прогнозы когда:
  - $f_m(x)$ достаточно точны
  - индивидуальные прогнозы $\{f_m(x)\}_m$ сильно различаются
    - поэтому полезно усреднять по разным моделям

Доказательство разложения неоднозначности

Доказательство:

$$\sum_m w_m \left(f_m(x) - G(x)\right)^2 = \sum_m w_m \left(f_m(x) - y + y - G(x)\right)^2$$

$$= \sum_m w_m \left(f_m(x) - y\right)^2 + \sum_m w_m \left(y - G(x)\right)^2 + 2\sum_m w_m \left(f_m(x) - y\right)\left(y - G(x)\right)$$

$$= \sum_m w_m \left(f_m(x) - y\right)^2 + \left(G(x) - y\right)^2 + 2\left(y - G(x)\right)\sum_m w_m \left(f_m(x) - y\right)$$

$$= \sum_m w_m \left(f_m(x) - y\right)^2 + \left(G(x) - y\right)^2 + 2\left(y - G(x)\right)\left(G(x) - y\right)$$

$$= \sum_m w_m \left(f_m(x) - y\right)^2 + \left(G(x) - y\right)^2 - 2\left(G(x) - y\right)^2$$

$$= \sum_m w_m \left(f_m(x) - y\right)^2 - \left(G(x) - y\right)^2$$

Выпуклые потери

Выпуклые потери поощряют использование взвешенных прогнозов вместо индивидуальных.

- Рассмотрим регрессию с выпуклой ф-цией потерь $\mathcal{L}(\widehat{y}-y)$.
- Учитываем $f_1(x),...f_M(x)$ с весами $w_1,...w_M$.
- Для фикс. x рассмотрим 2 стратегии прогнозирования:

1. сэмплировать $m \sim Categorical(w_1,...w_M)$, $\widehat{y}(x)=f_m(x)$.
2. усреднять $\widehat{y}(x)=\sum_{m=1}^{M} w_m f_m(x)$

Какая стратегия в среднем по m будет давать меньшие ожидаемые потери?

Содержание

Регрессия

$$\widehat{y}(x) = \frac{1}{M}\sum_{m=1}^{M} f_m(x)$$

$$\widehat{y}(x) = \frac{1}{\sum_{m=1}^{M} w_m}\sum_{m=1}^{M} w_m f_m(x)$$

- Взвешенное усреднение лучше, если модели сильно отличаются по точности.
- Веса $w_1 \geq 0, ...w_M \geq 0$ нужно настраивать на отдельной выборке (не той, на которой обучали $f_1(x), ...f_M(x)$)
- Альтернатива: медиана/взвешенная медиана

Классификаторы выдают **вероятности**

- Пусть $p_y^m(x)$ - вероятность класса y по мнению классификатора m.
- Равномерная агрегация:

$$p_y(x) = \frac{1}{M}\sum_{m=1}^{M} p_y^m(x)$$

- Взвешенная агрегация:

$$p_y(x) = \frac{1}{\sum_{m=1}^{M} w_m}\sum_{m=1}^{M} w_m p_y^m(x)$$

- Взвешенное усреднение лучше, если модели сильно отличаются по точности.
- Веса $w_1 \geq 0, ...w_M \geq 0$ нужно настраивать на отдельной выборке (не той, на которой обучали $f_1(x), ...f_M(x)$)

Классификаторы выдают **метки классов**

- Голосование по большинству (majority vote)
  - возможен взвешенный учет классификаторов
- Бинарная классификация: $\widehat{y} = +1$ <=>
  - $\geq k$ классификаторов выдают +1 (k-out-of-N)
    - возможен взвешенный учет классификаторов
  - все классификаторы выдают +1 (AND, N-out-of-N)
  - хотя бы один выдает +1 (OR, 1-out-of-N)

Классификаторы выдают **рейтинги**

- Пусть $g_y^m(x)$ - рейтинг класса y в модели m.
- Проблема: рейтинги несравнимы для разных моделей.
- Решение (Brier scores):
  1. Стандартизованный рейтинг - #классов ниже по рейтингу:

$$s_y^m(x) = \sum_{i \neq y} \mathbb{I}[g_y^m(x) > g_i^m(x)]$$

$$s_y^m(x) \in \{1, 2, \dots C-1\}$$

  2. Предскажем класс с максимальным усредненным по моделям рейтингом:

$$\widehat{y}(x) = \arg\max_y \frac{1}{M} \sum_{m=1}^{M} s_y^m(x)$$

Содержание

Алгоритм стэкинга

- Рассмотрим обучающую выборку , базовые модели $f_1(x), ...f_M(x)$ и $G(\cdot)$.

Алгоритм стэкинга

- Рассмотрим обучающую выборку , базовые модели $f_1(x), ...f_M(x)$ и $G(\cdot)$.
- Обучение $f_1(x), ...f_M(x)$ и $G(\cdot)$ на одинаковой выборке вызывает переобучение.

Алгоритм стэкинга:

1. Инициализируем обучающую выборки $G(\cdot)$: $T' = \{\}$
2. Разобьем обучающую выборку $T = \{(x_n, y_n)\}_{n=1}^N$ на K блоков: $T_1, T_2, ...T_K$.
3. для $k = 1, 2, ...K$:
   обучим $f_1(x), ...f_M(x)$ на $T \setminus T_k$
   для каждого $(x, y) \in T_k$:
   дополним T' объектом $([f_1(x), ...f_M(x)], y)$
4. Обучим $G(\cdot)$ на T'.
5. Перенастроим $f_1(x), ...f_M(x)$ на всей T.

Расширения стэкинга

Кроме прогнозов $f_1(x), ...f_M(x)$ агрегирующая функция может зависеть от:

- исходных признаков x
  - в разных частях признакового пространства-разная агрегация
- внутренних представлений f_m (дискриминантных функций, вероятностей).

Линейный стэкинг (блендинг)

- Линейный стэкинг (блендинг, blending) :

$$f(x) = \sum_{m=1}^{M} w_m f_m(x)$$

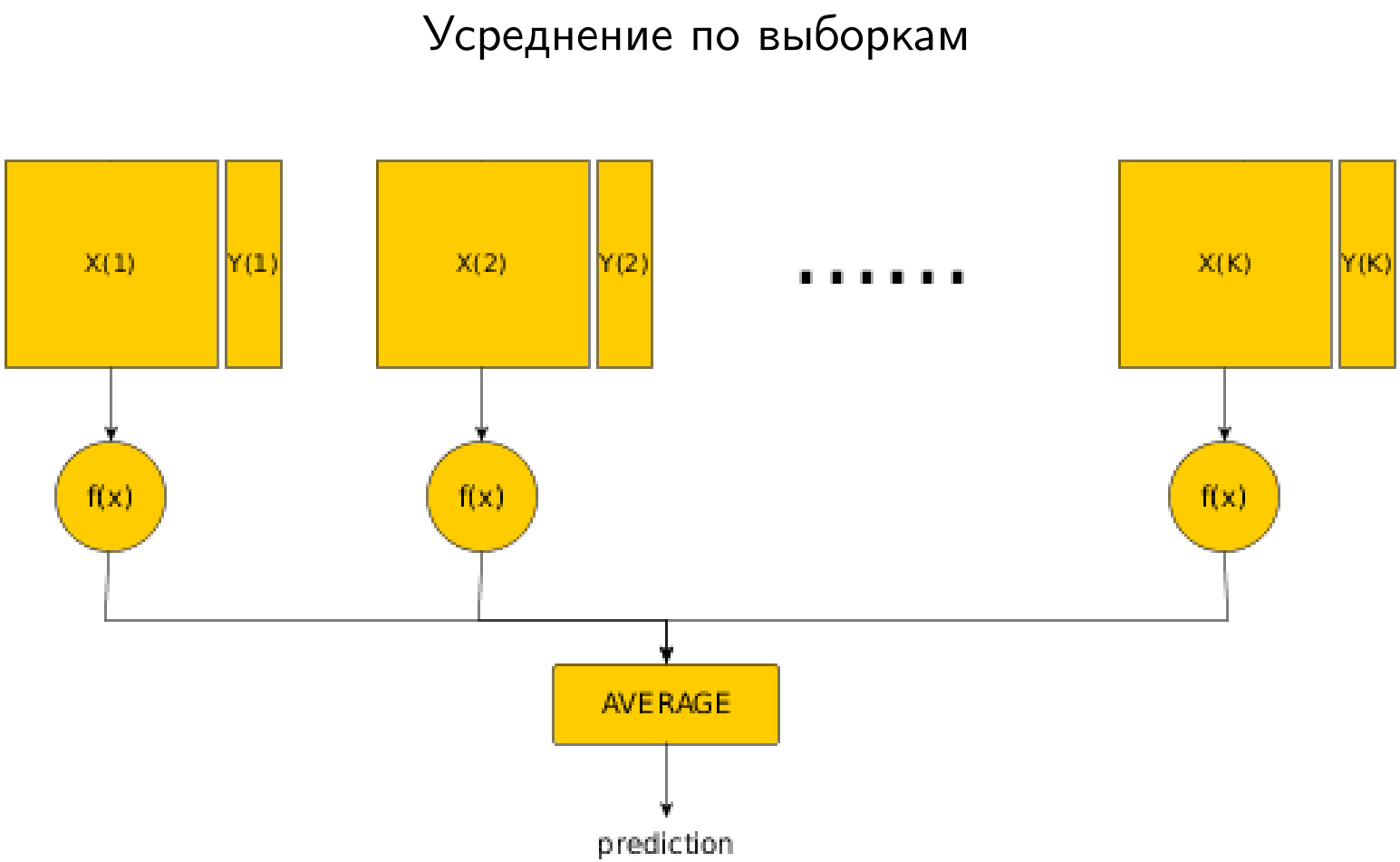
$$\sum_{n=1}^{N} \left(\sum_{m=1}^{M} w_m f_m(x_n) - y_n \right)^2 \to \min_{\mathbf{w}}$$

- $f_1(x), ...f_M(x)$ зависимы (предсказывают один и тот же y) => нестабильная оценка.
- Более устойчивая оценка:

$$\begin{cases} \sum_{n=1}^{N} \left(\sum_{m=1}^{M} w_m f_m(x_n) - y_n \right)^2 + \lambda \sum_{m=1}^{M} \left(w_m - \frac{1}{M} \right)^2 \to \min_{\mathbf{w}} \\ w_1 \geq 0, ...w_M \geq 0 \end{cases}$$

Содержание

Усреднение по выборкам



Усреднение по выборкам

Усреднение по выборкам: если модель переобучается на выборке (X, Y) можно усреднять множество моделей, обученных на разных реализациях обучающих выборок $(X_k, Y_k),\ k = 1, 2, ...M$.

$$bias_{X,Y}\left[\frac{1}{M}\sum_{k=1}^{M} f(x, X_k, Y_k)\right] = y(x) - \mathbb{E}_{X,Y}\left[\frac{1}{M}\sum_{k=1}^{M} f(x, X_k, Y_k)\right]$$

$$= y(x) - \frac{1}{M}\sum_{k=1}^{M}\mathbb{E}_{X,Y} f(x, X_k, Y_k) = y(x) - \frac{1}{M}\sum_{k=1}^{M}\mathbb{E}_{X,Y} f(x, X, Y)$$

$$= y(x) - \mathbb{E}_{X,Y} f(x, X, Y)$$

т.е. смещение=смещению 1-го алгоритма.

Усреднение по выборкам: дисперсия

$$\mathrm{Var}_{X,Y}\left[\frac{1}{M}\sum_{k=1}^{M} f(x,X_k,Y_k)\right] = \mathbb{E}_{X,Y}\left[\frac{1}{M}\sum_{k=1}^{M} f(x,X_k,Y_k) - \mathbb{E}_{X,Y}\left[\frac{1}{M}\sum_{k=1}^{M} f(x,X_k,Y_k)\right]\right]^2$$

$$= \mathbb{E}_{X,Y}\left[\frac{1}{M}\sum_{k=1}^{M} \left(f(x,X_k,Y_k) - \mathbb{E}_{X,Y} f(x,X_k,Y_k)\right)\right]^2 =$$

$$= \frac{1}{M^2}\mathbb{E}_{X,Y}\left[\sum_{k=1}^{M} \left(f(x,X_k,Y_k) - \mathbb{E}_{X,Y} f(x,X_k,Y_k)\right)\right]^2 =$$

$$= \frac{1}{M^2}\sum_{k=1}^{M} \mathbb{E}_{X,Y}\left[f(x,X_k,Y_k) - \mathbb{E}_{X,Y} f(x,X_k,Y_k)\right]^2 +$$

$$+\frac{1}{M^2}\sum_{k_1\neq k_2} \mathbb{E}_{X,Y}\left[\left(f(x,X_{k_1},Y_{k_1}) - \mathbb{E}_{X,Y} f(x,X_{k_1},Y_{k_1})\right)\left(f(x,X_{k_2},Y_{k_2}) - \mathbb{E}_{X,Y} f(x,X_{k_2},Y_{k_2})\right)\right]$$

$$= \frac{1}{M^2}\sum_{k=1}^{M} \mathrm{Var}_{X,Y}\left[f(x,X_k,Y_k)\right] + \frac{1}{M^2}\sum_{k_1\neq k_2} \mathrm{cov}\left[f(x,X_{k_1},Y_{k_1}), f(x,X_{k_2},Y_{k_2})\right]$$

Усреднение по выборкам: дисперсия

При нескоррелированных $f(x, X_k, Y_k)$:

$$\frac{1}{M^2}\sum_{k=1}^{K}\text{Var}_{X,Y}\left[f(x, X_k, Y_k)\right] +$$

$$+\frac{1}{M^2}\sum_{k_1\neq k_2}\text{cov}\left[f(x, X_{k_1}, Y_{k_1}), f(x, X_{k_2}, Y_{k_2})\right] =$$

$$= \frac{1}{M}\text{Var}_{X,Y}\left[f(x, X_k, Y_k)\right]$$

Дисперсия в M раз меньше.

Усреднение по выборкам: дисперсия

При частичной скоррелированности, дисперсия тоже уменьшается (используем $\text{cov}(x,y) \leq \sqrt{\text{Var}(x)}\sqrt{\text{Var}(y)}$):

$$\frac{1}{M^2}\sum_{k=1}^{K}\text{Var}_{X,Y}\left[f(x,X_k,Y_k)\right]+$$

$$+\frac{1}{M^2}\sum_{k_1\neq k_2}\text{cov}\left[f(x,X_{k_1},Y_{k_1}),f(x,X_{k_2},Y_{k_2})\right]=$$

$$=\frac{1}{M^2}\sum_{k_1=1}^{M}\sum_{k_2=1}^{M}\text{cov}\left[f(x,X_{k_1},Y_{k_1}),f(x,X_{k_2},Y_{k_2})\right]\leq$$

$$\leq\frac{1}{M^2}\sum_{k_1=1}^{M}\sum_{k_2=1}^{M}\sqrt{\text{Var}_{X,Y}\left[f(x,X_{k_1},Y_{k_1})\right]}\sqrt{\text{Var}_{X,Y}\left[f(x,X_{k_2},Y_{k_2})\right]}\leq$$

$$\leq\text{Var}_{X,Y}\left[f(x,X,Y)\right]$$

Бэггинг & метод случайных подпространств

На практике дана единственная (X, Y). Как генерировать $(X_1, Y_1), ...(X_M, Y_M)$?

[3] Какова вероятность того, что некоторый объект не попадет в подвыборку? Чему равен предел этой вероятности при $N \to \infty$?

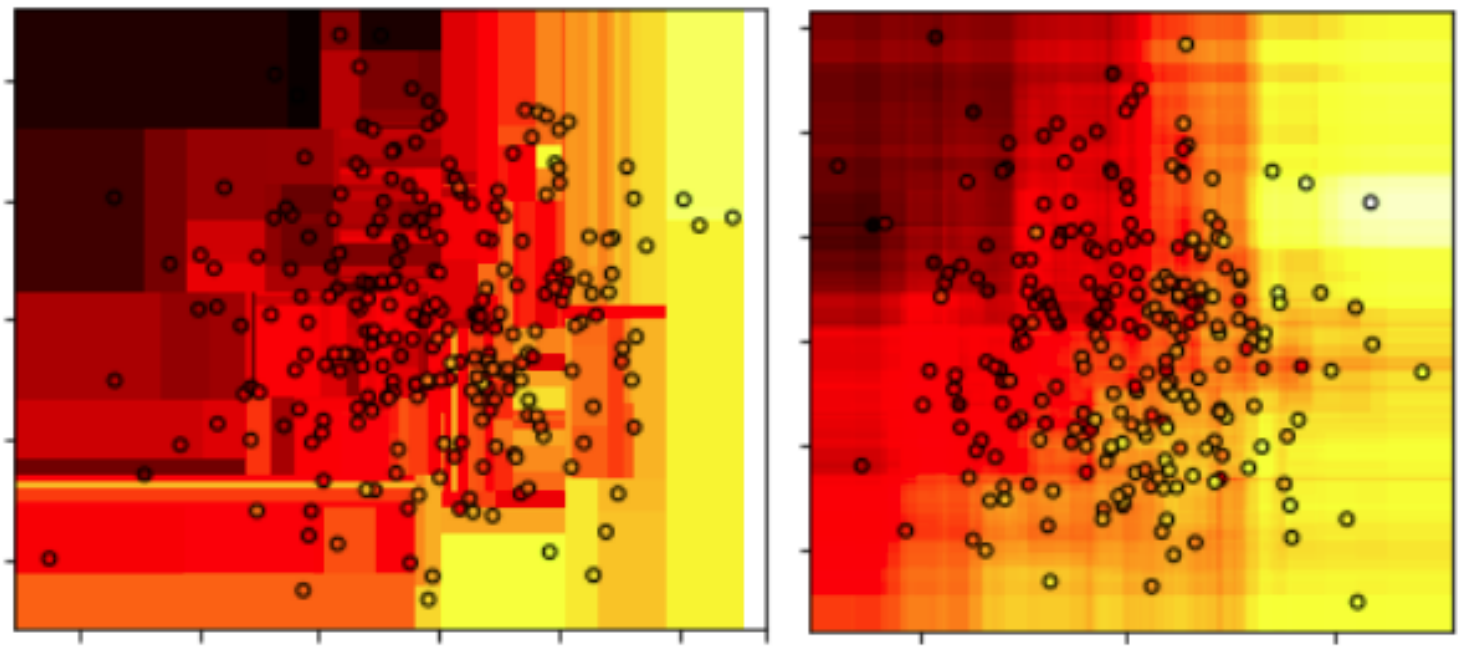
Бэггинг & метод случайных подпространств

На практике дана единственная (X, Y). Как генерировать $(X_1, Y_1), ...(X_M, Y_M)$?

- **Бэггинг (bagging)**:
  - случайный выбор N объектов (с возвращением)[3]
- **Метод случайных подпространств (random subspaces)**:
  - случайный выбор K признаков (без возвращения, $K < N$)
- Можно применять комбинацию методов.

[3] Какова вероятность того, что некоторый объект не попадет в подвыборку? Чему равен предел этой вероятности при $N \to \infty$?

Бэггинг деревьев



Регрессия: одно дерево и бэггинг над деревьями

Бэггинг деревьев

Настройка решающего правила в узле CART:

$$\widehat{f},\widehat{h} = \underset{f,h\in P(t)}{\arg\max}\,\Delta\phi(t)$$

$P(t)$ для стандартных решающих деревьев:

$P = \{\}$
for each f in $\{1,...,D\}$
    for each h in $unique\left\{x_n^f\right\}_{n:x_n\in t}$
        $P := P \cup (f,h)$

Бэггинг над решающими деревьями успешно борется с их переобучением.

Случайный лес, особо случайные деревья

$P(t)$ для случайного леса (random forest, RF):

$P = \{\}$, $K = \alpha D$
sample $d_1, ...d_K$ randomly from $\{1, ..., D\}$ # без возвращения
for each f in $d_1, ...d_K$
    for each h in $unique\left\{x_n^f\right\}_{n:x_{n\in t}}$
        $P := P \cup (f, h)$

$S(t)$ для особо случайных деревьев (extra random trees, ERT):

$S = \{\}$, $K = \alpha D$
sample $d_1, ...d_K$ randomly from $\{1, ..., D\}$ # с возвращением
for each f in $d_1, ...d_K$
    sample h randomly from $unique\left\{x_n^f\right\}_{n:x_{n\in t}}$
    $P := P \cup (f, h)$

Вневыборочная оценка

Оценка по обучающей выборке - оптимистическая оценка сверху:

$$L = \frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N}\mathcal{L}\left(\frac{1}{M}\sum_{m=1}^{M} f_m(x_n), y_n\right)$$

Вневыборочная оценка

Оценка по обучающей выборке - оптимистическая оценка сверху:

$$L = \frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N}\mathcal{L}\left(\frac{1}{M}\sum_{m=1}^{M} f_m(x_n), y_n\right)$$

Вневыборочная оценка (out-of-bag estimate) - если с бэггингом

$$L_{OOB} = \frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N}\mathcal{L}\left(\frac{1}{|I_n|}\sum_{m\in I_n} f_m(x_n), y_n\right)$$

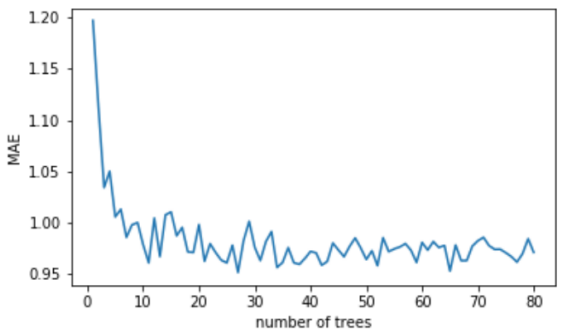
- $I_n \subset \{1,2,...M\}$- набор моделей, не использовавших (x_n, y_n) для обучения.
- Не требуется дополнительная валидационная выборка.
- Немного пессимистическая оценка потерь снизу.

Комментарии

- Бэггинг, случайный лес, особо случайные деревья:
  - легко распараллеливаются
  - базовые модели не учатся исправлять ошибки друг друга
- Деревья случайный лес, особо случайные деревья могут строиться на одинаковой обучающей выборке
  - bootstrap=False в sklearn
  - за счет случайности $P(t)$ модели все равно будут получаться разные

Число базовых моделей в ансамбле

- Пусть M=#базовых моделей.
- Типичная зависимость потерь от M:



- Нет переобучения с $\uparrow M$: просто избыточное усреднение по однотипным моделям.
- Настройка: подбор всех параметров с малым M, затем $\uparrow M$.

Заключение

- Разложение на смещение и разброс:
  - простые модели: высокое смещение
  - сложные модели: высокая дисперсия
- Разложение неопределенности:
  - выгодно усреднять разнородные модели
- Композиции:
  - простая агрегирующая модель: борьба с переобучением
  - сложная агрегирующая модель: борьба с недообучением
- Стэкинг: агрегирующая модель и базовые должны обучаться на разных выборках
- Борьба с переобучением: бэггинг, метод случайных подпространств, случайный лет, особо случайные деревья.