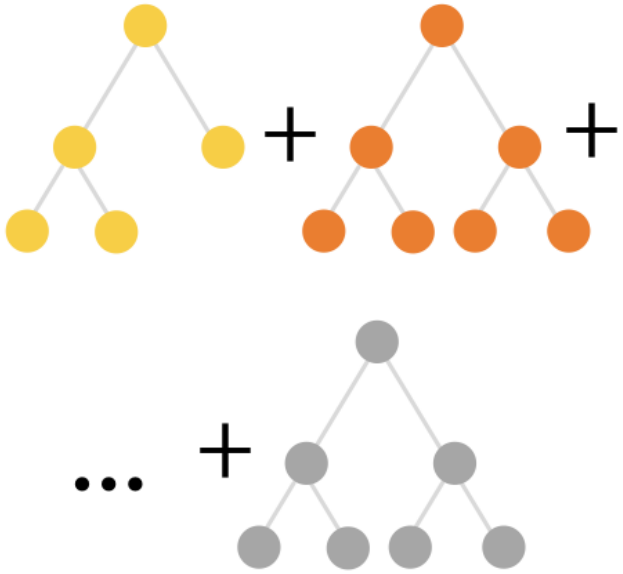
Бустинг

Виктор Китов

victorkitov.github.io



Курс поддержан фондом 'Интеллект'

Победитель конкурса VK среди курсов по IT

Бустинг[1]

Строится линейная композиция:

$$G_M(x) = f_0(x) + c_1 f_1(x) + ... + c_M f_M(x)$$

Регрессия: $\widehat{y}(x) = G_M(x)$
Классификация: $g_y(x) = G_M(x)$, $\widehat{y}(x) = \text{sign}\, G_M(x)$

- $f_1(x), ...f_M(x)$ - базовые модели (base learners, base models).
- Сложно оптимизировать $f_0(x), f_1(x), ...f_M(x)$ и $c_1, ...c_M$ одновременно.
- Упрощение: настраиваем $f_0(x)$, потом последовательно $(f_m(x),\, c_m)$ для $m = 1, 2, ...M$.

[1] Какую модель получим, если применим бустинг к линейным моделям?

Алгоритм бустинга

1. Настраиваем начальное приближение

$$f_0(x) = \arg\min_f \sum_{n=1}^{N} \mathcal{L}(f(x_n), y_n)$$

2. Для $m = 1, 2, ...M$:
   - находим коррекцию:

$$(c_m, f_m) := \arg\min_{f,c} \sum_{n=1}^{N} \mathcal{L}(G_{m-1}(x_n) + cf(x_n),\ y_n)$$

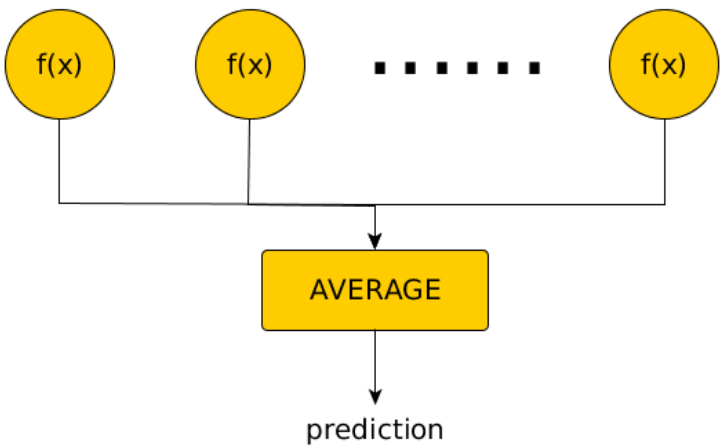
   - обновляем ансамбль:

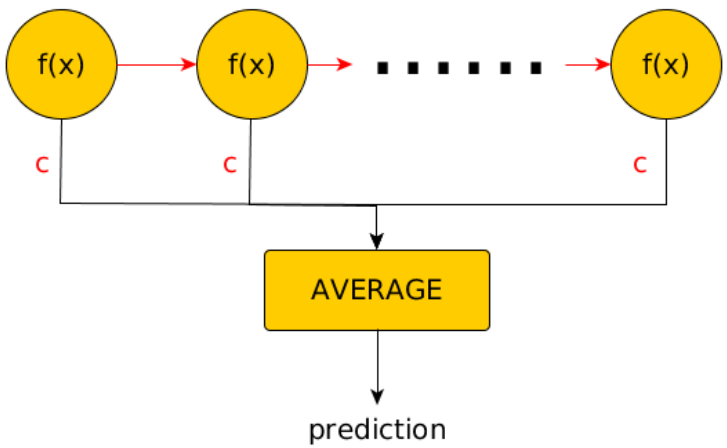
$$G_m(x) := G_{m-1}(x) + c_m f_m(x)$$

3. Возвращаем $G_M(x)$.

Бэггинг и бустинг

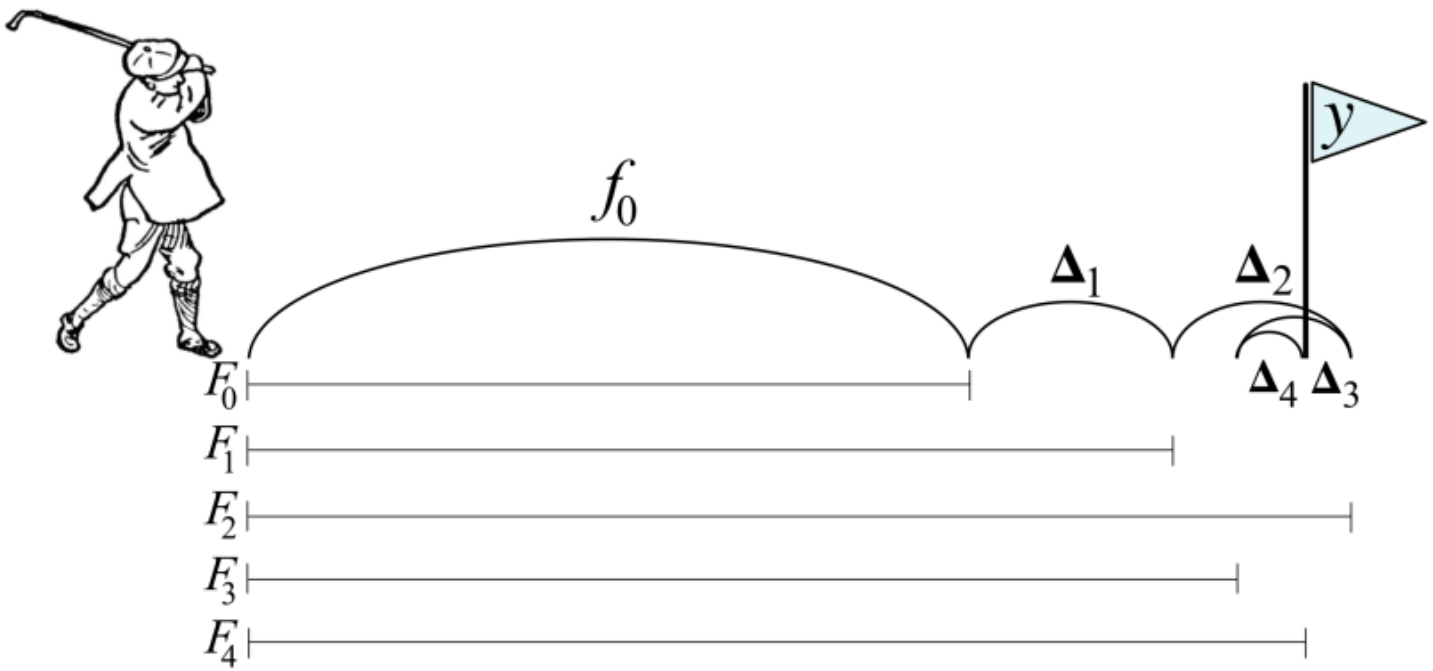
Бэггинг и бустинг





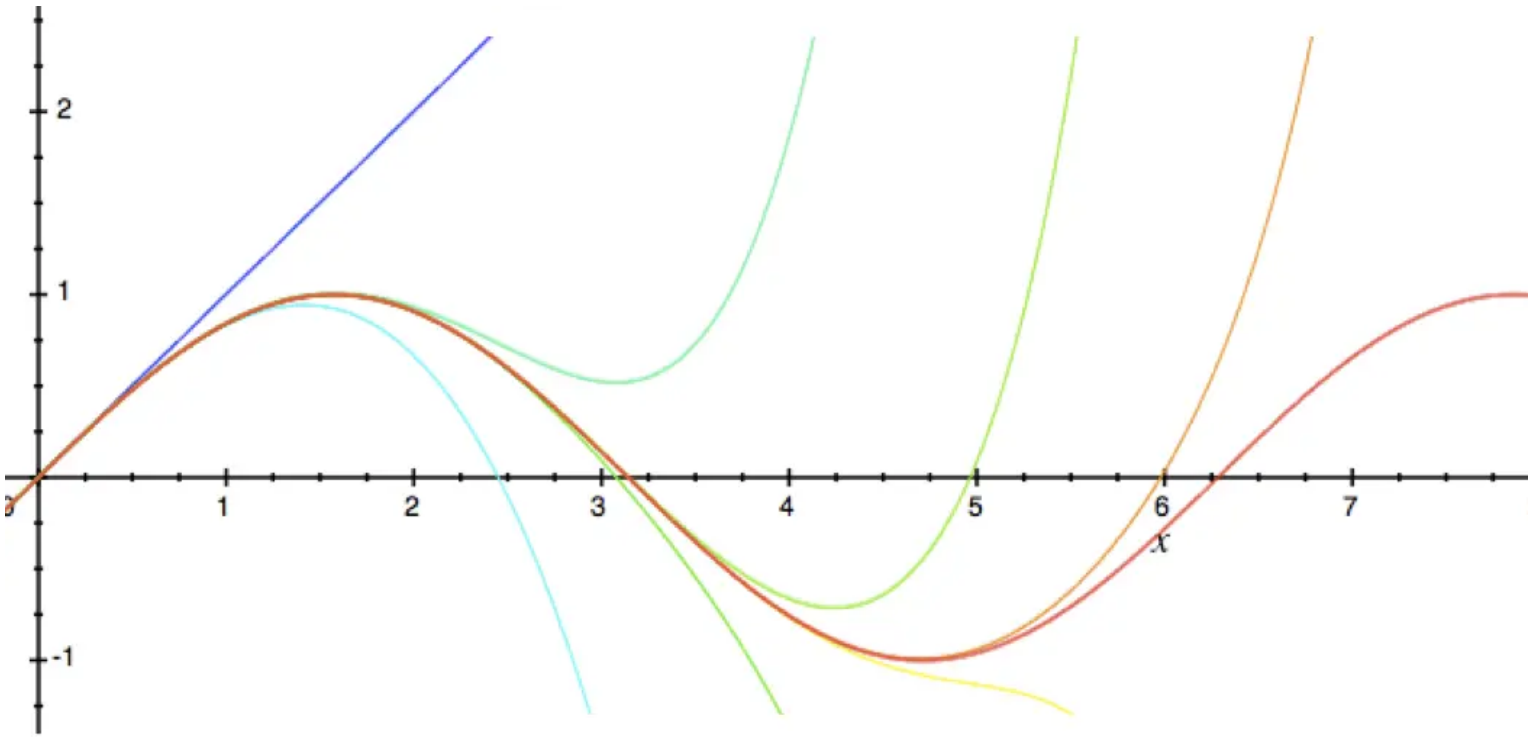
Интуиция бустинга

Аналогия с игрой в гольф



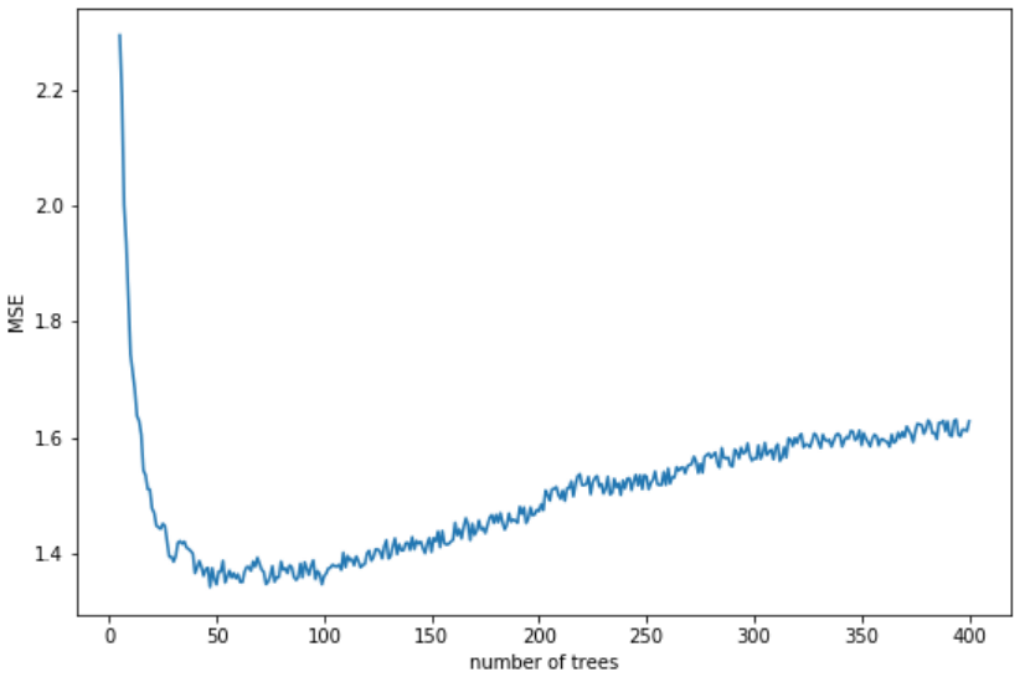
Интуиция бустинга

Аналогия с разложением в ряд Тейлора



Зависимость от M

Зависимость средних потерь от M:



M контролирует сложность ансамбля. Настраиваем #базовых моделей стратегией ранней остановки (early stopping), когда качество на валидации стало уменьшаться.

Комментарии

- Точнее - усреднение по большему числу $f_m(x)$.
- Каждый $f_m(x)$ должен быть простым, чтобы оставлять возможности последующим моделям.
  - $f_0(x) \equiv 0$ или $f_0(x) \equiv const$
  - настройка $f_m(x)$ может быть неточной
  - $f_m(x)$ должны быть простыми моделями

Содержание

Adaboost (дискретная версия)

Предположения:

- бинарная классификация $y \in \{+1, -1\}$
- функция потерь $\mathcal{L}(G(x), y) = e^{-yG(x)}$
  - неустойчива к выбросам, их нужно фильтровать по весам
- $f_m(x) \in \{+1, -1\}$, способны настраиваться на взвешенной обучающей выборке.
- настраивается $\widehat{y}(x) = \text{sign}\left(\sum_{m=1}^{M} c_m f_m(x)\right)$
- M - внешний параметр.

Возможно аналитическое решение.

Adaboost (дискретная версия): алгоритм

1. Инициализируем веса объектов $w_n = 1/N$, $n = 1, 2, ...N$.
2. Для каждого $m = 1, 2, ...M$:
   1. настраиваем $f_m(x)$ по выборке с весами $\{w_n\}_{n=1}^N$
   2. вычисляем взвешенную частоту ошибок:

$$E_m = \frac{\sum_{n=1}^N w_n \mathbb{I}[f_m(x_n) \neq y_n]}{\sum_{n=1}^N w_n}$$

   3. если $E_m > 0.5$ либо $E_m = 0$: останавливаем построение ансамбля.
   4. вычисляем $c_m = \frac{1}{2} \ln\left((1 - E_m)/E_m\right)$ $\quad E_m < 0.5 => c_m > 0$
   5. увеличиваем веса объектов, где $f_m(x)$ ошиблась:

$$w_n \leftarrow w_n e^{2c_m} = w_n \left(\frac{1 - E_m}{E_m}\right), \text{ для } n : f_m(x_n) \neq y_n$$

Вывод Adaboost

Задаем $G_0(x) \equiv 0$.
Для каждого $m = 1, 2, ...M$:

$$\begin{aligned}
(c_m, f_m) &= \arg\min_{c_m, f_m} \sum_{n=1}^{N} \mathcal{L}(G_{m-1}(x_n) + c_m f_m(x_n),\ y_n) \\
&= \arg\min_{c_m, f_m} \sum_{n=1}^{N} e^{-y_n G_{m-1}(x_n)} e^{-c_m y_n f_m(x_n)} \\
&= \arg\min_{c_m, f_m} \sum_{i=1}^{N} w_n^m e^{-c_m y_n f_m(x_n)}, \quad w_n^m := e^{-y_n G_{m-1}(x_n)}
\end{aligned}$$

Вывод Adaboost

$$\frac{\partial L(c_m)}{\partial c_m} = -\sum_{n=1}^{N} w_n^m e^{-c_m y_n f_m(x_n)} y_n f_m(x_n) = 0$$

$$-\sum_{n:f_m(x_n)=y_n} w_n^m e^{-c_m} + \sum_{n:f_m(x_n)\neq y_n} w_n^m e^{c_m} = 0$$

$$e^{2c_m} = \frac{\sum_{n:f_m(x_n)=y_n} w_n^m}{\sum_{n:f_m(x_n)\neq y_n} w_n^m}$$

$$c_m = \frac{1}{2}\ln\frac{\left(\sum_{n:f_m(x_n)=y_n} w_n^m\right) / \left(\sum_{n=1}^{N} w_n^m\right)}{\left(\sum_{n:f_m(x_n)\neq y_n} w_n^m\right) / \left(\sum_{n=1}^{N} w_n^m\right)} = \frac{1}{2}\ln\frac{1-E_m}{E_m} > 0,$$

Вывод Adaboost

$$\sum_{n=1}^{N} w_n^m e^{-c_m y_n f_m(x_n)} = \sum_{n:f_m(x_n)=y_n} w_n^m e^{-c_m} + \sum_{n:f_m(x_n)\neq y_n} w_n^m e^{c_m}$$

$$= e^{-c_m} \sum_{n:f_m(x_n)=y_n} w_n^m + e^{c_m} \sum_{n:f_m(x_n)\neq y_n} w_n^m$$

$$= e^{-c_m} \sum_{n=1}^{N} w_n^m - e^{-c_m} \sum_{n:f_m(x_n)\neq y_n} w_n^m + e^{c_m} \sum_{n:f_m(x_n)\neq y_n} w_n^m$$

$$= e^{-c_m} \sum_{n} w_n^m + (e^{c_m} - e^{-c_m}) \sum_{n:f_m(x_n)\neq y_n} w_n^m$$

Поскольку $c_m > 0$, $f_m(\cdot)$ находится из условия

$$f_m(\cdot) = \arg\min_f \sum_{n=1}^{N} w_n^m \mathbb{I}[f(x_n) \neq y_n]$$

Вывод Adaboost

Пересчет весов:

$$w_n^{m+1} \overset{def}{=} e^{-y_n G_m(x_n)} = e^{-y_n G_{m-1}(x_n)} e^{-y_n c_m f_m(x_n)} = w_n^m e^{-y_n c_m f_m(x_n)}$$

Т.к. $y_n f_m(x_n) = 1 - 2\mathbb{I}[f_m(x_n) \neq y_n]$, получим:

$$w_n^{m+1} = w_n^m e^{c_m(2\mathbb{I}[f_m(x_n)\neq y_n]-1)} = w_n^m e^{2c_m\mathbb{I}[f_m(x_n)\neq y_n]} e^{-c_m}$$

$$\propto w_n^m e^{2c_m\mathbb{I}[f_m(x_n)\neq y_n]} = w_n^m \left(\frac{1-E_m}{E_m}\right)^{\mathbb{I}[f(x_n)\neq y_n]} > w_n^m$$

- Веса нормируются => сократили общий множитель.
- $w_n^{m+1} = w_n^m$ для $n: \ f_m(x_n) = y_n$.
- $w_n^{m+1} > w_n^m$ для $n: \ f_m(x_n) \neq y_n$.
  - последующие модели уделят объектам повышенное внимание

Использование AdaBoost

```
from sklearn.ensemble import AdaBoostClassifier
from sklearn.metrics import accuracy_score
from sklearn.metrics import brier_score_loss

X_train, X_test, Y_train, Y_test =
      get_demo_classification_data()
model = AdaBoostClassifier(n_estimators=50)
# для регрессии есть AdaBoostRegressor
model.fit(X_train, Y_train)     # обучение модели
Y_hat = model.predict(X_test)  # построение прогнозов
print(f'Точность прогнозов: \
   {100*accuracy_score(Y_test, Y_hat):.1f}%')

P_hat = model.predict_proba(X_test)
loss = brier_score_loss(Y_test, P_hat[:,1])
print(f'Ошибка Бриера: {loss:.2f}')
```

Больше информации. Полный код.

Содержание

Мотивация

- Проблема: для ф-ции потерь общего вида пересчет модели/весов не может быть решен аналитически.
- Аналогия с минимизацией ф-ций: если нет аналитического решения, находим численное решение
- Градиентный бустинг: аналогия градиентного спуска в пространстве функций.

Интуиция метода

- Решаем задачу подбора $f_{m+1}(x)$ (пока без c_m):

$$L(f_m) = \frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N}\mathcal{L}\left(G_m(x_n) + f_m(x_n), y_n\right) \to \min_{f_m}$$

- Если $[f_m(x_1), f_m(x_2), ...f_m(x_N)] \to [u_1, u_2, ...u_N] \in \mathbb{R}^N$:

$$L(\mathrm{u}) = L(u_1, ...u_N) = \frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N}\mathcal{L}\left(G_m(x_n) + u_n, y_n\right) \to \min_{u_1, u_2, ...u_N}$$

Интуиция метода

- Решаем задачу подбора $f_{m+1}(x)$ (пока без c_m):

$$L(f_m) = \frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N}\mathcal{L}\left(G_m(x_n) + f_m(x_n), y_n\right) \to \min_{f_m}$$

- Если $[f_m(x_1), f_m(x_2), ...f_m(x_N)] \to [u_1, u_2, ...u_N] \in \mathbb{R}^N$:

$$L(\mathrm{u}) = L(u_1, ...u_N) = \frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N}\mathcal{L}\left(G_m(x_n) + u_n, y_n\right) \to \min_{u_1, u_2, ...u_N}$$

- В линейном приближении можно решить, положив

$$u_1 = -\frac{\partial L(G_m(x_1), y_1)}{\partial G};\ \cdots\ u_N = -\frac{\partial L(G_m(x_N), y_N)}{\partial G}$$

Интуиция метода

- Решаем задачу подбора $f_{m+1}(x)$ (пока без c_m):

$$L(f_m) = \frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N}\mathcal{L}\left(G_m(x_n) + f_m(x_n), y_n\right) \to \min_{f_m}$$

- Если $[f_m(x_1), f_m(x_2), ...f_m(x_N)] \to [u_1, u_2, ...u_N] \in \mathbb{R}^N$:

$$L(\mathrm{u}) = L(u_1, ...u_N) = \frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N}\mathcal{L}\left(G_m(x_n) + u_n, y_n\right) \to \min_{u_1, u_2, ...u_N}$$

- В линейном приближении можно решить, положив

$$u_1 = -\frac{\partial L(G_m(x_1), y_1)}{\partial G};\ \cdots\ u_N = -\frac{\partial L(G_m(x_N), y_N)}{\partial G}$$

- Следовательно, следует выбирать $f_m(x)$ так, чтобы

$$f_m(x_1) \approx -\frac{\partial \mathcal{L}(G_m(x_1), y_1)}{\partial G};\ \cdots\ f_m(x_N) \approx -\frac{\partial \mathcal{L}(G_m(x_N), y_N)}{\partial G}$$

Интуиция метода

- Шагу градиентного спуска при минимизации $\mathcal{L}(\mathrm{u})$:

$$\mathrm{u} := \mathrm{u} - \varepsilon \nabla L(\mathrm{u})$$

будет приближённо соответствовать обновление ансамбля:

$$G_{m+1}(x) := G_m(x) + \varepsilon f_m(x)$$

- $\nabla L(\mathrm{u}) \in \mathbb{R}^N$ соответствует $[f_m(x_1), f_m(x_2), ...f_m(x_N)]$.
- ε - шаг обучения (learning rate).

Локальная линейная аппроксимация

Линейная аппроксимация $\mathcal{L}$ с $g(x) = \left.\frac{\partial \mathcal{L}(G,y)}{\partial G}\right|_{G=G(x)}$:

Локальная линейная аппроксимация

Линейная аппроксимация $\mathcal{L}$ с $g(x) = \left.\frac{\partial \mathcal{L}(G,y)}{\partial G}\right|_{G=G(x)}$:

$$\mathcal{L}(G(x)+f(x),\, y) \approx \mathcal{L}(G(x), y) + g(x)f(x)$$

$$\arg\min_{f(x)} \sum_{n=1}^{N} \mathcal{L}(G(x_n)+f(x_n), y_n)$$

$$\approx \arg\min_{f(x)} \sum_{n=1}^{N} \mathcal{L}(G(x_n), y_n) + g(x_n)f(x_n)$$

$$= \arg\min_{f(x)} \sum_{n=1}^{N} g(x_n)f(x_n) = \arg\max_{f(x)} \sum_{n=1}^{N} g(x_n)f(x_n)$$

$\Rightarrow$ $f(x)$ должна настраиваться на $-g(x)$, т.к.

$$\arg\min_{f:\|f\|\leq\|g\|} \langle f, g\rangle = -g$$

Пример: регрессия

$$\sum_{n=1}^{N}\left(f_m(x_n)+\frac{\partial \mathcal{L}(G,y_n)}{\partial G}|_{G=G_{m-1}(x_n)}\right)^2\to\min_{f_m}$$

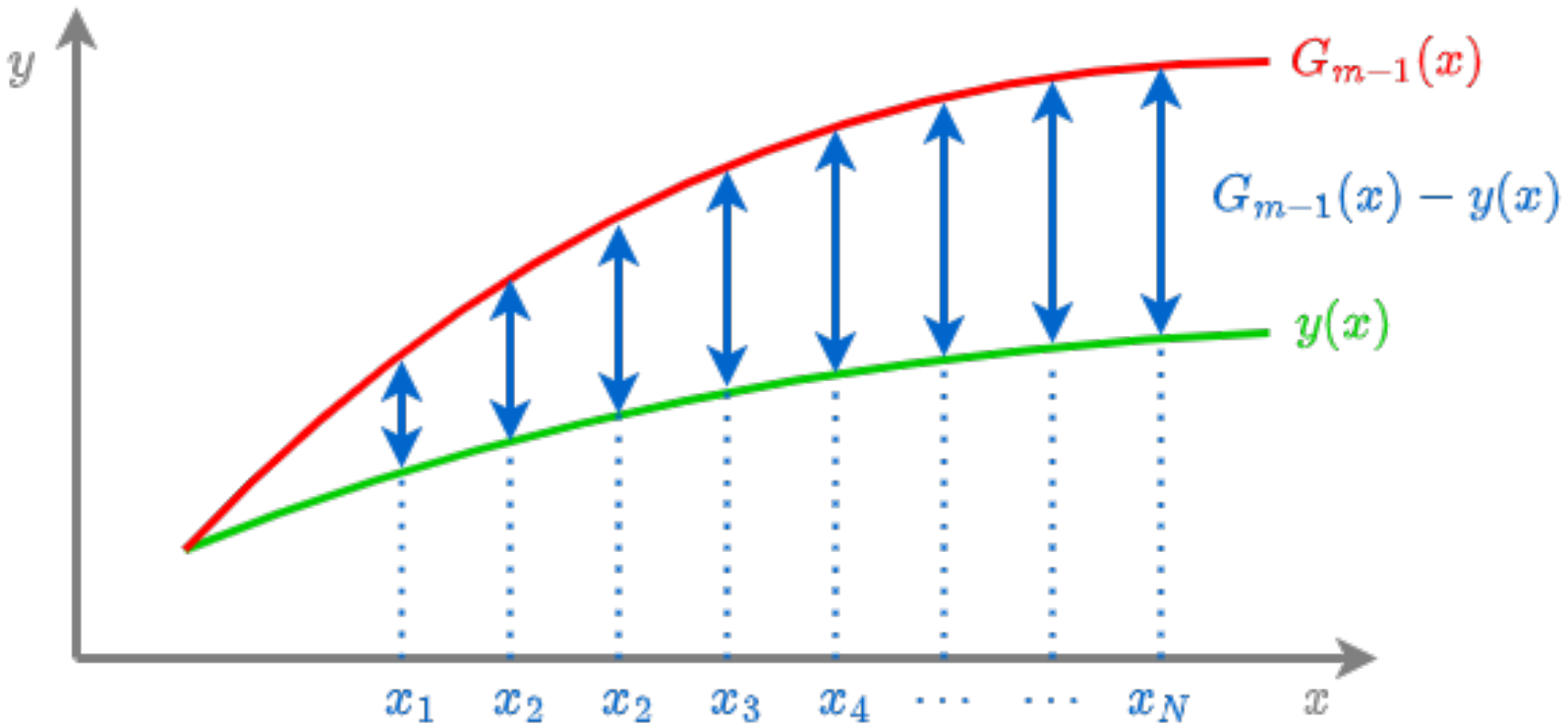
Пример: регрессия

$$\sum_{n=1}^{N}\left(f_m(x_n)+\frac{\partial\mathcal{L}(G,y_n)}{\partial G}|_{G=G_{m-1}(x_n)}\right)^2\to\min_{f_m}$$

$$\mathcal{L}=\frac{1}{2}(G-y)^2:\ f(x)\approx-\frac{\partial\mathcal{L}(G,y)}{\partial G}=-(G-y)$$

$$G_m(x_n):=G_{m-1}(x_n)+\varepsilon f(x)\approx G_{m-1}(x_n)+\varepsilon(y_n-G_{m-1}(x_n))$$

Иллюстрация



Пример: классификация

$$\sum_{n=1}^{N}\left(f_m(x_n)+\frac{\partial \mathcal{L}(G,y_n)}{\partial G}|_{G=G_{m-1}(x_n)}\right)^2\to\min_{f_m}$$

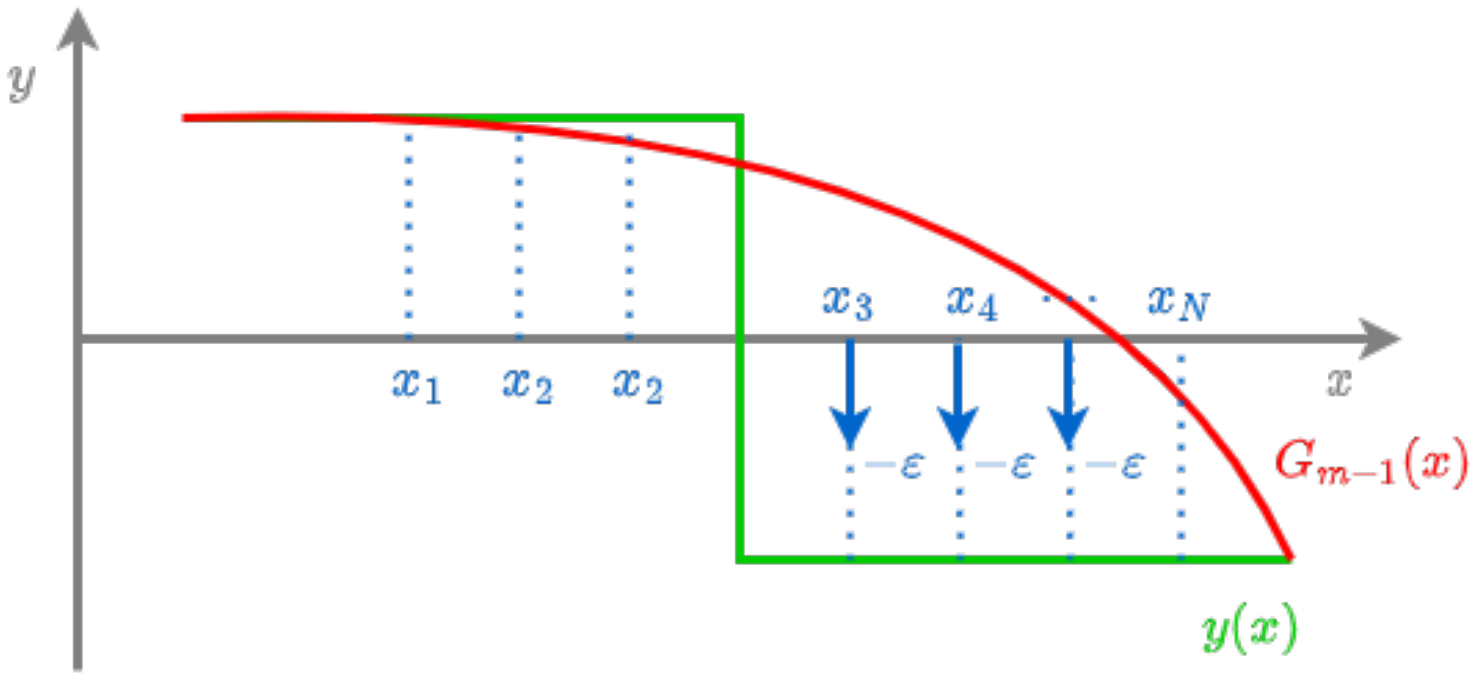
Пример: классификация

$$\sum_{n=1}^{N}\left(f_m(x_n)+\frac{\partial\mathcal{L}(G,y_n)}{\partial G}|_{G=G_{m-1}(x_n)}\right)^2\to\min_{f_m}$$

$$\mathcal{L}=[-Gy]_+:\ \ f_m(x)\approx-\frac{\partial\mathcal{L}(G,y)}{\partial G}=\begin{cases}y, & Gy<0\\ 0, & Gy\geq 0\end{cases}$$

$$G_m(x_n):=G_{m-1}(x_n)+\varepsilon f_m(x)\approx G_{m-1}(x_n)+\begin{cases}\varepsilon y_n, & G(x_n)y_n<0\\ 0, & G(x_n)y_n\geq 0\end{cases}$$

Иллюстрация



Алгоритм градиентного бустинга

Вход: обучающая выборка $X, Y = \{(x_n, y_n)\}_{n=1}^{N}$,; функция потерь $\mathcal{L}(f, y)$ и число базовых моделей M.

1. Настраиваем начальную модель $G_0(x)$ по X, Y.

Алгоритм градиентного бустинга

Вход: обучающая выборка $X, Y = \{(x_n, y_n)\}_{n=1}^{N}$,; функция потерь $\mathcal{L}(f, y)$ и число базовых моделей M.

1. Настраиваем начальную модель $G_0(x)$ по X, Y.
2. Для каждого $m = 1, 2, ...M$:

Алгоритм градиентного бустинга

Вход: обучающая выборка $X, Y = \{(x_n, y_n)\}_{n=1}^{N}$,; функция потерь $\mathcal{L}(f, y)$ и число базовых моделей M.

1. Настраиваем начальную модель $G_0(x)$ по X, Y.
2. Для каждого $m = 1, 2, ...M$:
   1. вычисляем градиенты: $g_n = \frac{\partial \mathcal{L}(G_{m-\mathbf{1}}(x_n), y_n)}{\partial G}$

Алгоритм градиентного бустинга

Вход: обучающая выборка $X, Y = \{(x_n, y_n)\}_{n=1}^N$,; функция потерь $\mathcal{L}(f, y)$ и число базовых моделей M.

1. Настраиваем начальную модель $G_0(x)$ по X, Y.
2. Для каждого $m = 1, 2, ...M$:
   1. вычисляем градиенты: $g_n = \frac{\partial \mathcal{L}(G_{m-1}(x_n), y_n)}{\partial G}$
   2. настраиваем $f_m(\cdot)$ на $\{(x_n, -g_n)\}_{n=1}^N$, например

$$\sum_{n=1}^{N} (f_m(x_n) + g_n)^2 \to \min_{f_m}$$

Алгоритм градиентного бустинга

Вход: обучающая выборка $X, Y = \{(x_n, y_n)\}_{n=1}^N$,; функция потерь $\mathcal{L}(f, y)$ и число базовых моделей M.

1. Настраиваем начальную модель $G_0(x)$ по X, Y.
2. Для каждого $m = 1, 2, ...M$:
   1. вычисляем градиенты: $g_n = \frac{\partial \mathcal{L}(G_{m-1}(x_n), y_n)}{\partial G}$
   2. настраиваем $f_m(\cdot)$ на $\{(x_n, -g_n)\}_{n=1}^N$, например

$$\sum_{n=1}^{N} (f_m(x_n) + g_n)^2 \to \min_{f_m}$$

   3. настраиваем шаг (в sklearn - константный):

$$\varepsilon_m = \arg\min_{\varepsilon > 0} \sum_{n=1}^{N} \mathcal{L}\left(G_{m-1}(x_n) + \varepsilon f_m(x_n), y_n\right)$$

Алгоритм градиентного бустинга

Вход: обучающая выборка $X, Y = \{(x_n, y_n)\}_{n=1}^N$,; функция потерь $\mathcal{L}(f, y)$ и число базовых моделей M.

1. Настраиваем начальную модель $G_0(x)$ по X, Y.
2. Для каждого $m = 1, 2, ...M$:
   1. вычисляем градиенты: $g_n = \frac{\partial \mathcal{L}(G_{m-1}(x_n), y_n)}{\partial G}$
   2. настраиваем $f_m(\cdot)$ на $\{(x_n, -g_n)\}_{n=1}^N$, например
   $$\sum_{n=1}^N (f_m(x_n) + g_n)^2 \to \min_{f_m}$$
   3. настраиваем шаг (в sklearn - константный):
   $$\varepsilon_m = \arg\min_{\varepsilon > 0} \sum_{n=1}^N \mathcal{L}\left(G_{m-1}(x_n) + \varepsilon f_m(x_n), y_n\right)$$
   4. обновляем $G_m(x) = G_{m-1}(x) + \varepsilon_m f_m(x)$

Алгоритм градиентного бустинга

Вход: обучающая выборка $X, Y = \{(x_n, y_n)\}_{n=1}^N$,; функция потерь $\mathcal{L}(f, y)$ и число базовых моделей M.

1. Настраиваем начальную модель $G_0(x)$ по X, Y.
2. Для каждого $m = 1, 2, ...M$:
   1. вычисляем градиенты: $g_n = \frac{\partial \mathcal{L}(G_{m-1}(x_n), y_n)}{\partial G}$
   2. настраиваем $f_m(\cdot)$ на $\{(x_n, -g_n)\}_{n=1}^N$, например
   $$\sum_{n=1}^N (f_m(x_n) + g_n)^2 \to \min_{f_m}$$
   3. настраиваем шаг (в sklearn - константный):
   $$\varepsilon_m = \arg\min_{\varepsilon > 0} \sum_{n=1}^N \mathcal{L}\left(G_{m-1}(x_n) + \varepsilon f_m(x_n), y_n\right)$$
   4. обновляем $G_m(x) = G_{m-1}(x) + \varepsilon_m f_m(x)$

Выход: композиция $G_M(x)$.

Содержание

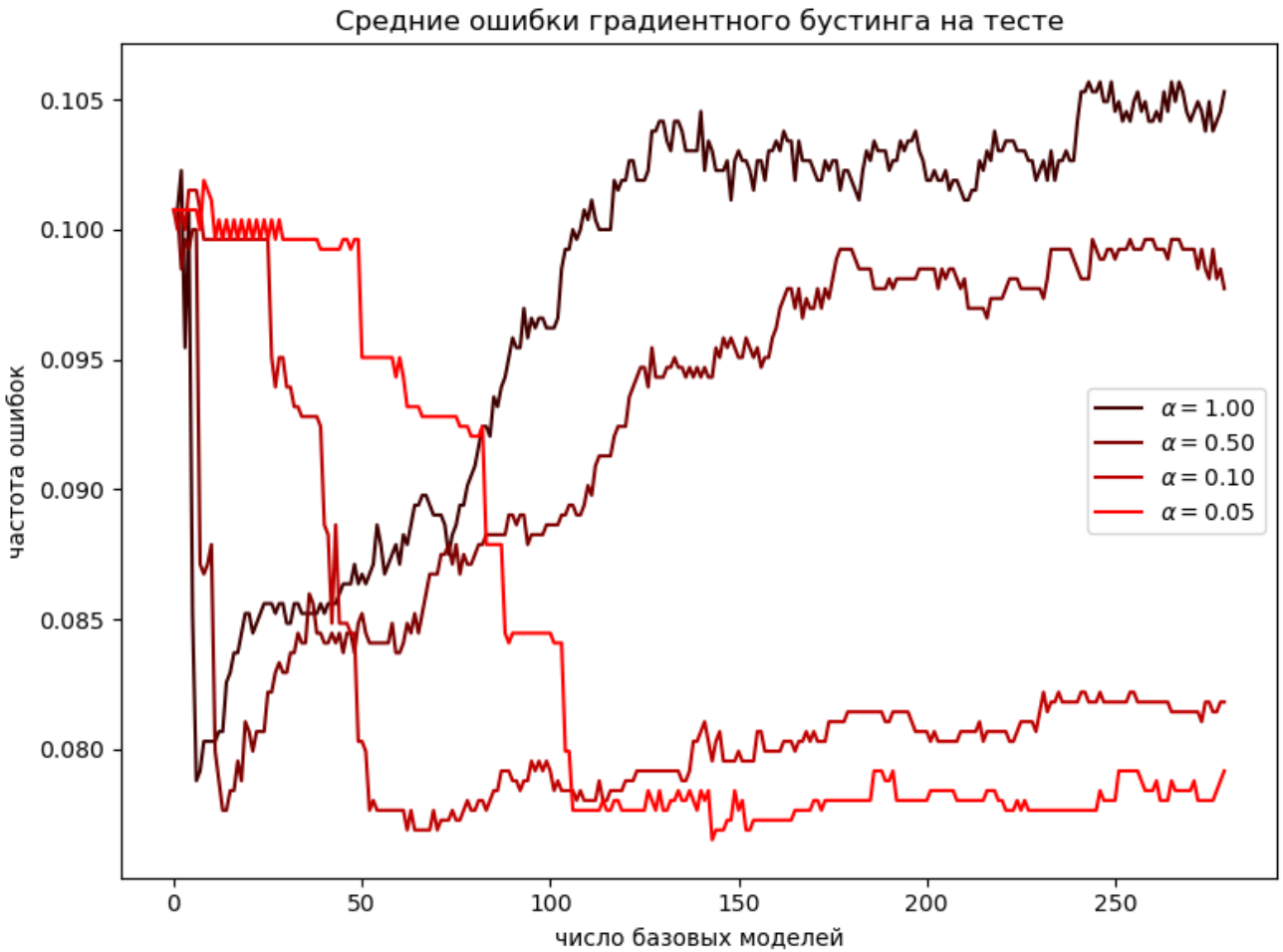
Сжатие, обучение на подвыборках

- Перенастройка линейной регрессией весов по признакам $f_1(x), ...f_M(x)$.
- Сжатие шага (shrinkage):

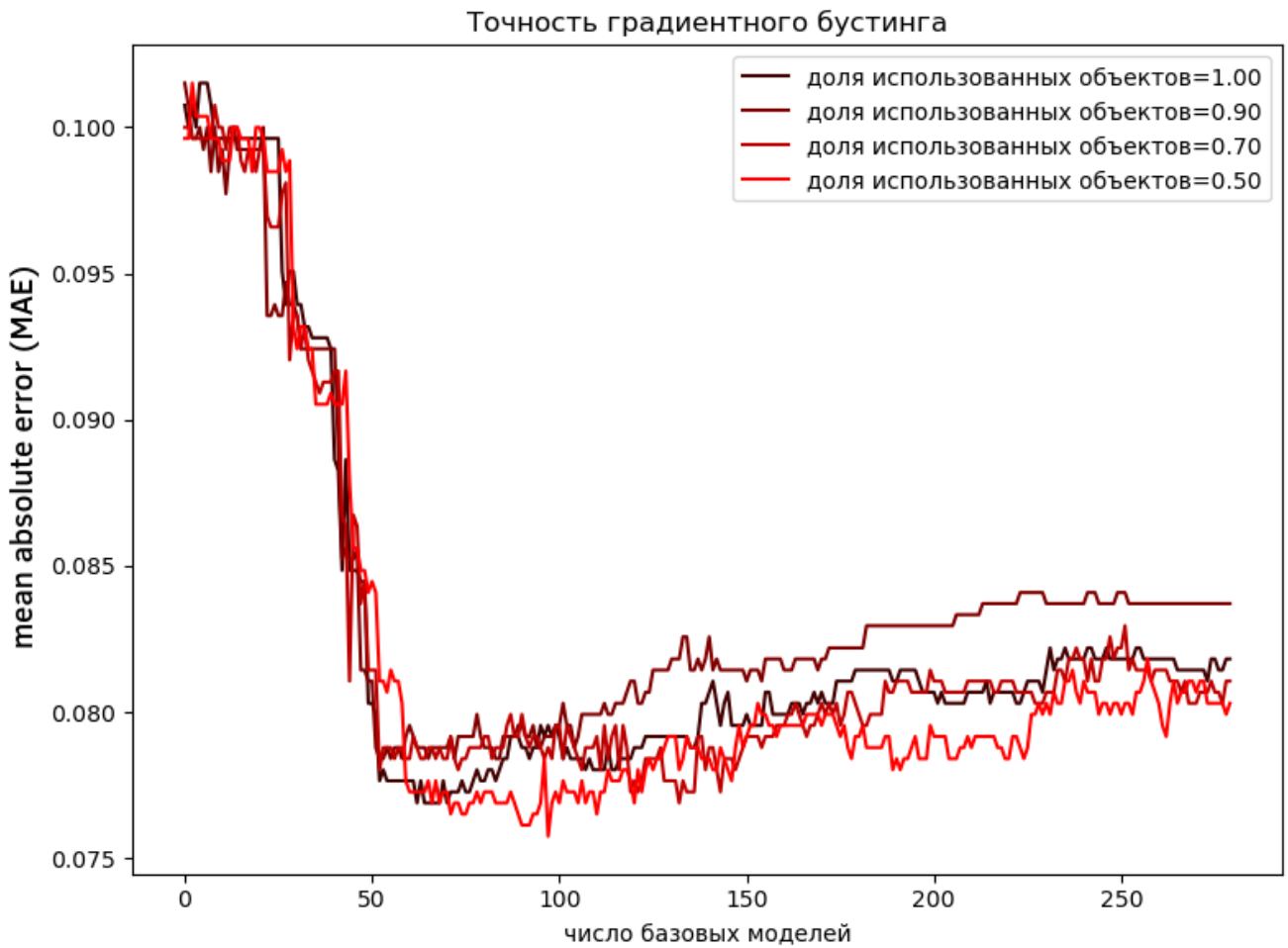
$$G_m(x) = G_{m-1}(x) + \alpha\varepsilon_m f_m(x)$$

  - $\alpha \downarrow \Longrightarrow\ M \uparrow (\alpha M \approx const)$
  - $\alpha \in (0, 1]$ - искусственно увеличиваем # шагов и # базовых моделей для $\uparrow$точности.
  - настраиваем все параметры, потом используем α и $M := M/\alpha$.
- Обучение $f_m(x)$ на подвыборках (subsampling)
  - объекты и признаки сэмплируются без возвращения
  - ускоряет настройку
  - повышает разнообразие $f_m(x)$ и точность композиции.

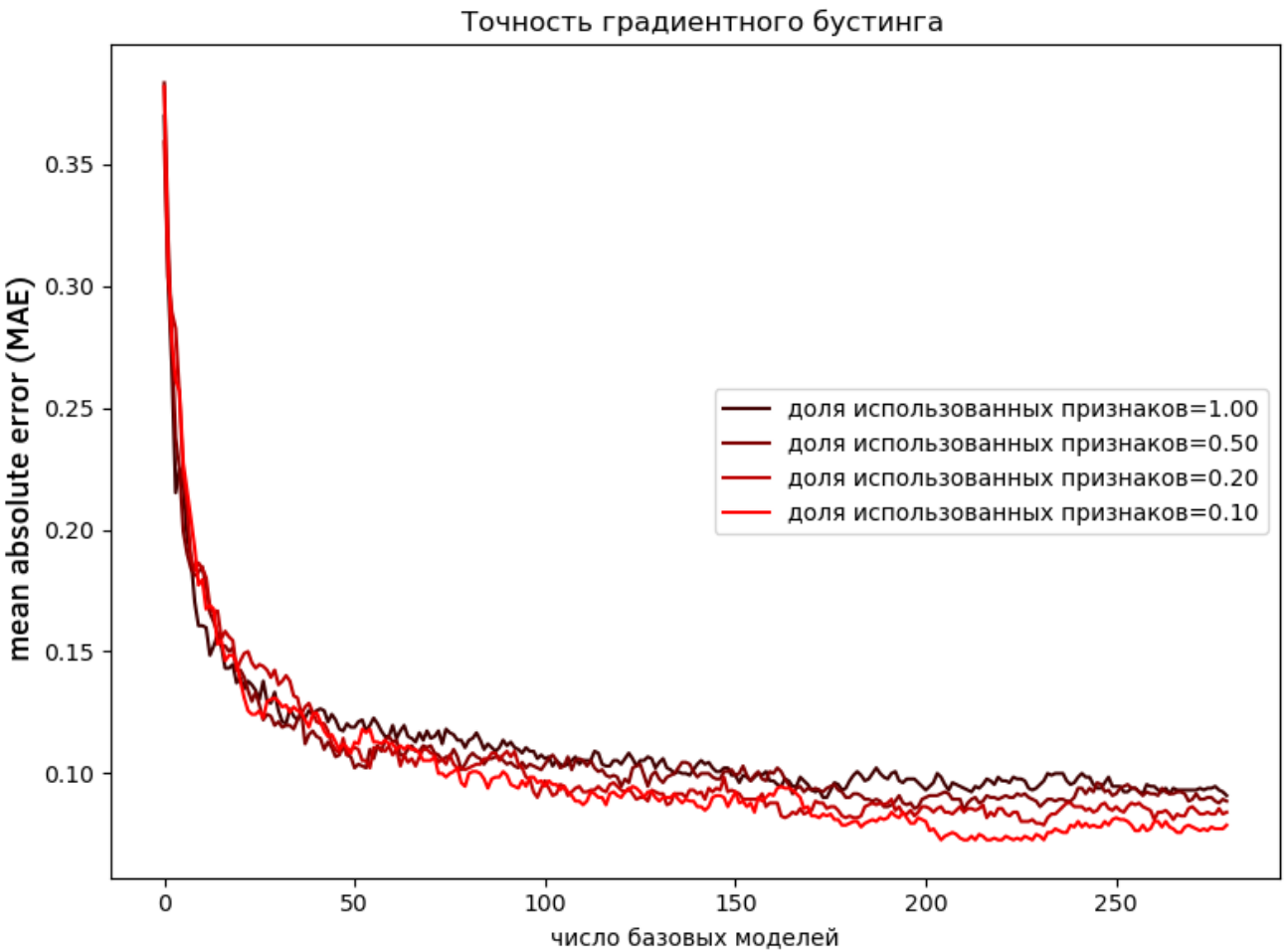
Пример: использование сжатия



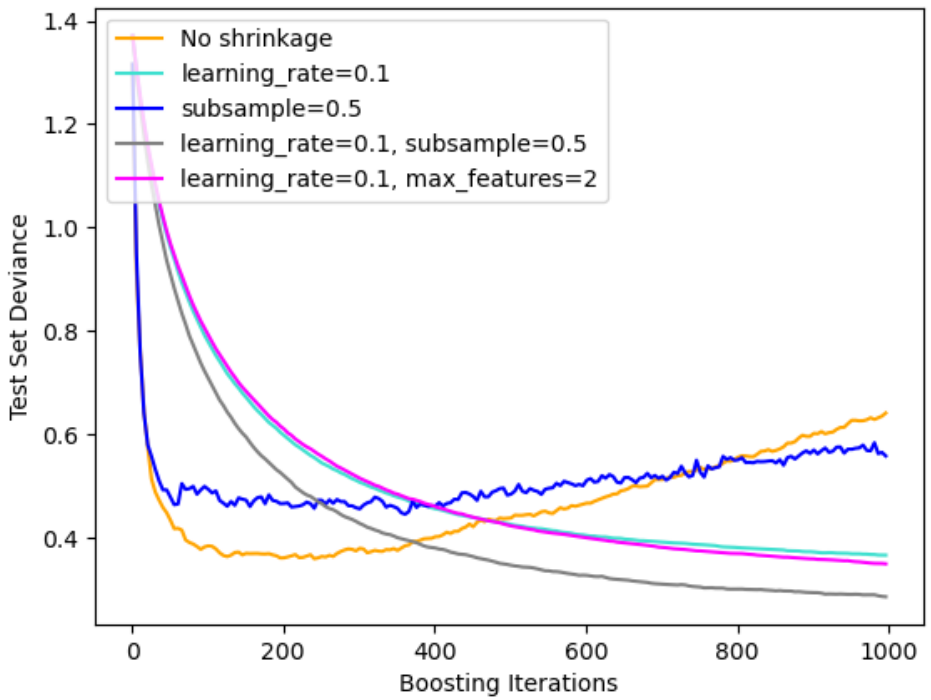
Пример: обучение на части объектов



Пример: обучение на части признаков



Все настройки одновременно



- Настройка по α однозначна.
  - чем меньше, тем лучше (но вычислительно сложнее)
- Опт. доля используемых объектов и признаков неоднозначна.
  - нужна тщательная настройка по кросс-валидации

Локальная квадратичная аппроксимация

Квадратичная аппроксимация $\mathcal{L}$, используя $g(x) = \frac{\partial \mathcal{L}(G(x),y)}{\partial G}$, $h(x) = \frac{\partial^2 \mathcal{L}(G(x),y)}{\partial G^2}$:

Локальная квадратичная аппроксимация

Квадратичная аппроксимация $\mathcal{L}$, используя $g(x) = \frac{\partial \mathcal{L}(G(x),y)}{\partial G}$, $h(x) = \frac{\partial^2 \mathcal{L}(G(x),y)}{\partial G^2}$:

$$\mathcal{L}(G(x)+f(x),\, y) \approx \mathcal{L}(G(x),y) + g(x)f(x) + \frac{1}{2}h(x)\,(f(x))^2 =$$

$$\frac{1}{2}h(x)\left(f(x)+\frac{g(x)}{h(x)}\right)^2 + const(f(x))$$

$$\arg\min_{f(x)} \sum_{n=1}^{N} \frac{1}{2}h(x_n)\left(f(x_n)+\frac{g(x_n)}{h(x_n)}\right)^2 + const(f(x))$$

$$= \arg\min_{f(x)} \sum_{n=1}^{N} h(x_n)\left(f(x_n)+\frac{g(x_n)}{h(x_n)}\right)^2$$

Следовательно $f(x_n) \approx -g(x_n)/h(x_n)$ с весом $h(x_n)$.

- $h(x) \geq 0$ в окрестности локального минимума L.

Содержание

Преимущества решающих деревьев

Преимущества решающих деревьев:

- нелинейная модель с гибкой настройкой сложности
  - по глубине и др. критериям
- вычислительная эффективность прогнозов
- встроенный обзор признаков
- инвариантны к масштабу признаков
- инвариантны к монотонным преобразованиям признаков
- обладают универсальной применимостью к признакам разной природы
  - бинарные, вещественные, порядковые категориальные
  - категориальные->бинарные (one-hot) или вещественные (mean-value encoding)
  - категориальные->порядковые, упорядочив категории по $\overline{y}$ при условии категории
- позволяют вычислять важность признаков

Градиентный бустинг деревьев

Вход: обучающая выборка (x_n, y_n), $n = 1, 2, ...N$; ф-ция потерь $\mathcal{L}(f, y)$ и # базовых моделей M.

1. Начальная аппроксимация-константа:
   $G_0(x) = \arg\min_\gamma \sum_{n=1}^{N} \mathcal{L}(\gamma, y_n)$

Градиентный бустинг деревьев

Вход: обучающая выборка (x_n, y_n), $n = 1, 2, ...N$; ф-ция потерь $\mathcal{L}(f, y)$ и # базовых моделей M.

1. Начальная аппроксимация-константа:
   $G_0(x) = \arg\min_\gamma \sum_{n=1}^{N} \mathcal{L}(\gamma, y_n)$
2. Для каждого $m = 1, 2, ...M$:

Градиентный бустинг деревьев

Вход: обучающая выборка (x_n, y_n), $n = 1, 2, ...N$; ф-ция потерь $\mathcal{L}(f, y)$ и # базовых моделей M.

1. Начальная аппроксимация-константа: $G_0(x) = \arg\min_\gamma \sum_{n=1}^N \mathcal{L}(\gamma, y_n)$
2. Для каждого $m = 1, 2, ...M$:
   1. вычисляем градиенты $g_n = \frac{\partial \mathcal{L}(G_{m-\mathbf{1}}(x_n), y_n)}{\partial G}$

Градиентный бустинг деревьев

Вход: обучающая выборка (x_n, y_n), $n = 1, 2, ...N$; ф-ция потерь $\mathcal{L}(f, y)$ и # базовых моделей M.

1. Начальная аппроксимация-константа: $G_0(x) = \arg\min_\gamma \sum_{n=1}^N \mathcal{L}(\gamma, y_n)$
2. Для каждого $m = 1, 2, ...M$:
   1. вычисляем градиенты $g_n = \frac{\partial \mathcal{L}(G_{m-1}(x_n), y_n)}{\partial G}$
   2. настраиваем решающее дерево $f_m(\cdot)$ на $\{(x_n, -g_n)\}_{n=1}^N$, получаем разбиение пр-ва признаков $\{R_k\}_{k=1}^K$.

Градиентный бустинг деревьев

Вход: обучающая выборка (x_n, y_n), $n = 1, 2, ...N$; ф-ция потерь $\mathcal{L}(f, y)$ и # базовых моделей M.

1. Начальная аппроксимация-константа: $G_0(x) = \arg\min_\gamma \sum_{n=1}^N \mathcal{L}(\gamma, y_n)$
2. Для каждого $m = 1, 2, ...M$:
   1. вычисляем градиенты $g_n = \frac{\partial \mathcal{L}(G_{m-1}(x_n), y_n)}{\partial G}$
   2. настраиваем решающее дерево $f_m(\cdot)$ на $\{(x_n, -g_n)\}_{n=1}^N$, получаем разбиение пр-ва признаков $\{R_k\}_{k=1}^K$.
   3. для каждого прямоугольника R_k, $k = 1, 2, ...K$ пересчитываем прогнозы:

$$\gamma_k = \arg\min_{\gamma>0} \sum_{x_n \in R_k} \mathcal{L}(F_{m-1}(x_n) + \gamma, y_n)$$

Градиентный бустинг деревьев

Вход: обучающая выборка (x_n, y_n), $n = 1, 2, ...N$; ф-ция потерь $\mathcal{L}(f, y)$ и # базовых моделей M.

1. Начальная аппроксимация-константа: $G_0(x) = \arg\min_\gamma \sum_{n=1}^N \mathcal{L}(\gamma, y_n)$
2. Для каждого $m = 1, 2, ...M$:
   1. вычисляем градиенты $g_n = \frac{\partial \mathcal{L}(G_{m-1}(x_n), y_n)}{\partial G}$
   2. настраиваем решающее дерево $f_m(\cdot)$ на $\{(x_n, -g_n)\}_{n=1}^N$, получаем разбиение пр-ва признаков $\{R_k\}_{k=1}^K$.
   3. для каждого прямоугольника R_k, $k = 1, 2, ...K$ пересчитываем прогнозы:

$$\gamma_k = \arg\min_{\gamma>0} \sum_{x_n \in R_k} \mathcal{L}(F_{m-1}(x_n) + \gamma, y_n)$$

   4. обновляем $G_m(x) := G_{m-1}(x) + \sum_{k=1}^K \gamma_k \mathbb{I}[x \in R_k]$

Градиентный бустинг деревьев

Вход: обучающая выборка (x_n, y_n), $n = 1, 2, ...N$; ф-ция потерь $\mathcal{L}(f, y)$ и # базовых моделей M.

1. Начальная аппроксимация-константа: $G_0(x) = \arg\min_\gamma \sum_{n=1}^N \mathcal{L}(\gamma, y_n)$
2. Для каждого $m = 1, 2, ...M$:
   1. вычисляем градиенты $g_n = \frac{\partial \mathcal{L}(G_{m-1}(x_n), y_n)}{\partial G}$
   2. настраиваем решающее дерево $f_m(\cdot)$ на $\{(x_n, -g_n)\}_{n=1}^N$, получаем разбиение пр-ва признаков $\{R_k\}_{k=1}^K$.
   3. для каждого прямоугольника R_k, $k = 1, 2, ...K$ пересчитываем прогнозы:

$$\gamma_k = \arg\min_{\gamma>0} \sum_{x_n \in R_k} \mathcal{L}(F_{m-1}(x_n) + \gamma, y_n)$$

   4. обновляем $G_m(x) := G_{m-1}(x) + \sum_{k=1}^K \gamma_k \mathbb{I}[x \in R_k]$

Выход: композиция $G_M(x)$.

Градиентный бустинг деревьев

- Индивидуальная настройка прогноза в каждом R_j^m.
  - подбирать общий множитель ε_m уже не нужно
  - повышает гибкость настройки
- Охватываем взаимодействие K признаков, если
  - макс. глубина дерева K
  - либо макс. # листьев $K+1$
- Обычно подбирают $2 \leq K \leq 8$ по валидации.
- Англ. gradient boosting on decision trees (GBDT).
- Один из самых точных алгоритмов для неоднородных данных (признаки разной природы)
- Для однородных данных со структурой (текст, звук, изображения, видео) - лучше нейросети.

Случай $y \in \{1, 2, ...C\}$

Используем обобщение: один-против-всех, один-против-одного, коды, исправляющие ошибки.

Случай $y \in \{1, 2, ...C\}$

Используем обобщение: один-против-всех, один-против-одного, коды, исправляющие ошибки.
Альтернативно, можно оптимизировать $\mathcal{L}(G(x), y)$, $G(x) \in \mathbb{R}^C$.
Пример:

- $G(x) = \{p(y = c|x)\}_{c=1}^{C}$, y - one-hot закодированный класс,
- Решаем задачу C-мерной регрессии:
  - Минимизация потерь $\mathcal{L}(\cdot)$:

$$f_m(x_n) \approx -\frac{\partial \mathcal{L}(G_{m-1}(x_n), y_n)}{\partial G} \in \mathbb{R}^C$$

Максимизация качества $S(\cdot)$:

$$f_m(x_n) \approx \frac{\partial \mathcal{S}(G_{m-1}(x_n), y_n)}{\partial G} \in \mathbb{R}^C$$

Пример

$$G_{m-1}(x) = [p_1, ...p_C]$$

$$S(G_{m-1}(x), y) = \ln p(y|x) = \sum_{c=1}^{C} \mathbb{I}[y = c] \ln p_c$$

$$f_m(x_n) \approx \begin{pmatrix} \frac{1}{p_1}\mathbb{I}[y = 1|x] \\ \frac{1}{p_2}\mathbb{I}[y = 2|x] \\ \dots \\ \frac{1}{p_C}\mathbb{I}[y = C|x] \end{pmatrix}$$

p := p + $f_m(x)$, потом перенормировать.

Использование градиентного бустинга (регрессия)

```
from sklearn.ensemble import
                GradientBoostingRegressor
from sklearn.metrics import mean_absolute_error

X_train, X_test, Y_train, Y_test =
    get_demo_regression_data()
# инициализация (базовые модели—всегда деревья)
model = GradientBoostingRegressor(
    n_estimators=1000, # число базовых моделей
    learning_rate=0.1, # шаг обучения
    subsample=1.0,     # доля объектов для обучения
    max_features=1.0)  # доля признаков для обучения
model.fit(X_train, Y_train)   # обучение модели
Y_hat = model.predict(X_test) # прогнозирование
print(f'Средний модуль ошибки (MAE): \
   {mean_absolute_error(Y_test, Y_hat):.2f}')
```

Использование градиентного бустинга (класс-ция)

```
from sklearn.ensemble import GradientBoostingClassifier
from sklearn.metrics import accuracy_score
from sklearn.metrics import brier_score_loss

X_train, X_test, Y_train, Y_test =
    get_demo_classification_data()
model = GradientBoostingClassifier(n_estimators=1000,
    learning_rate=0.1, subsample=1.0, max_features=1.0)
model.fit(X_train, Y_train)   # обучение модели
Y_hat = model.predict(X_test) # построение прогнозов
print(f'Точность прогнозов: {100*accuracy_score(Y_test,
    Y_hat):.1f}%')

P_hat = model.predict_proba(X_test)  # вер-ти классов
loss = brier_score_loss(Y_test, P_hat[:,1])
print(f'Средняя ошибка прогноза вероятностей (по мере
    Бриера): {loss:.2f}')
```

Больше информации. Полный код.

Продвинутые реализации бустинга

- Продвинутые реализации бустинга:
  - CatBoost
    - разработано Яндексом, документация на русском
    - специальная обработка категориальных признаков
  - xgBoost
    - аппроксимация 2го порядка, дискретизация признаков
    - гибкая регуляризация деревьев: $L_0 + L_2$
    - деревья настраиваются на пользовательскую $\mathcal{L}$
  - LightGBM
    - ускорение: оптимизация на меньшем #объектов и признаков
- Эффективная реализация с параллелизацией на ядрах процессора и видеокарте.

Заключение

- Бустинг - линейная композиция последовательно настраиваемых алгоритмов.
- В редких случаях есть аналитическое решение (AdaBoost).
- В общем случае используется градиентный бустинг.
- Градиентный бустинг над решающими деревьями - один из самых точных методом ML.
  - менее гибок, чем нейросети, но
    - проще, не нужно подбирать архитектуру сети
    - меньше предобработки данных (универсальность деревьев)
    - интерпретируемый (можно считать важности признаков)
- Полезные надстройки:
  - сжатие (shrinking) - больше базовых алгоритмов
  - обучение на подвыборках объектов и признаков - повышение разнообразия
- Можно использовать квадратичную, а не линейную аппроксимацию.