БУСТИНГ: ADABOOST

Сергей Николенко

СПбГУ — Санкт-Петербург

14 октября 2020 г.

Random facts:

- 14 октября в Грузии — Мцхетоба, христианский государственный праздник, проводящийся в кафедральном храме Светицховели города Мцхета; по легенде, храм основан на том месте, где была захоронена риза Иисуса Христа, привезённая в Грузию грузинскими евреями Элиозом и Лонгинозом, которые присутствовали при распятии
- 14 октября 1843 г. на премьере спектакля «Сон в летнюю ночь» впервые прозвучал «Свадебный марш» Мендельсона, а 14 октября 1860 г. был открыт Мариинский театр
- 14 октября 1892 г. Артур Конан Дойль опубликовал книгу «Приключения Шерлока Холмса», а 14 октября 1926 г. в Лондоне вышла книга Алана Милна «Винни-Пух»
- 14 октября 1943 г. произошло восстание в концлагере Собибор, единственное удачное в истории Третьего рейха
- 14 октября 2012 г. Феликс Баумгартнер прыгнул с парашютом с высоты 39 км и успешно приземлился в окрестностях, что характерно, города Розуэлл, Нью-Мексико

Объединение моделей

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?

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:

$$p(\mathbf{x}) = \sum_k \pi_k N(\mathbf{x} \mid \mu_k, \Sigma_k).$$

- Если её обучать, мы обучим коэффициенты смеси, и результат будет порождён как бы двухуровневым процессом.

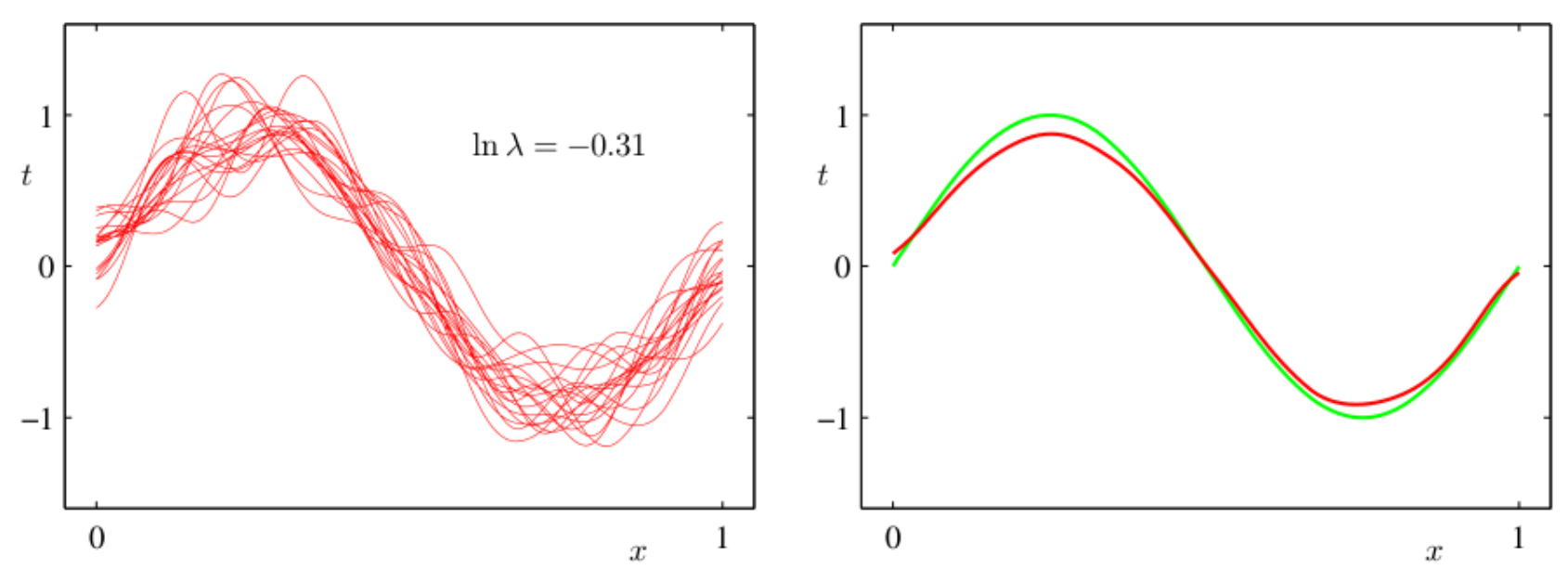
Комбинация моделей и байесовское усреднение

- А байесовское усреднение будет выглядеть как

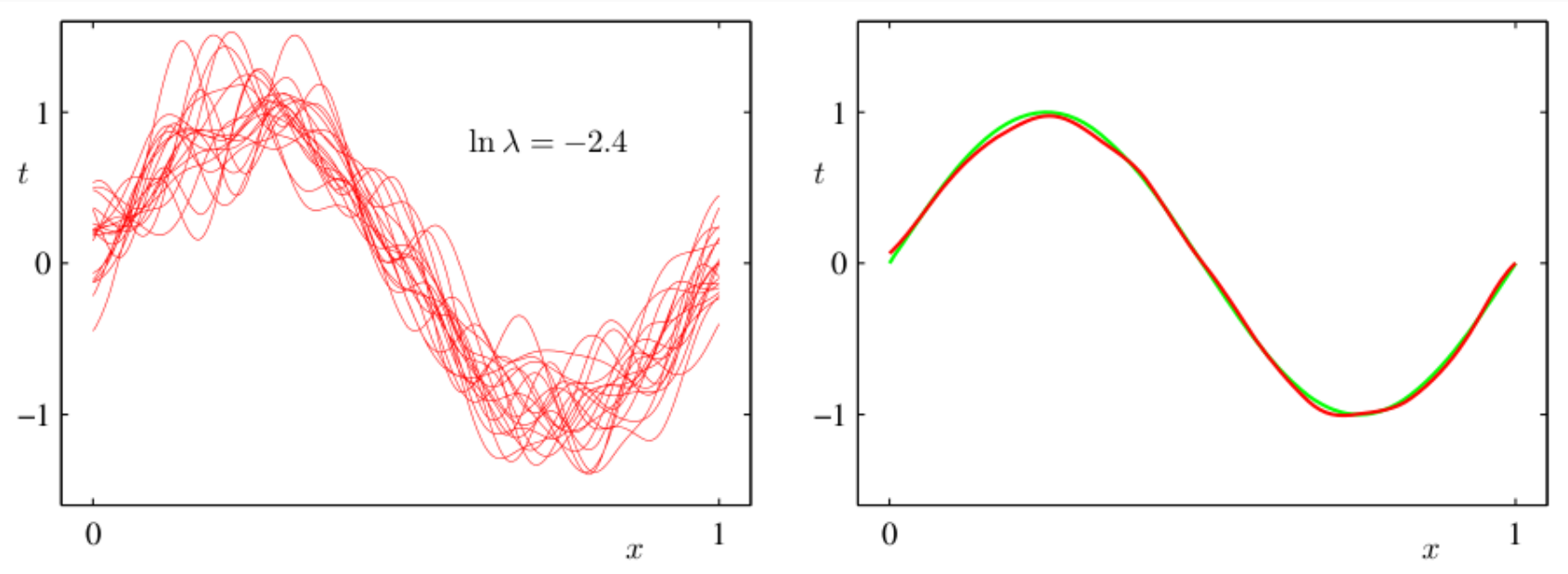
$$p(\mathbf{X}) = \sum_{h=1}^{H} p(\mathbf{X} \mid h) p(h).$$

- 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



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?

Bagging

- Пусть у нас есть датасет $\mathbf{X} = \{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N\}$.
- 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

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

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

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

Bagging

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

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

- А ошибка комитета – это

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

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

Bagging

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

Бустинг: AdaBoost

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).

AdaBoost

- AdaBoost: самый простой вариант. Рассмотрим задачу бинарной классификации; данные – это $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N$ с ответами $t_1, \dots, t_N$, $t_i \in \{-1, 1\}$.
- 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

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

- 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.

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 $y_1(\mathbf{x}), \dots, y_{m-1}(\mathbf{x})$ и $\alpha_1, \dots, \alpha_{m-1}$ 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 $+1$:

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

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

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

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.

Спасибо!

Спасибо за внимание!