Градиентный бустинг

Задача восстановления зависимости $y\colon X \to Y$ по точкам *обучающей выборки* (x_i, y_i), $y_i = y(x_i)$, $i = 1, \ldots, \ell$.

Определение

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

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

где $C\colon \mathbb{R} \to Y$ — *решающее правило*, $\alpha_t \geqslant 0$.

- **Пример 1:** классификация на 2 класса, $Y = \{-1, +1\}$;
  $C(b) = \operatorname{sign}(b)$, $a(x) = \operatorname{sign}\big(b(x)\big)$,
  $b\colon X \to \mathbb{R}$ — 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 $\mathscr{L}(b, y)$:

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

Ищем вектор $u = \big(b(x_i)\big)_{i=1}^{\ell}$ из R^{ℓ}, минимизирующий $Q(\alpha, b)$.
$u_{T-1} = \big(u_{T-1,i}\big)_{i=1}^{\ell}$ — текущее приближение вектора u
$u_T = \big(u_{T,i}\big)_{i=1}^{\ell}$ — следующее приближение вектора u

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

$$u_0 := \text{начальное приближение};$$
$$u_{T,i} := u_{T-1,i} - \alpha g_i, \quad i = 1, \ldots, \ell;$$

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

- Добавление базового алгоритма b_T:

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

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

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

Вход: обучающая выборка X^ℓ; параметр T;
Выход: базовые алгоритмы и их веса $\alpha_t b_t$, $t = 1, \ldots, T$;

1: инициализация: $u_i := 0$, $i = 1, \ldots, \ell$;
2: **для всех** $t = 1, \ldots, T$
3: найти базовый алгоритм, приближающий градиент:
$$b_t := \arg\min_b \sum_{i=1}^{\ell} \big(b(x_i) + \mathscr{L}'(u_i, y_i)\big)^2;$$
4: решить задачу одномерной минимизации:
$$\alpha_t := \arg\min_{\alpha>0} \sum_{i=1}^{\ell} \mathscr{L}\big(u_i + \alpha b_t(x_i), y_i\big);$$
5: обновить значения композиции на объектах выборки:
$u_i := u_i + \alpha_t b_t(x_i)$; $i = 1, \ldots, \ell$;

Известно, что рандомизации могут повышать качество композиции за счёт повышения различности базовых алгоритмов (на этом основаны bagging, RF, RSM)

Идея:
на шагах 3–5 использовать не всю выборку X^ℓ,
а случайную подвыборку с повторениями, как в бэггинге.

Преимущества:

- улучшается качество
- улучшается сходимость
- уменьшается время обучения

Исторически первый вариант бустинга (1995).
Задача классификации на два класса, $Y = \{-1, +1\}$,

$\mathscr{L}(b(x_i), y_i) = e^{-b(x_i)y_i}$ — экспоненциальная функция потерь, убывающая функция отступа $M_i = b(x_i)y_i$

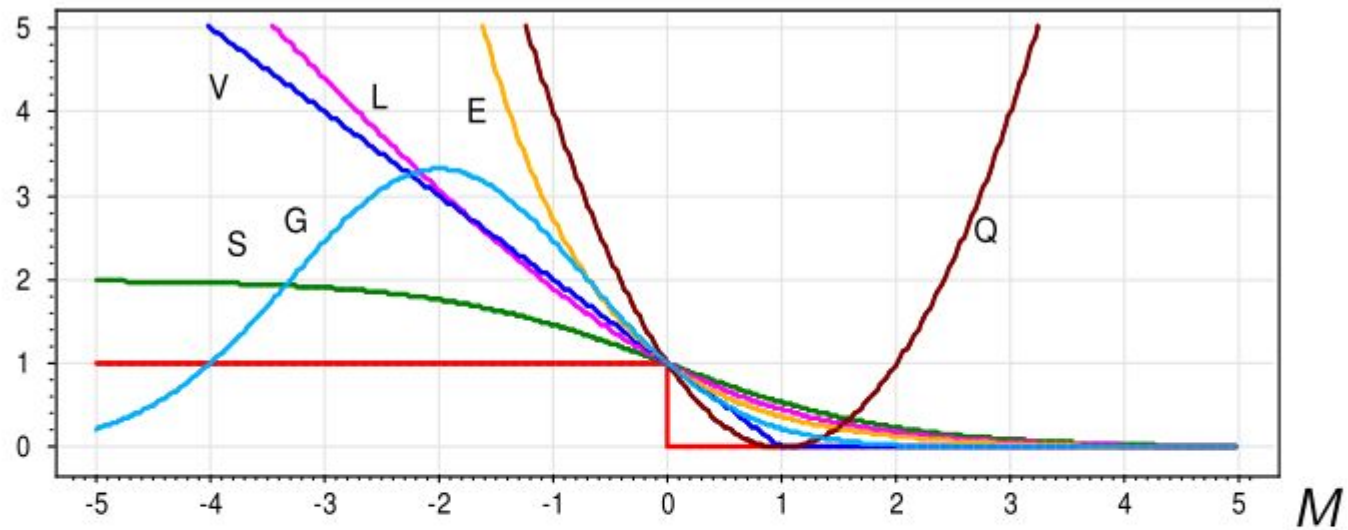
Преимущества:

- для обучения b_t на каждом шаге t решается стандартная задача минимизации взвешенного эмпирического риска
- задача оптимизации α_t решается аналитически

Недостаток:

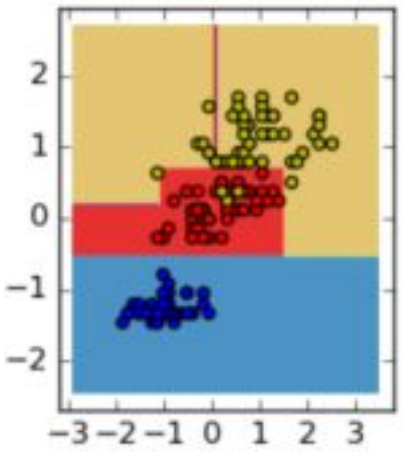
- AdaBoost слишком чувствителен к выбросам из-за экспоненциального роста функции потерь при $M_i < 0$

Функции потерь $\mathscr{L}(M)$ в задачах классификации на два класса

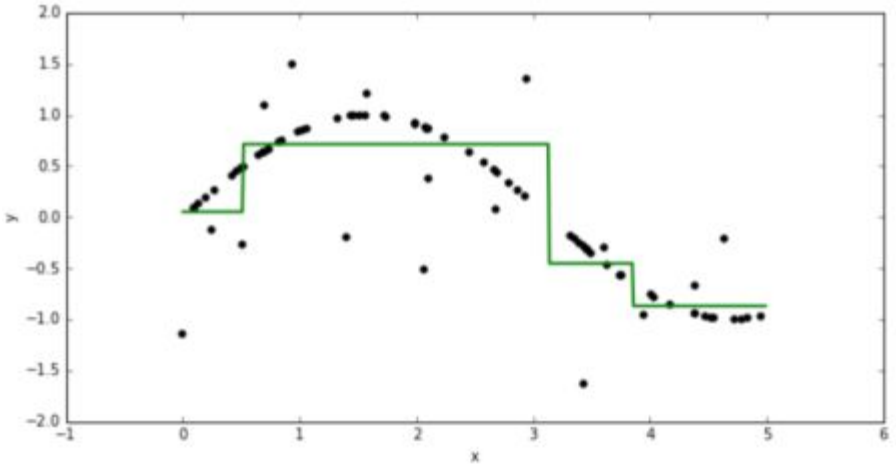


$E(M) = e^{-M}$ — экспоненциальная (AdaBoost);
$L(M) = \log_2(1 + e^{-M})$ — логарифмическая (LogitBoost);
$G(M) = \exp\big(-cM(M + s)\big)$ — гауссовская (BrownBoost);
$Q(M) = (1 - M)^2$ — квадратичная;
$S(M) = 2(1 + e^{M})^{-1}$ — сигмоидная;
$V(M) = (1 - M)_+$ — кусочно-линейная (SVM);

Градиентный бустинг над решающими деревьями



Классификация



Регрессия

Решающее дерево — это кусочно-постоянная функция:

$$b(x) = \sum_{t=1}^{T} \alpha_t [x \in \Omega_t],$$

где T — число листьев,
Ω_t — область t-го листа,
α_t — прогноз в t-м листе.

Решающее дерево разбивает пространство объектов на области $\Omega_1, \ldots, \Omega_T$.

- $$u_N(x) = u_{N-1}(x) + b(x)$$

$$b(x) = \sum_{t=1}^{T} \alpha_t \left[x \in \Omega_t\right]$$

$$u_N(x) = u_{N-1}(x) + \sum_{t=1}^{T} \alpha_t \left[x \in \Omega_t\right]$$

- $$u_N(x) = u_{N-1}(x) + \sum_{t=1}^{T} \alpha_t [x \in \Omega_t]$$

$$\sum_{i=1}^{l} L\left(y_i, u_{N-1}(x) + \sum_{t=1}^{T} \alpha_t [x \in \Omega_t]\right) \to \min_{\alpha_1,\ldots,\alpha_T}$$

$$\alpha_t = \arg\min_{\alpha>0} \underbrace{\sum_{x_i \in \Omega_t} \mathscr{L}\left(u_{t-1,i} + \alpha, y_i\right)}_{\text{суммарная потеря в } t\text{-м листе}}.$$

Оптимизация прогнозов в листьях:

$$\alpha_t = \arg\min_{\alpha>0} \sum_{x_i \in \Omega_t} \mathscr{L}\left(u_{t-1,i} + \alpha, y_i\right).$$

Для некоторых функций потерь решение находится аналитически:

- средний квадрат ошибок, MSE, $\mathscr{L}(b, y) = (b - y)^2$:

$$\alpha_t = \frac{1}{|\Omega_t|} \sum_{x_i \in \Omega_t} \left(y_i - u_{t-1,i}\right).$$

- средняя абсолютная ошибка, MAE, $\mathscr{L}(b, y) = |b - y|$:

$$\alpha_t = \operatorname{median}_{x_i \in \Omega_t} \left\{y_i - u_{t-1,i}\right\}.$$

В общем случае аналитического решения нет.

- Градиентный бустинг — наиболее общий из всех бустингов:
  — произвольная функция потерь
  — произвольное пространство оценок R
  — подходит для регрессии, классификации, ранжирования
- Важное открытие середины 90-х: обобщающая способность бустинга не ухудшается с ростом сложности T
- Стохастический вариант SGB — лучше и быстрее
- Градиентный бустинг над решающими деревьями часто работает лучше, чем случайный лес
- Технология Yandex.MatrixNet — это градиентный бустинг над «небрежными» решающими деревьями ODT
  (ODT — oblivious decision tree)

Вопрос

Для чего отдельные деревья в случайном лесу обучаются по подвыборкам объектов? Выберите основную причину.

- Чтобы деревья не были одинаковыми
- Чтобы деревья не были переобученными
- Чтобы сократить время обучения

Вопрос

Какие из этих утверждений относятся к методу градиентного бустинга над решающими деревьями?

- Деревья строятся независимо

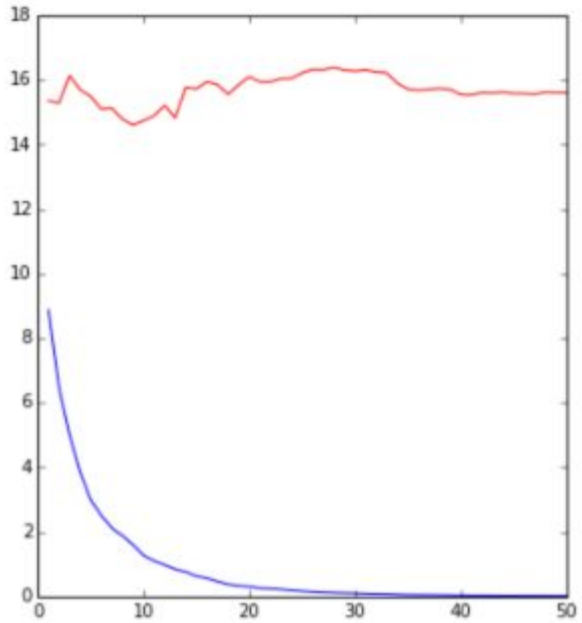
- Обучение отдельных деревьев на подвыборках хорошо сказывается на качестве композиции

- Деревья, как правило, делают небольшой глубины

- Деревья строятся последовательно, обучение следующего дерева зависит от ошибок уже построенной композиции

- Деревья, как правило, делают глубокими

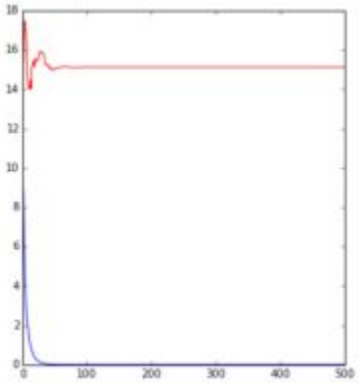
Ошибка в зависимости от числа деревьев



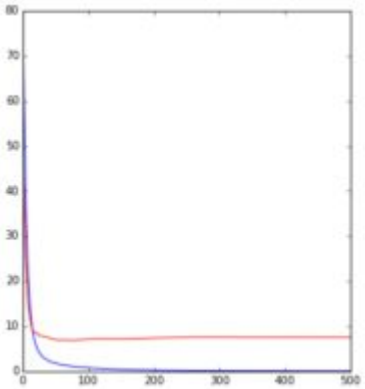
$$u_{T,i} := u_{T-1,i} + \alpha b_T(x_i), \quad i = 1, \ldots, \ell$$

$\alpha \in (0; 1]$

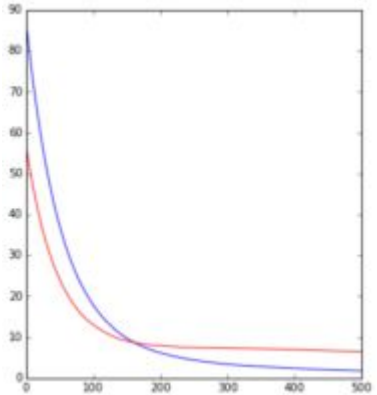
Качество бустинга



α=1

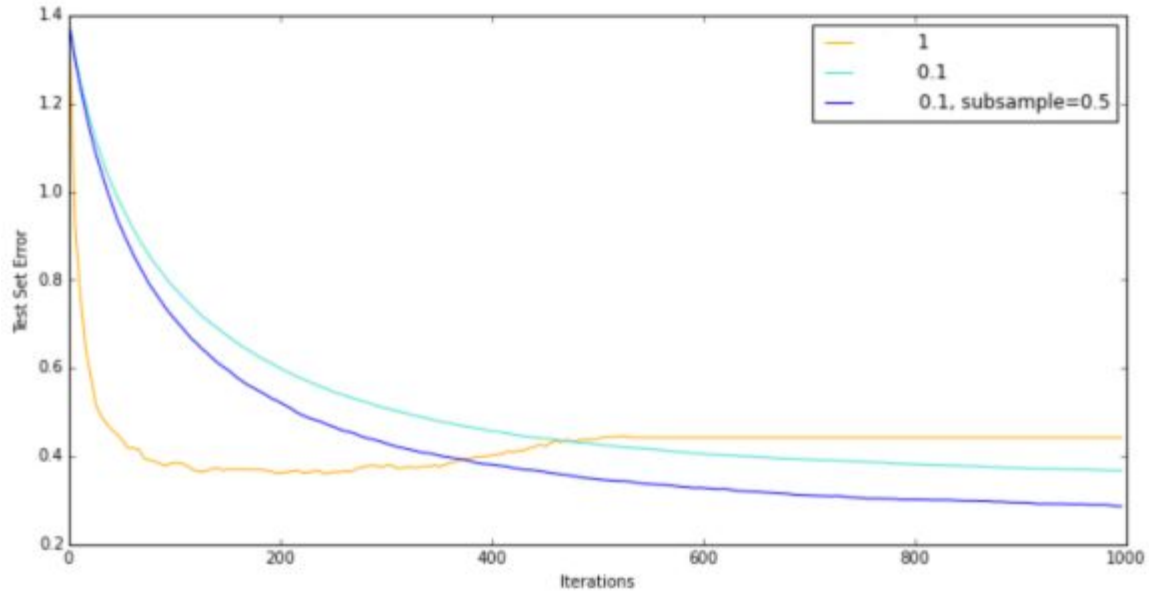


α=0.1



α=0.01

Стохастический градиентный бустинг



Gradient Boosting for classification.

GB builds an additive model in a forward stage-wise fashion; it allows for the optimization of arbitrary differentiable loss functions. In each stage `n_classes_` regression trees are fit on the negative gradient of the binomial or multinomial deviance loss function. Binary classification is a special case where only a single regression tree is induced.

Read more in the User Guide.

Parameters:

loss : {'deviance', 'exponential'}, optional (default='deviance')

loss function to be optimized. 'deviance' refers to deviance (= logistic regression) for classification with probabilistic outputs. For loss 'exponential' gradient boosting recovers the AdaBoost algorithm.

learning_rate : float, optional (default=0.1)

learning rate shrinks the contribution of each tree by learning_rate. There is a trade-off between learning_rate and n_estimators.

n_estimators : int (default=100)

The number of boosting stages to perform. Gradient boosting is fairly robust to over-fitting so a large number usually results in better performance.

max_depth : integer, optional (default=3)

maximum depth of the individual regression estimators. The maximum depth limits the number of nodes in the tree. Tune this parameter for best performance; the best value depends on the interaction of the input variables.

criterion : string, optional (default="friedman_mse")

The function to measure the quality of a split. Supported criteria are "friedman_mse" for the mean squared error with improvement score by Friedman, "mse" for mean squared error, and "mae" for the mean absolute error. The default value of "friedman_mse" is generally the best as it can provide a better approximation in some cases.

New in version 0.18.

min_samples_split : int, float, optional (default=2)

The minimum number of samples required to split an internal node:

- If int, then consider min_samples_split as the minimum number.
- If float, then min_samples_split is a percentage and ceil(min_samples_split * n_samples) are the minimum number of samples for each split.

Changed in version 0.18: Added float values for percentages.

min_samples_leaf : int, float, optional (default=1)

The minimum number of samples required to be at a leaf node:

- If int, then consider min_samples_leaf as the minimum number.
- If float, then min_samples_leaf is a percentage and ceil(min_samples_leaf * n_samples) are the minimum number of samples for each node.

Changed in version 0.18: Added float values for percentages.

min_weight_fraction_leaf : float, optional (default=0.)

The minimum weighted fraction of the sum total of weights (of all the input samples) required to be at a leaf node. Samples have equal weight when sample_weight is not provided.

subsample : float, optional (default=1.0)

The fraction of samples to be used for fitting the individual base learners. If smaller than 1.0 this results in Stochastic Gradient Boosting. subsample interacts with the parameter n_estimators. Choosing subsample < 1.0 leads to a reduction of variance and an increase in bias.

max_features : int, float, string or None, optional (default=None)

The number of features to consider when looking for the best split:

- If int, then consider max_features features at each split.
- If float, then max_features is a percentage and int(max_features * n_features) features are considered at each split.
- If “auto”, then max_features=sqrt(n_features).
- If “sqrt”, then max_features=sqrt(n_features).
- If “log2”, then max_features=log2(n_features).
- If None, then max_features=n_features.

Choosing max_features < n_features leads to a reduction of variance and an increase in bias.

Note: the search for a split does not stop until at least one valid partition of the node samples is found, even if it requires to effectively inspect more than `max_features` features.

max_leaf_nodes : int or None, optional (default=None)

Grow trees with `max_leaf_nodes` in best-first fashion. Best nodes are defined as relative reduction in impurity. If None then unlimited number of leaf nodes.

min_impurity_split : float,

Threshold for early stopping in tree growth. A node will split if its impurity is above the threshold, otherwise it is a leaf.

Deprecated since version 0.19: `min_impurity_split` has been deprecated in favor of `min_impurity_decrease` in 0.19 and will be removed in 0.21. Use `min_impurity_decrease` instead.

min_impurity_decrease : float, optional (default=0.)

A node will be split if this split induces a decrease of the impurity greater than or equal to this value.

The weighted impurity decrease equation is the following:

```
N_t / N * (impurity - N_t_R / N_t * right_impurity
                    - N_t_L / N_t * left_impurity)
```

where `N` is the total number of samples, `N_t` is the number of samples at the current node, `N_t_L` is the number of samples in the left child, and `N_t_R` is the number of samples in the right child.

`N`, `N_t`, `N_t_R` and `N_t_L` all refer to the weighted sum, if `sample_weight` is passed.

New in version 0.19.

init : BaseEstimator, None, optional (default=None)

An estimator object that is used to compute the initial predictions. `init` has to provide `fit` and `predict`. If None it uses `loss.init_estimator`.

verbose : int, default: 0

Enable verbose output. If 1 then it prints progress and performance once in a while (the more trees the lower the frequency). If greater than 1 then it prints progress and performance for every tree.

warm_start : bool, default: False

When set to `True`, reuse the solution of the previous call to fit and add more estimators to the ensemble, otherwise, just erase the previous solution.

random_state : int, RandomState instance or None, optional (default=None)

If int, random_state is the seed used by the random number generator; If RandomState instance, random_state is the random number generator; If None, the random number generator is the RandomState instance used by np.random.