Как объединять модели

Сергей Николенко

Центр Речевых Технологий, 2012

Центр Речевых Технологий

Outline

Центр Речевых Технологий

Как объединять модели

- До сих пор мы разрабатывали (и потом ещё будем разрабатывать) модели, которые делают предсказания (в основном для задач регрессии и классификации).
- Таким образом, мы можем попробовать обучить сразу много разных моделей!
- Model selection – это о том, как выбрать из них лучшую.
- Но, может быть, можно не выбирать, а использовать все сразу?

Центр Речевых Технологий

Основные подходы

- Комитет: обучаем L разных моделей, а потом так или иначе усредняем-комбинируем их результаты.
- Альтернатива: обучаем L разных моделей, а потом обучаем отдельную модель о том, какую из них использовать для предсказания (например, дерево принятия решений).

Комбинация моделей и байесовское усреднение

- Начнём с самого простого – байесовского усреднения.
- Мы уже знаем, что такое комбинация моделей – например, линейная смесь гауссианов:

$$p(\mathbf{x}) = \sum_k \pi_k \mathcal{N}(\mathbf{x} \mid \boldsymbol{\mu}_k, \boldsymbol{\Sigma}_k).$$

- Если её обучать, мы обучим коэффициенты смеси, и результат будет порождён

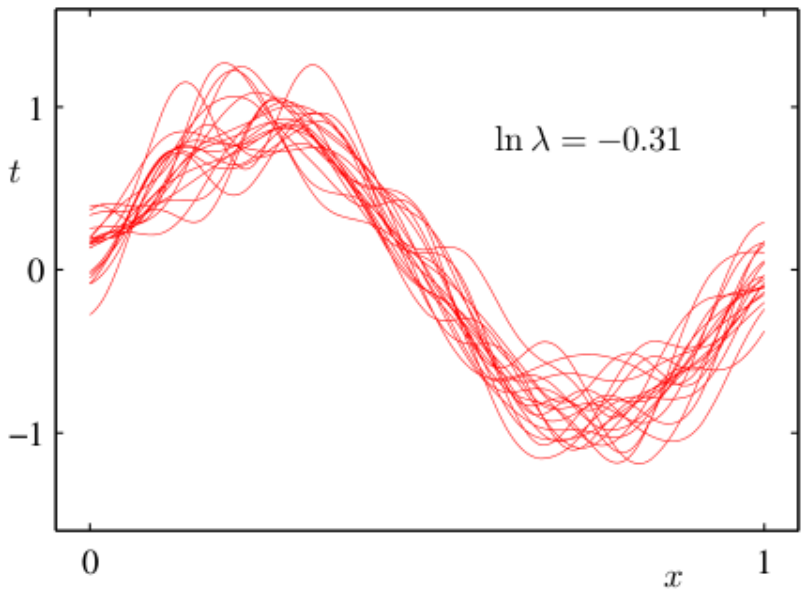
Комбинация моделей и байесовское усреднение

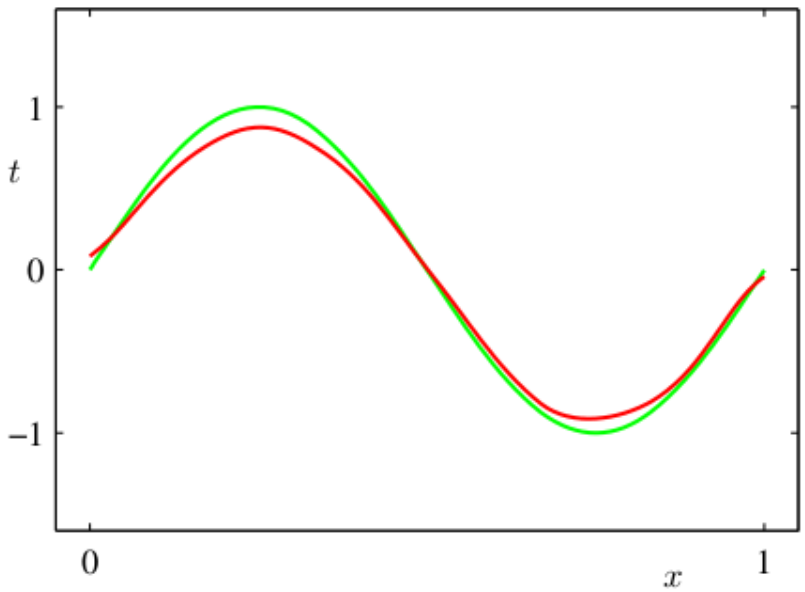
- А байесовское усреднение будет выглядеть как

$$p(\mathbf{X}) = \sum_{h=1}^{H} p(\mathbf{X} \mid h) p(h).$$

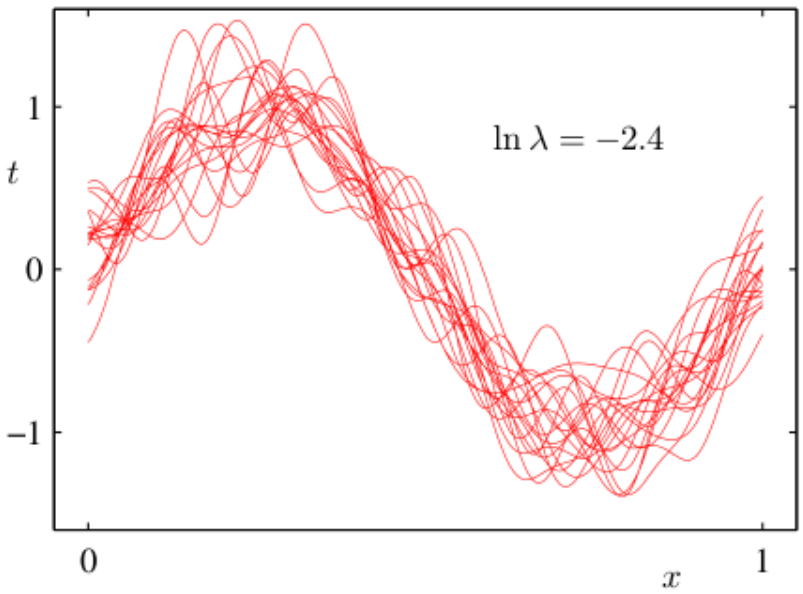
- Смысл теперь в том, что генерирует $\mathbf{X}$ только одна модель, но мы просто не знаем какая именно; когда $\mathbf{X}$, апостериорные распределения $p(h \mid \mathbf{X})$ сужаются, и мы выбираем то, что надо.
- Но метод очень простой: взять много моделей и усреднить.
- Где-то мы это уже видели...

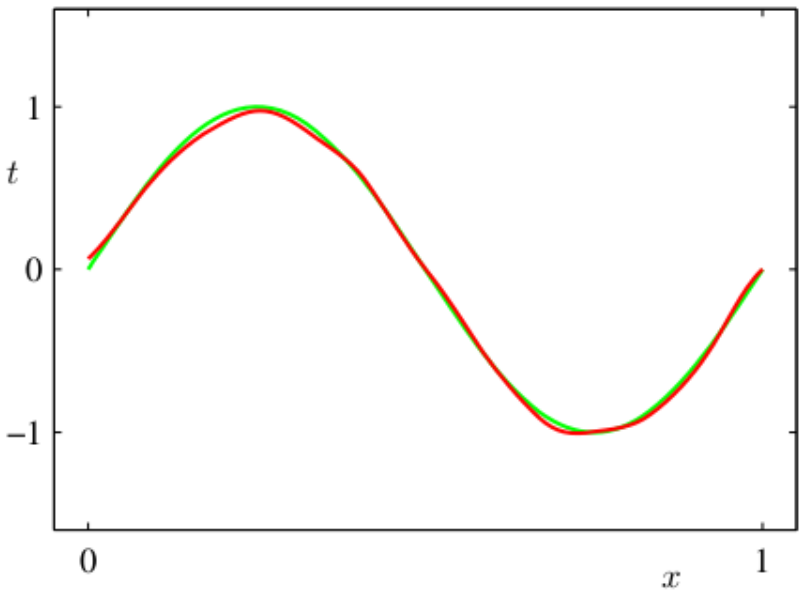
Где-то мы это уже видели





Где-то мы это уже видели





Центр Речевых Технологий

Bagging

- На этих картинках – модели с высоким bias, которые обучены по разным датасетам, сгенерированным одним и тем же распределением.
- И если их усреднить, получится как раз то, что надо.
- Но в жизни у нас нет возможности генерировать много датасетов: сколько данных есть, столько есть.
- Просто разбивать датасет на части – не поможет. Что делать?

Центр Речевых Технологий

Bagging

- Пусть у нас есть датасет $\mathbf{X} = \{\mathbf{x}_1, \ldots, \mathbf{x}_N\}$.
- Давайте сгенерируем много датасетов так: будем выбирать из $\mathbf{X}$ N точек с замещением, т.е. в новом датасете некоторые точки будут повторяться.
- Этот метод называется *bootstrapping*.

Bagging

- Мы сделаем так M датасетов размера N (с повторяющимися точками), потом обучим M моделей, а потом образуем из них комитет и будем предсказывать как

$$y(\mathbf{x}) = \frac{1}{M} \sum_{m=1}^{M} y_m(\mathbf{x}).$$

- Это называется *bagging* (bootstrap aggregation).
- На первый взгляд кажется, что это какая-то ерунда: мы пытаемся получить что-то из ничего...

Bagging

- Пусть настоящая функция, которую мы пытаемся предсказать – $h(\mathbf{x})$, т.е. модели наши выглядят как

$$y_m(\mathbf{x}) = h(\mathbf{x}) + \epsilon_m(\mathbf{x}).$$

- Тогда средняя ошибка модели – это

$$\mathrm{E}_{\mathbf{x}}\left[(y_m(\mathbf{x}) - h(\mathbf{x}))^2\right] = \mathrm{E}_{\mathbf{x}}\left[\epsilon_m(\mathbf{x})^2\right].$$

- И средняя ошибка тех моделей, которые мы обучаем, получается

$$E_{\text{avg}} = \frac{1}{M}\sum_{m=1}^{M}\mathrm{E}_{\mathbf{x}}\left[\epsilon_m(\mathbf{x})^2\right].$$

Bagging

- И средняя ошибка тех моделей, которые мы обучаем, получается

$$E_{\text{avg}} = \frac{1}{M} \sum_{m=1}^{M} \mathbf{E}_{\mathbf{x}} \left[\epsilon_m(\mathbf{x})^2 \right].$$

- А ошибка комитета – это

$$E_{\text{com}} = \mathbf{E}_{\mathbf{x}} \left[\left(\frac{1}{M} \sum_{m=1}^{M} \left(y_m(\mathbf{x}) - h(\mathbf{x}) \right) \right)^2 \right] =$$

$$= \mathbf{E}_{\mathbf{x}} \left[\left(\frac{1}{M} \sum_{m=1}^{M} \epsilon_m(\mathbf{x}) \right)^2 \right].$$

Bagging

- $E_{\text{avg}} = \frac{1}{M} \sum_{m=1}^{M} \mathbf{E}_{\mathbf{x}} \left[\epsilon_m(\mathbf{x})^2 \right]$,
  $E_{\text{com}} = \mathbf{E}_{\mathbf{x}} \left[\left(\frac{1}{M} \sum_{m=1}^{M} \epsilon_m(\mathbf{x}) \right)^2 \right]$.
- Если предположить, что $\mathbf{E}_{\mathbf{x}} \left[\epsilon_m(\mathbf{x}) \right] = 0$, и ошибки некоррелированы: $\mathbf{E}_{\mathbf{x}} \left[\epsilon_m(\mathbf{x}) \epsilon_l(\mathbf{x}) \right] = 0$, мы получим

$$E_{\text{com}} = \frac{1}{M} E_{\text{avg}}.$$

Bagging

- $E_{\text{com}} = \frac{1}{M} E_{\text{avg}}$!
- Это кажется совершенно невероятным. На самом деле всё не так хорошо – конечно, ошибки на самом деле сильно коррелированы.
- И, конечно, на самом деле обычно уменьшение ошибки не такое большое.
- Но можно показать, что в любом случае $E_{\text{com}} \leq E_{\text{avg}}$, так что хуже от этого не будет, а лучше стать может.

Центр Речевых Технологий

Outline

AdaBoost

- Следующая идея объединения моделей: предположим, что у нас есть возможность обучать какую-нибудь простую модель (weak learner) на подмножестве данных.
- Тогда можно делать так: обучили модель, посмотрели, где она хорошо работает, обучили следующую модель на том подмножестве, где она работает плохо, повторили.
- Этот метод называется *бустинг* (boosting).

Центр Речевых Технологий

AdaBoost

- AdaBoost: самый простой вариант. Рассмотрим задачу бинарной классификации; данные – это $\mathbf{x}_1, \ldots, \mathbf{x}_N$ с ответами $t_1, \ldots, t_N$, $t_i \in \{-1, 1\}$.
- Снабдим каждый тестовый пример весом w_i; изначально положим $w_i = \frac{1}{N}$.
- Предположим, что у нас есть процедура, которая обучает некоторый классификатор, выдающий $y(\mathbf{x}) \in \{-1, 1\}$, на *взвешенных* данных (минимизируя взвешенную ошибку).

AdaBoost

- Тогда в алгоритме AdaBoost мы инициализируем $w_n^{(1)} := 1/N$, а потом для $m = 1..M$:
  1. обучаем классификатор $y_m(\mathbf{x})$, который минимизирует функцию ошибки
  $$J_m = \sum_{n=1}^{N} w_n^{(m)} \left[y_m(\mathbf{x}_n) \neq t_n \right];$$
  2. вычисляем
  $$\epsilon_m = \frac{\sum_{n=1}^{N} w_n^{(m)} \left[y_m(\mathbf{x}_n) \neq t_n \right]}{\sum_{n=1}^{N} w_n^{(m)}}, \quad \alpha_m = \ln\left(\frac{1-\epsilon_m}{\epsilon_m} \right);$$
  3. пересчитываем новые веса
  $$w_n^{(m+1)} = w_n^{(m)} e^{\alpha_m \left[y_m(\mathbf{x}_n) \neq t_n \right]}.$$
- После обучения предсказываем как $Y_M(\mathbf{x}) = \operatorname{sign}\left(\sum_{m=1}^{M} \alpha_m y_m(\mathbf{x}) \right)$.

AdaBoost

- Смысл именно такой, как мы говорили: сначала тренируем абстрактно лучший классификатор. Потом увеличиваем веса неправильно классифицированным примерам, обучаем новый классификатор, и т.д.

Weak learners: деревья принятия решений

- А что за weak learners применяются в реальных приложениях?
- Обычно бустинг применяется, когда есть набор уже посчитанных фич (посчитанных из каких-то более сложных моделей), и нужно объединить их в единую модель.
- Часто слабые классификаторы совершенно тупые: берём одну координату и ищем по ней оптимальное разбиение.
- Могут быть чуть посложнее: деревья принятия решений.

Weak learners: деревья принятия решений

- Дерево принятия решений — это дерево. На нём есть метки:
  - в узлах, не являющиеся листьями: атрибуты (фичи), по которым различаются случаи;
  - в листьях: значения целевой функции;
  - на рёбрах: значения атрибута, из которого исходит ребро.
- Чтобы классифицировать новый случай, нужно спуститься по дереву до листа и выдать соответствующее значение.

Weak learners: деревья принятия решений

- Конечно, перебрать все деревья нельзя, их строят жадно.
  1. Выбираем очередной атрибут Q, помещаем его в корень.
  2. Выбираем оптимальное разбиение по атрибуту. Для всех интервалов разбиения:
     - оставляем из тестовых примеров только те, у которых значение атрибута Q попало в этот интервал;
     - рекурсивно строим дерево в этом потомке.
- Остались три вопроса:
  1. как проводить разбиение?
  2. как выбирать новый атрибут?
  3. когда останавливаться?

Weak learners: деревья принятия решений

- Если атрибут бинарный или дискретный с небольшим числом значений, разбиение тривиальное (просто по значениям).
- Если непрерывный – можно брать просто среднее арифметическое (тем самым минимизируя сумму квадратов).
- Выбирают атрибут, оптимизируя целевую функцию. Для задачи регрессии просто минимизируем среднеквадратическую ошибку по отношению к текущему предсказателю

$$y_\tau = \frac{1}{|\mathbf{X}_\tau|} \sum_{\mathbf{x}_n \in \mathbf{X}_\tau} t_n.$$

Weak learners: деревья принятия решений

- Предположим, что мы решаем задачу классификации на K классов.
- Тогда «сложность» подмножества данных $\mathbf{X}_\tau$ относительно целевой функции $f(\mathbf{x}) : \mathbf{X} \to \{1, \ldots, K\}$ характеризуется *перекрёстной энтропией*:

$$Q(\mathbf{X}_\tau) = \sum_{k=1}^{K} p_{\tau,k} \ln p_{\tau,k}.$$

- Иногда ещё используют *индекс Джини* (Gini index): $G(\mathbf{X}_\tau) = \sum_{k=1}^{K} p_{\tau,k}(1 - p_{\tau,k})$.

Weak learners: деревья принятия решений

- Когда останавливаться? Недоучиться плохо и переучиться плохо.
- Останавливаться, когда ошибка перестанет меняться, тоже плохо (она может опять начать меняться ниже).
- Поэтому делают так: выращивают большое дерево, чтобы наверняка, а потом *обрезают* его (pruning): поддерево τ схлопывают в корень, а правило предсказания в корне считают как $y_\tau = \frac{1}{|\mathbf{X}_\tau|} \sum_{\mathbf{x}_n \in \mathbf{X}_\tau} t_n$.
- Обрезают, оптимизируя функцию ошибки с регуляризатором: $\sum_{\tau=1}^{|T|} Q(\mathbf{X}_\tau) + \lambda |T|$ (для классификаторов здесь можно использовать долю ошибок классификации).

Теоретические свойства AdaBoost

- Изначально, когда AdaBoost придумали [Freund, Shapire, 1997], мотивация была такая: предположим, что ошибка каждого слабого классификатора h_t не превышает $\epsilon_t = \frac{1}{2} - \gamma_t$.
- Тогда можно показать, что окончательная ошибка не превосходит

$$\prod_t \left(2\sqrt{\epsilon_t(1-\epsilon_t)}\right) = \prod_t \sqrt{1-4\gamma_t^2} \leq e^{-2\sum_t \gamma_t^2}.$$

- Однако на самом деле гарантий на γ_t обычно нету, и практические результаты AdaBoost лучше, чем можно было бы ожидать из этой оценки.

Теоретические свойства AdaBoost

- Основная идея [Friedman et al., 2000]: давайте определим экспоненциальную ошибку

$$E = \sum_{n=1}^{N} e^{-t_n f_m(\mathbf{x}_n)},$$

где f_m – линейная комбинация базовых классификаторов:

$$f_m(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \sum_{l=1}^{m} \alpha_l y_l(\mathbf{x}).$$

- Мы хотим минимизировать E по α_l и параметрам $y_l(\mathbf{x})$.

Теоретические свойства AdaBoost

- Минимизируем $E = \sum_{n=1}^{N} e^{-t_n f_m(\mathbf{x}_n)}$.
- Вместо глобальной оптимизации будем действовать жадно: пусть $y_1(\mathbf{x}), \ldots, y_{m-1}(\mathbf{x})$ и $\alpha_1, \ldots, \alpha_{m-1}$ уже зафиксированы. Тогда ошибка получается

$$E = \sum_{n=1}^{N} e^{-t_n f_{m-1}(\mathbf{x}_n) - \frac{1}{2} t_n \alpha_m y_m(\mathbf{x})} = \sum_{n=1}^{N} w_n^{(m)} e^{-\frac{1}{2} t_n \alpha_m y_m(\mathbf{x})},$$

где $w_N^{(m)} = e^{-t_n f_{m-1}(\mathbf{x}_n)}$ – это как раз и есть наши веса, и их теперь можно считать константами.

Теоретические свойства AdaBoost

- На правильных классификациях произведение -1, на неправильных $+1$:

$$E = e^{-\frac{\alpha_m}{2}} \sum_{\text{correct}} w_n^{(m)} + e^{\frac{\alpha_m}{2}} \sum_{\text{wrong}} w_n^{(m)} =$$

$$= \left(e^{\frac{\alpha_m}{2}} - e^{-\frac{\alpha_m}{2}} \right) \sum_{n=1}^{N} w_n^{(m)} [y_m(\mathbf{x}_n) \neq t_n] + e^{-\frac{\alpha_m}{2}} \sum_{n=1}^{N} w_n^{(m)},$$

и достаточно минимизировать
$J_m = \sum_{n=1}^{N} w_n^{(m)} [y_m(\mathbf{x}_n) \neq t_n]$.

Теоретические свойства AdaBoost

- Ну а когда мы обучим $y_m(\mathbf{x})$, из $E = \sum_{n=1}^{N} w_n^{(m)} e^{-\frac{1}{2} t_n \alpha_m y_m(\mathbf{x})}$ получится

$$w_n^{(m+1)} = w_n^{(m)} e^{-\frac{1}{2} t_n \alpha_m y_m(\mathbf{x}_n)} = w_n^{(m)} e^{-\frac{1}{2}\alpha_m} e^{\alpha_m [y_m(\mathbf{x}_n) \neq t_n]},$$

  и на $e^{-\frac{1}{2}\alpha_m}$ можно все веса сократить.
- Таким образом, бустинг можно рассматривать как оптимизацию экспоненциальной ошибки.

RankBoost

- Предположим, что нам нужно не классифицировать, а *упорядочить* элементы какого-то множества.
- Задача *ранжирования*: например, мы – поисковая система, и мы хотим ранжировать выдачу по какому-то запросу от более релевантных к менее.
- У нас может быть масса разных фич, характеризующих эти документы.
- Это тоже можно сделать бустингом.

RankBoost

- Формально говоря, нам надо обучить функцию $F(\mathbf{x}) : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ по входу $\{\mathbf{x}_1, \ldots, \mathbf{x}_N\}$ и функции частичных предпочтений $\Phi : \mathbf{X} \times \mathbf{X} \to \mathbb{R}$ ($\Phi(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) > 0$, если $\mathbf{x}_i$ лучше $\mathbf{x}_j$, и т.д.).
- Обычно в качестве функции Φ подаётся просто разбиение на «хорошие» (например, релевантные) и «плохие»: $\Phi(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = 1$ для хорошего $\mathbf{x}$ и плохого $\mathbf{y}$ и 0, если они из одного множества.

Центр Речевых Технологий

RankBoost

- RankBoost по сути работает примерно как AdaBoost, но раньше веса давали распределение на примерах, а теперь – на парах примеров: инициализируем распределение $D^{(1)} = D(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ на $\mathbf{X} \times \mathbf{X}$, а потом для $m = 1..M$:
  1. обучаем слабую ранжирующую функцию $h_m(\mathbf{x}) : \mathbf{X} \to \mathbb{R}$ по распределению $D^{(m)}$;
  2. выбираем $\alpha_m \in \mathbb{R}$ (потом скажу как);
  3. пересчитываем новое распределение

$$D^{(m+1)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \frac{1}{Z_m} D^{(m)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) e^{\alpha_m (h_m(\mathbf{x}) - h_m(\mathbf{y}))}.$$

  4. После обучения ранжируем как $H_M(\mathbf{x}) = \sum_{m=1}^{M} \alpha_m h_m(\mathbf{x})$.

Центр Речевых Технологий

RankBoost

- Тогда получится такая теорема: если вернуться от $D^{(m+1)}(\mathbf{x},\mathbf{y})$ к $D(\mathbf{x},\mathbf{y})$, будет

$$D^{(m+1)}(\mathbf{x},\mathbf{y}) = \frac{1}{\prod_m Z_m} D(\mathbf{x},\mathbf{y})\, e^{H_M(\mathbf{x})-H_M(\mathbf{y})}.$$

- Значит, ошибку можно оценить как

$$J_M = \sum_{\mathbf{x},\mathbf{y}} D(\mathbf{x},\mathbf{y})\,[H_M(\mathbf{x}) \geq H_M(\mathbf{y})] \leq$$

$$\leq \sum_{\mathbf{x},\mathbf{y}} D(\mathbf{x},\mathbf{y})\, e^{H_M(\mathbf{x})-H_M(\mathbf{y})} = \sum_{\mathbf{x},\mathbf{y}} D^{(m+1)}(\mathbf{x},\mathbf{y}) \prod_m Z_m = \prod_m Z_m.$$

RankBoost

- И выбирать α_m можно (и нужно) так, чтобы минимизировать $\prod_m Z_m$, т.е. на шаге m минимизировать

$$Z_m = \sum_{\mathbf{x},\mathbf{y}} D^{(m)}(\mathbf{x},\mathbf{y})\, e^{\alpha_m (h_m(\mathbf{x}) - h_m(\mathbf{y}))}.$$

- Формально для нас h_m – чёрный ящик, но на практике мы часто выбираем алгоритм обучения и для h_m, так что его тоже можно выбирать так, чтобы минимизировать Z_m.

Центр Речевых Технологий

RankBoost

- Теорема: для любого слабого ранжирования h $Z(\alpha)$ имеет единственный минимум, так что можно просто бинарным поиском.
- Если $h \in \{0, 1\}$, можно и аналитически: обозначим $W_b = \sum_{\mathbf{x},\mathbf{y}} D(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \, [h(\mathbf{x}) - h(\mathbf{y}) = b]$. Тогда

$$\alpha_{\text{opt}} = \frac{1}{2} \ln \left(\frac{W_{-1}}{W_{+1}} \right), \quad Z = W_0 + 2\sqrt{W_{-1} W_{+1}}.$$

Упражнение. Проверьте это.

Центр Речевых Технологий

RankBoost

- А для $h \in [0, 1]$ можно приблизить:
  $e^{\alpha x} \leq \left(\frac{1+x}{2}\right) e^{\alpha} + \left(\frac{1-x}{2}\right) e^{-\alpha}$, $x \in [-1, 1]$, так что

$$Z \leq \left(\frac{1-r}{2}\right) e^{\alpha} + \left(\frac{1+r}{2}\right) e^{-\alpha}, \quad r = \sum_{\mathbf{x},\mathbf{y}} D(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \left(h(\mathbf{x}) - h(\mathbf{y})\right)$$

и можно выбирать

$$\alpha_{\text{opt}} = \frac{1}{2} \ln \left(\frac{1+r}{1-r}\right),$$

а h можно обучать так, чтобы максимизировать $|r|$.

Упражнение. Проверьте это.

Оценки доверия

- Предположим, что наши слабые классификаторы выдают не только один бит, а ещё какую-то оценку доверия своему результату (обычно ведь так и бывает).
- Т.е. слабый классификатор – это слабая гипотеза $h(\mathbf{x}) : \mathbf{X} \to \mathbb{R}$.

Оценки доверия

- Для этого слегка обобщим исходный AdaBoost, представив его как алгоритм, пересчитывающий распределения:
  1. обучаем слабую гипотезу $h_m(\mathbf{x}) : \mathbf{X} \to \mathbb{R}$ по распределению $D^{(m)}$;
  2. выбираем $\alpha_m \in \mathbb{R}$ (потом скажу как);
  3. пересчитываем новое распределение

$$D^{(m+1)}(\mathbf{x}) = \frac{1}{Z_m} D^{(m)}(\mathbf{x}) e^{-\alpha_m t_m h_m(\mathbf{x})}.$$

  4. После обучения классифицируем как $H_M(\mathbf{x}) = \text{sign}\left(\sum_{m=1}^{M} \alpha_m h_m(\mathbf{x})\right)$.

Оценки доверия

- Теперь будет верна аналогичная теорема:

$$\frac{1}{N}\left|\{n : H(\mathbf{x}_n) \neq t_n\right| \leq \prod_{m=1}^{M} Z_m.$$

Упражнение. Докажите это.

- И, значит, мы тоже можем минимизировать Z_m жадно на каждом шаге по α_m и слабой гипотезе h_m.

Оценки доверия

- В частности, исходный AdaBoost получится как одно из приближений к такой минимизации; обозначим $u_n = t_n y(\mathbf{x}_n)$:

$$Z = \sum_n D(\mathbf{x}_n) e^{-\alpha u_n} \leq \sum_n D(\mathbf{x}_n) \left(\frac{1+u_i}{2} e^{-\alpha} + \frac{1-u_i}{2} e^{\alpha} \right),$$

  причём эта оценка точна для $u_n \in \{-1, 1\}$ (т.е. для исходного AdaBoost).
- Тогда для $r = \sum_n D(\mathbf{x}_n) u_n$ мы получим аналитический минимум

$$\alpha_{\text{opt}} = \frac{1}{2} \ln \left(\frac{1+r}{1-r} \right), \quad Z \leq \sqrt{1-r^2}.$$

- И мы доказали исходную теорему про AdaBoost.

Оценки доверия

- А для общего случая получится

$$Z = \sum_n D(\mathbf{x}_n) e^{-\alpha u_n},$$

$$Z'_\alpha = -\sum_n D(\mathbf{x}_n) u_n e^{-\alpha u_n} = -Z \sum_n D^{(m+1)}(\mathbf{x}_n) e^{-\alpha u_n}.$$

- Т.е. надо выбирать такой α, чтобы $Z'_\alpha = 0$, а значит,

$$\sum_n D^{(m+1)}(\mathbf{x}_n) u_n = \mathrm{E}_{\mathbf{x} \sim D^{(m+1)}} [t_n y_m(\mathbf{x}_n)] = 0,$$

  т.е. выбирать так, чтобы по $D^{(m+1)}$ гипотеза h_m была бы некоррелирована с метками t_n.
- Это можно делать, численно решая уравнение $Z'_\alpha = 0$; у него не больше одного корня (проверьте, что $Z''_\alpha > 0$ для всех α).

Центр Речевых Технологий

Thank you!

Спасибо за внимание!