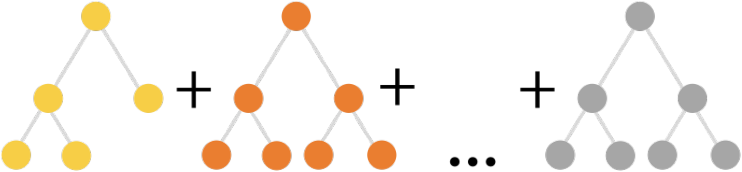
Бустинг

Виктор Китов

v.v.kitov@yandex.ru



Бустинг[1]

Строится линейная композиция:

$$G_M(x) = f_0(x) - c_1 f_1(x) - \dots - c_M f_M(x)$$

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

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

[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:

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

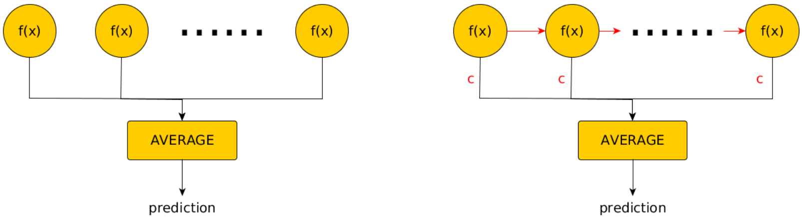
   - обновляем ансамбль:

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

3. Возвращаем $G_M(x)$.

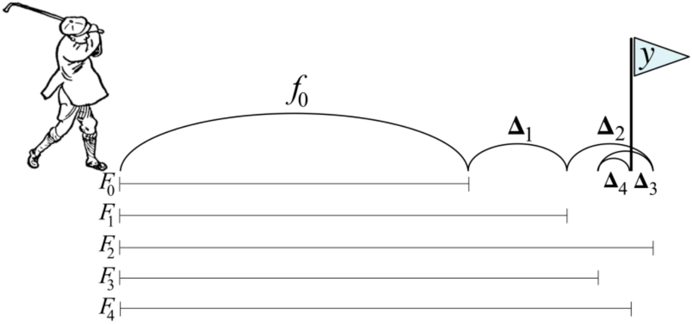
Бэггинг и бустинг

Бэггинг и бустинг



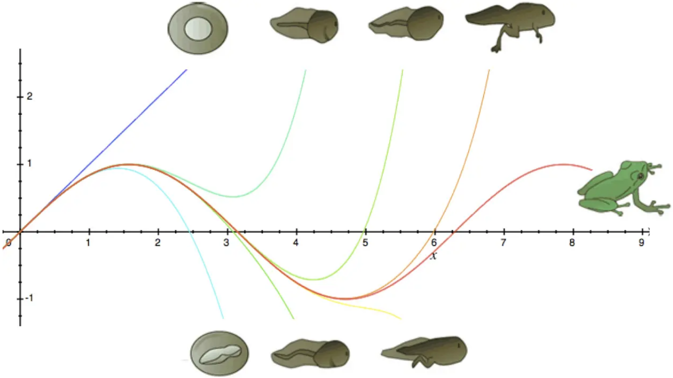
Аналогия с игрой в гольф

Аналогия с игрой в гольф



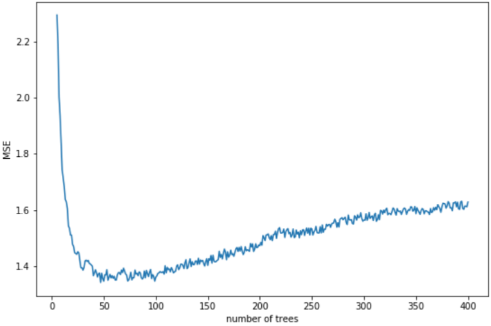
Аналогия с разложением в ряд Тейлора

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

1. Adaboost
2. Градиентный бустинг
3. Расширения
4. Градиентный бустинг деревьев

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 <u>взвешенной</u> обучающей выборке.
- настраивается $F_M(x) = \text{sign}\left(\sum_{m=1}^{M} c_m f_m(x)\right)$
- прогнозирование $\widehat{y}(x) = sign\{G_M(x)\}$
- 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 $m = 1, 2, \dots M$:

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

Вывод Adaboost

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

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

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

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

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

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:

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

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

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

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

- 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

Содержание

1. Adaboost
2. Градиентный бустинг
3. Расширения
4. Градиентный бустинг деревьев

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.

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

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

$$\begin{aligned}
&\arg\min_{f(x)} \sum_{n=1}^{N} \mathcal{L}(G(x_n) - f(x_n), y_n) \\
&\approx \arg\min_{f(x)} \sum_{n=1}^{N} \mathcal{L}(G(x_n), y_n) - g(x_n)f(x_n) \\
&= \arg\min_{f(x)} \sum_{n=1}^{N} -g(x_n)f(x_n) = \arg\max_{f(x)} \sum_{n=1}^{N} g(x_n)f(x_n)
\end{aligned}$$

=> $f(x)$ должна настраиваться на $g(x)$, т.к.

$$\arg\max_{f:\|f\|\le\|g\|} \langle f, g\rangle = g$$

Пример: регрессия

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

Пример: регрессия

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

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

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

Пример: классификация

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

Пример: классификация

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

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

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

Алгоритм градиентного бустинга

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

1. Настраиваем начальную модель $G_0(x)$

Алгоритм градиентного бустинга

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

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

Алгоритм градиентного бустинга

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

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

Алгоритм градиентного бустинга

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

1. Настраиваем начальную модель $G_0(x)$
2. Для каждого $m = 1, 2, ...M$:
   1. вычисляем градиенты: $g_n = \frac{\partial \mathcal{L}(G, y_n)}{\partial G}|_{G_n = G_{m-1}(x_n)}$
   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_n, y_n), $n = 1, 2, ...N$; функция потерь $\mathcal{L}(f, y)$ и число базовых моделей M.

1. Настраиваем начальную модель $G_0(x)$
2. Для каждого $m = 1, 2, ...M$:
   1. вычисляем градиенты: $g_n = \frac{\partial \mathcal{L}(G, y_n)}{\partial G}|_{G_n = G_{m-\mathbf{1}}(x_n)}$
   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_n, y_n), $n = 1, 2, ...N$; функция потерь $\mathcal{L}(f, y)$ и число базовых моделей M.

1. Настраиваем начальную модель $G_0(x)$
2. Для каждого $m = 1, 2, ...M$:
   1. вычисляем градиенты: $g_n = \frac{\partial \mathcal{L}(G, y_n)}{\partial G}|_{G_n = G_{m-1}(x_n)}$
   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_n, y_n), $n = 1, 2, \dots N$; функция потерь $\mathcal{L}(f, y)$ и число базовых моделей M.

1. Настраиваем начальную модель $G_0(x)$
2. Для каждого $m = 1, 2, \dots M$:
    1. вычисляем градиенты: $g_n = \frac{\partial \mathcal{L}(G, y_n)}{\partial G}\Big|_{G_n = G_{m-1}(x_n)}$
    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

1. Adaboost
2. Градиентный бустинг
3. Расширения
4. Градиентный бустинг деревьев

Сжатие, обучение на подвыборках

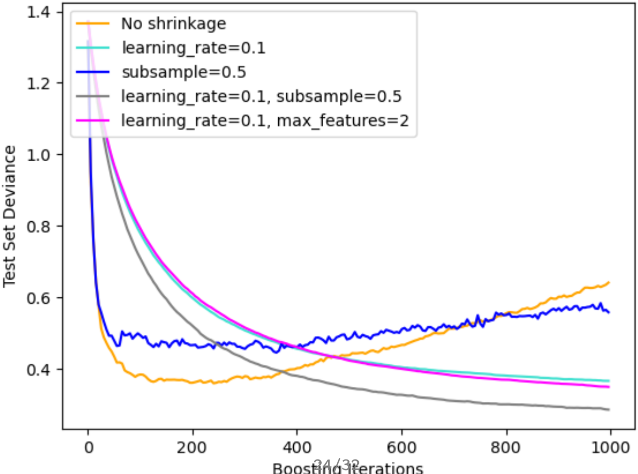
- Перенастройка линейной регрессией весов по признакам $f_1(x), ...f_M(x)$.
- Сжатие шага (shrinkage):

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

  - $\alpha \downarrow \implies M \uparrow$ $(\alpha M \approx const)$
  - $\alpha \in (0, 1]$ - 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
  - сэмплирование объектов позволяет считать out-of-bag оценки качества
  - ускоряет настройку
  - повышает разнообразие $f_m(x)$ и точность композиции.

Эффект сжатия и обучения на подвыборках

Эффект сжатия и обучения на подвыборках



Локальная квадратичная аппроксимация

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

Локальная квадратичная аппроксимация

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

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

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

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

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

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

1. Adaboost
2. Градиентный бустинг
3. Расширения
4. Градиентный бустинг деревьев

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 $g_n = \frac{\partial \mathcal{L}(G, y_n)}{\partial G}|_{G=G_{m-1}(x_n)}$

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 $g_n = \frac{\partial\mathcal{L}(G, y_n)}{\partial G}|_{G=G_{m-1}(x_n)}$
   2. настраиваем решающее дерево $f_m(\cdot)$ на $\{(x_n, g_n)\}_{n=1}^N$, получаем разбиение пр-ва признаков $\{R_j^m\}_{j=1}^{J_m}$.

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 $g_n = \frac{\partial \mathcal{L}(G, y_n)}{\partial G}\Big|_{G=G_{m-1}(x_n)}$
   2. настраиваем решающее дерево $f_m(\cdot)$ на $\{(x_n, g_n)\}_{n=1}^N$, получаем разбиение пр-ва признаков $\{R_j^m\}_{j=1}^{J_m}$.
   3. для каждого прямоугольника R_j^m, $j = 1, 2, ...J_m$ пересчитываем прогнозы:

$$\gamma_j^m = \arg\min_\gamma \sum_{x_n \in R_j^m} \mathcal{L}(F_{m-1}(x_n) - \gamma,\, y_n)$$

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 $g_n = \frac{\partial \mathcal{L}(G, y_n)}{\partial G}\Big|_{G=G_{m-1}(x_n)}$
   2. настраиваем решающее дерево $f_m(\cdot)$ на $\{(x_n, g_n)\}_{n=1}^N$, получаем разбиение пр-ва признаков $\{R_j^m\}_{j=1}^{J_m}$.
   3. для каждого прямоугольника R_j^m, $j = 1, 2, ...J_m$ пересчитываем прогнозы:
$$\gamma_j^m = \arg\min_\gamma \sum_{x_n \in R_j^m} \mathcal{L}(F_{m-1}(x_n) - \gamma,\, y_n)$$
   4. обновляем $G_m(x) = G_{m-1}(x) - \sum_{j=1}^{J_m} \gamma_j^m \mathbb{I}[x \in R_j^m]$

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 $g_n = \frac{\partial \mathcal{L}(G, y_n)}{\partial G}\big|_{G=G_{m-1}(x_n)}$
   2. настраиваем решающее дерево $f_m(\cdot)$ на $\{(x_n, g_n)\}_{n=1}^N$, получаем разбиение пр-ва признаков $\{R_j^m\}_{j=1}^{J_m}$.
   3. для каждого прямоугольника R_j^m, $j = 1, 2, ...J_m$ пересчитываем прогнозы:
   $$\gamma_j^m = \arg\min_\gamma \sum_{x_n \in R_j^m} \mathcal{L}(F_{m-1}(x_n) - \gamma,\, y_n)$$
   4. обновляем $G_m(x) = G_{m-1}(x) - \sum_{j=1}^{J_m} \gamma_j^m \mathbb{I}[x \in R_j^m]$

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 подбиарют $2 \le K \le 8$ по валидации.
- Англ. gradient boosting on decision trees (GBDT).
- Один из самых точных алгоритмов для неоднородных данных (признаки разной природы)
- Для однородных данных (текст, звук, изображения, видео) - нейросети, обычно, лучше.

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
- $S(G(x), y) = G(x)^T y = p(y = \text{correct class}|x)$ - рейтинг
- Решаем задачу C-мерной регрессии:

$$\sum_{n=1}^{N}(f_m(x_n) - g_n)^2 \to \min_{f_m}, \quad g_n = \frac{\partial \mathcal{S}(G, y_n)}{\partial G}|_{r=G_{m-1}(x_n)} \in \mathbb{R}^C$$

- можем использовать квадратичную аппроксимацию.
    - для быстрого обращения $\left(\frac{\partial^2}{\partial G^2}\mathcal{L}(G, y)\Big|_{G=G(x)}\right)$ можно использовать квадратичную аппроксимацию.

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 (subsampling) - повышение разнообразия
- Можно использовать квадратичную, а не линейную аппроксимацию.