天氣與人工智慧
機器學習實作 - 9

機器學習 – 參數調整與集成

2020/12/30

今日內容

- 超參數調整
- 集成 – 混合泛化 (Blending)
- 集成 – 堆疊泛化 (Stacking)

知識地圖 機器學習- 參數調整 - 超參數調整與優化

機器學習概論 Introduction of Machine Learning

監督式學習
Supervised Learning

前處理 Processing → 探索式數據分析 Exploratory Data Analysis → 特徵工程 Feature Engineering → 模型選擇 Model selection → **參數調整 Fine-tuning** → 集成 Ensemble

非監督式學習
Unsupervised Learning

- 分群 Clustering
- 降維 Dimension Reduction

參數調整 Fine-tuning

調整方式

- 網格搜尋 Grid Search
- 隨機搜尋 Random Search

平台介紹

Kaggle 平台

本節重點

- 瞭解何謂超參數，該如何調整
- 瞭解正確調整超參數的步驟
- 瞭解常用的調整超參數方法

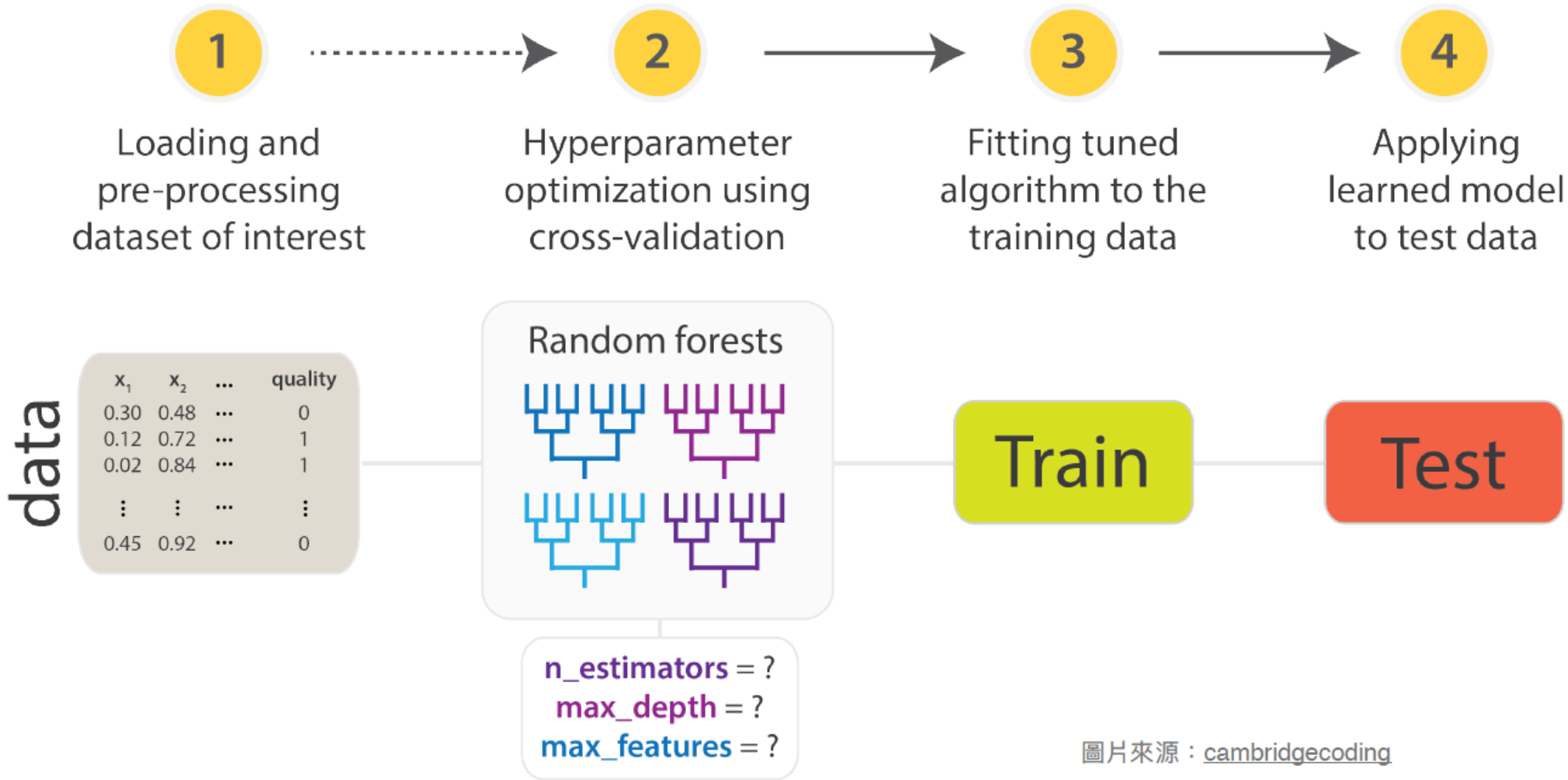
機器學習模型中的超參數

- 之前接觸到的所有模型都有超參數需要設置
  - LASSO，Ridge: α 的大小
  - 決策樹：樹的深度、節點最小樣本數
  - 隨機森林：樹的數量
- 這些超參數都會影響模型訓練的結果，建議先使用預設值，再慢慢進行調整
- 超參數會影響結果，但提升的效果有限，資料清理與特徵工程才能最有效的提升準確率，調整參數只是一個加分的工具。

超參數調整方法

- 窮舉法 (Grid Search)：直接指定超參數的組合範圍，每一組參數都訓練完成，再根據驗證集 (validation) 的結果選擇最佳參數
- 隨機搜尋 (Random Search)：指定超參數的範圍，用均勻分布進行參數抽樣，用抽到的參數進行訓練，再根據驗證集的結果選擇最佳參數
- 隨機搜尋通常都能獲得更佳的結果

機器學習模型訓練步驟

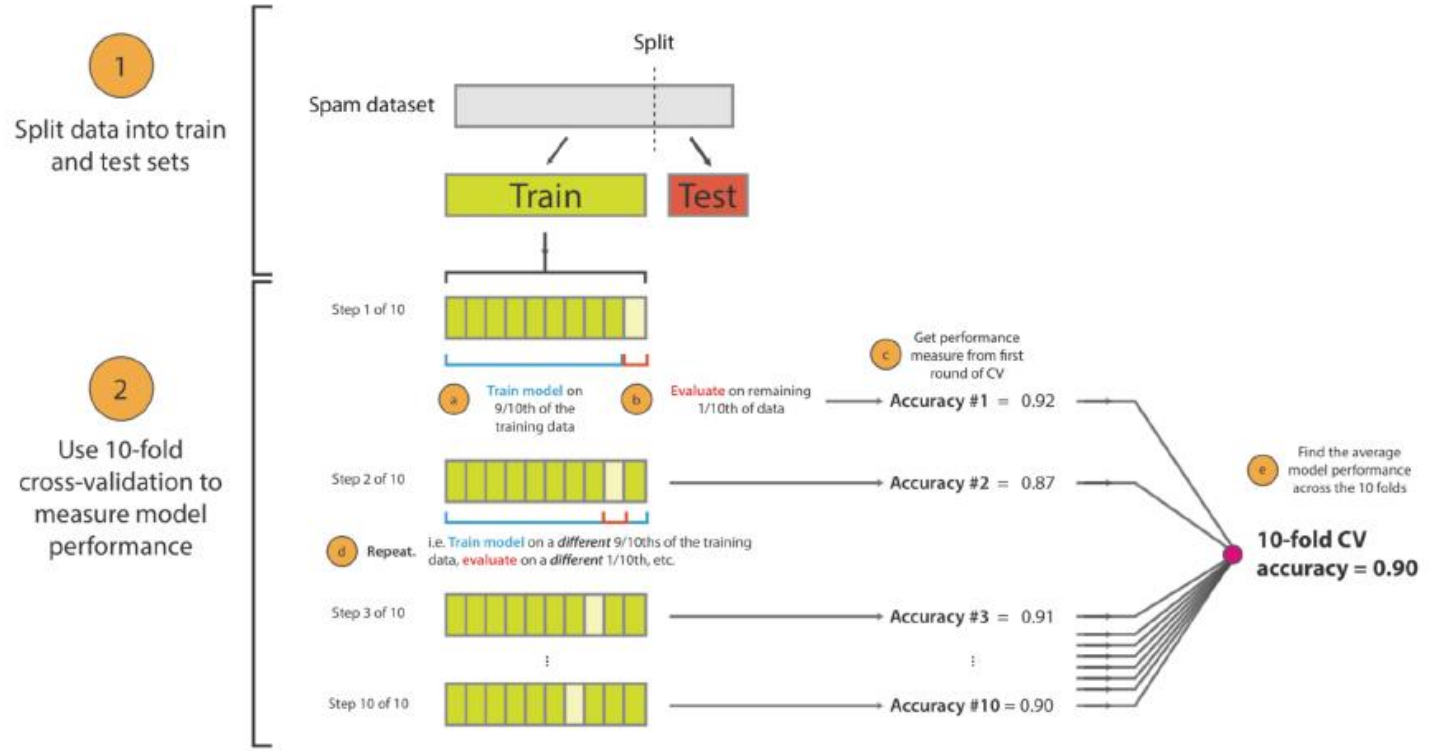


圖片來源：cambridgecoding

正確的超參數調整步驟

- 若持續使用同一份驗證集 (validation) 來調參，可能讓模型的參數過於擬合該驗證集，正確的步驟是使用 Cross-validation 確保模型泛化性

1. 先將資料切分為訓練/測試集，測試集保留不使用
2. 將剛切分好的訓練集，再使用 Cross-validation 切分 K 份訓練/驗證集
3. 用 grid/random search 的超參數進行訓練與評估
4. 選出最佳的參數，用該參數與全部訓練集建模
5. 最後使用測試集評估結果



圖片來源：beta.cambridgespark.com

常見問題

Q：超參數調整對最終結果影響很大嗎？

A：超參數調整通常都是機器學習專案的最後步驟，因為這對於最終的結果影響不會太多，多半是近一步提升 3-5 % 的準確率，但是好的特徵工程與資料清理是能夠一口氣提升 10-20 % 的準確率！因此建議專案一開始時，不需要花太多時間進行超參數的調整


解題時間
It’s Your Turn

參考資料

- 劍橋實驗室教你如何調參數 - 英文
- 教你使用 Python 調整隨機森林參數 - 英文

知識地圖 機器學習- 參數調整 - 超參數調整與優化

機器學習概論 Introduction of Machine Learning

監督式學習
Supervised Learning

前處理 Processing → 探索式數據分析 Exploratory Data Analysis → 特徵工程 Feature Engineering → 模型選擇 Model selection → 參數調整 Fine-tuning → **集成 Ensemble**

非監督式學習
Unsupervised Learning

- 分群 Clustering
- 降維 Dimension Reduction

參數調整 Fine-tuning

- **混合泛化 Blending**
- 堆疊泛化 Stacking

本節重點

- 資料工程中的集成，有哪些常見的內容
- 混合泛化為什麼能提升預測力，使用上要注意什麼問題？

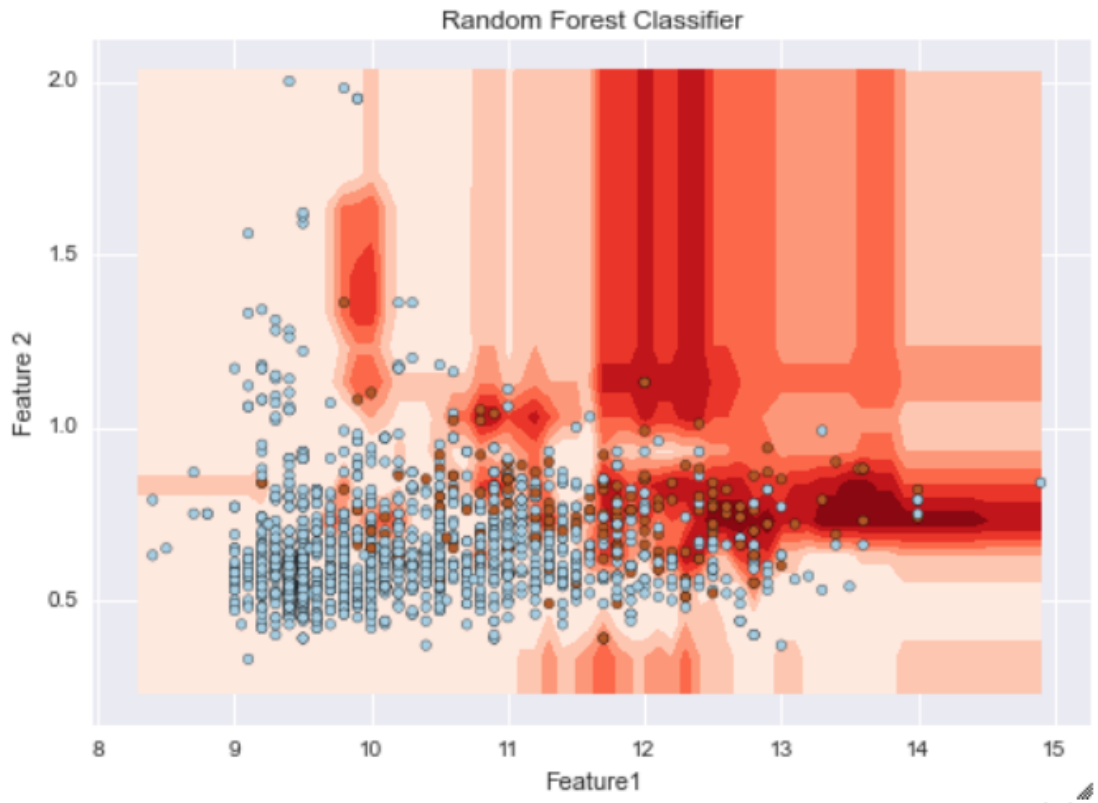
什麼是集成

- 集成是使用不同方式，結合多個/多種**不同分類器**，作為**綜合預測**的做法統稱
- 將模型**截長補短**，也可說是機器學習裡的 **和議制 / 多數決**

- 其中又分為資料面的集成：如裝袋法(Bagging) / 提升法(Boosting)
- 以及模型與特徵的集成：如混合泛化(Blending) / 堆疊泛化(Stacking)

資料面集成：裝袋法 (Bagging)

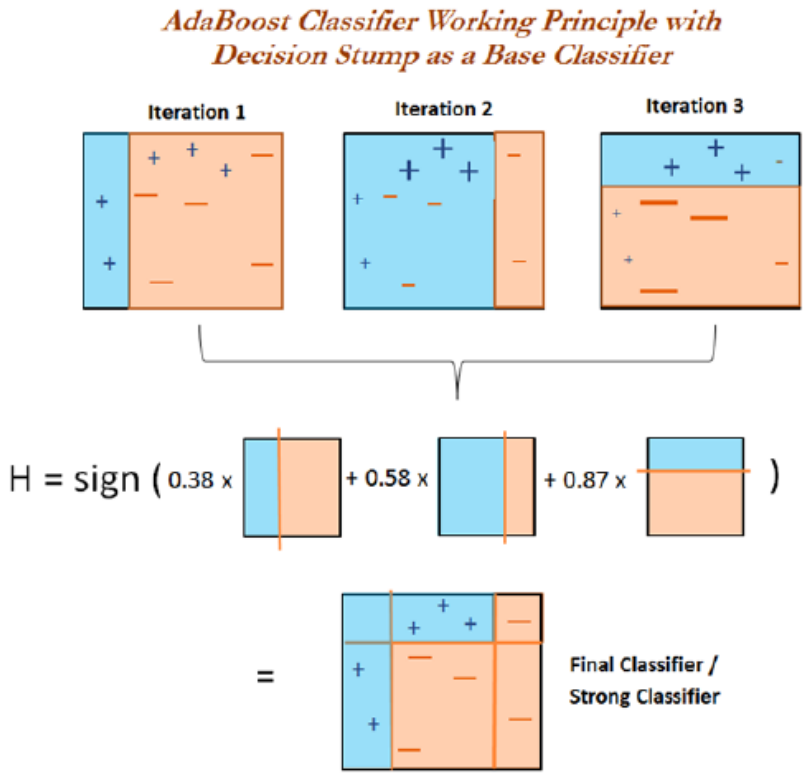
- 裝袋法顧名思義，是將資料放入袋中抽取，每回合結束後全部**放回袋中重抽**
- 再搭配弱分類器取平均/多數決結果，最有名的就是前面學過的**隨機森林**



圖片來源：stackexchange.

資料面集成：提升法 (Boosting)

- 提升法則是由之前模型的預測結果，去改變資料被抽到的權重或目標值
- 將錯判資料被抽中的機率放大，正確的縮小，就是**自適應提升** (AdaBoost, Adaptive Boosting)
- 如果是依照估計誤差的殘差項調整新目標值，則就是**梯度提升機** (Gradient Boosting Machine) 的作法，只是梯度提升機還加上用梯度來選擇決策樹分支



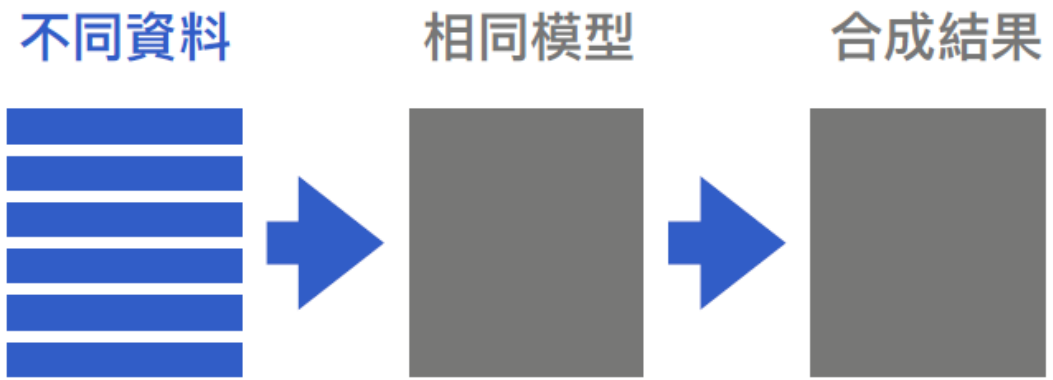
圖片來源：subscription

資料集成 v.s. 模型與特徵集成

- 兩者雖然都稱為集成，其實適用範圍差異很大，通常不會一起提及
- 這裡為了避免同學混淆，在這邊將兩者做個對比
- 資料集成

  Bagging / Boosting

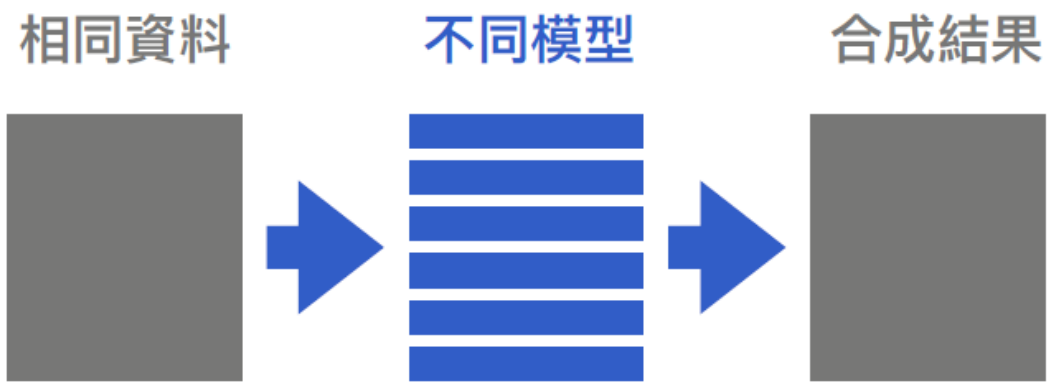
  - 使用不同訓練資料 + 同一種模型，多次估計的結果合成最終預測



- 模型與特徵集成

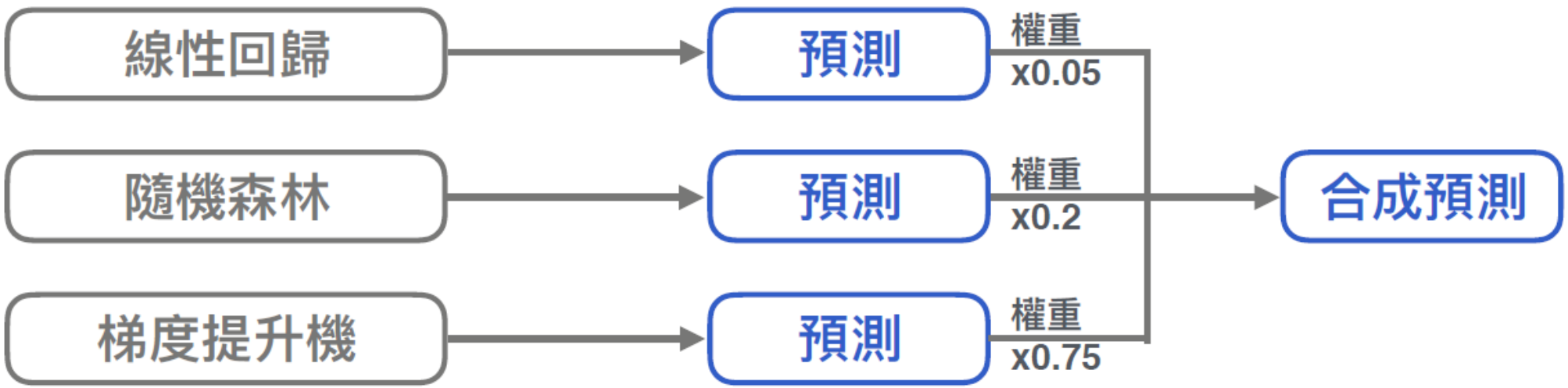
  Voting / Blending / Stacking

  - 使用同一資料 + 不同模型，合成出不同預測結果



混合泛化 (Blending) (1 / 3)

- 其實混合泛化非常單純，就是將不同模型的預測值**加權合成**，權重和為 1
  如果取預測的平均 or 一人一票多數決(每個模型**權重相同**)，則又稱為 **投票泛化(Voting)**



- 雖然單純，但因為**最容易使用**且**有效**，至今仍然是競賽中常見的作法

混合泛化 (Blending) (2 / 3)

容易使用

- 不只在一般機器學習中有用，影像處理或自然語言處理等深度學習，也一樣可以使用
- 因為只要有預測值(Submit 檔案)就可以使用，許多跨國隊伍就是靠這個方式合作
- 另一方面也因為只要用預測值就能計算，在競賽中可以快速合成多種比例的答案，妥善消耗掉每一天剩餘的 Submit 次數

混合泛化 (Blending) (3 / 3)

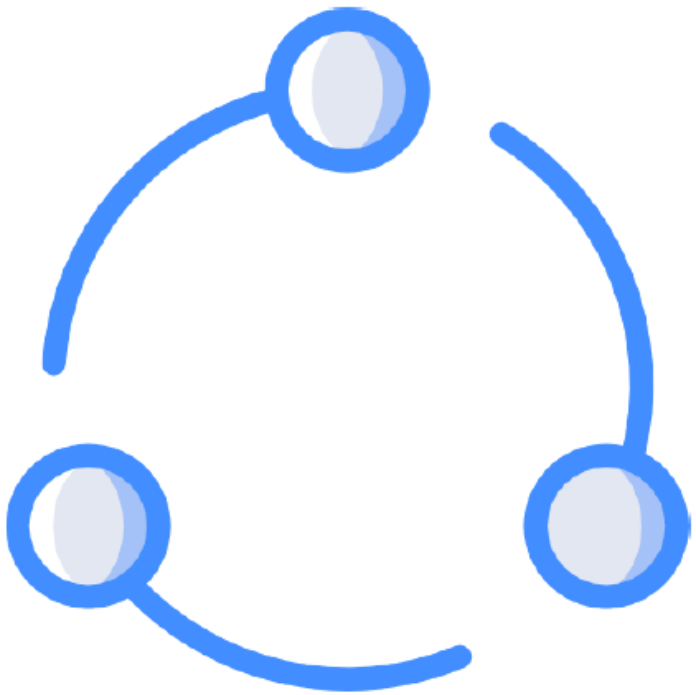
效果顯著

- Kaggle 競賽截止日前的 Kernel，有許多只是對其他人的輸出結果做 Blending，但是因為分數較高，因此也有許多人樂於推薦與發表
- 在2015年前的大賽中，Blending 仍是主流，例如林軒田老師也曾在課程中提及：有競賽的送出結果，是上百個模型的 Blending

注意事項

- Blending 的前提是：個別**單模效果都很好**(有調參)並且**模型差異大**，單模要好尤其重要，如果單模效果差異太大，Blending 的效果提升就相當有限

重要知識點複習



- 資料工程中的集成，包含了資料面的集成 - **裝袋法(Bagging)** / **提升法(Boosting)**，以及模型與特徵的集成 - **混合泛化(Blending)** / **堆疊泛化(Stacking)**
- 混合泛化提升預測力的原因是基於**模型差異度大**，在預測細節上能互補，因此預測模型只要各自調參優化過且原理不同，通常都能使用混合泛化集成


解題時間
It’s Your Turn

知識地圖 機器學習- 參數調整 - 超參數調整與優化

機器學習概論 Introduction of Machine Learning

監督式學習
Supervised Learning

前處理 Processing → 探索式數據分析 Exploratory Data Analysis → 特徵工程 Feature Engineering → 模型選擇 Model selection → 參數調整 Fine-tuning → **集成 Ensemble**

非監督式學習
Unsupervised Learning

- 分群 Clustering
- 降維 Dimension Reduction

參數調整 Fine-tuning

- 混合泛化 Blending
- **堆疊泛化 Stacking**

本節重點

- 為什麼堆疊泛化看起來這麼複雜？
- 堆疊泛化有堆疊層數上的限制嗎？
- 混合泛化相對堆疊泛化來說，有什麼優缺點？

堆疊泛化 (Stacking) 的橫空出世

Stacking 小歷史

- 雖然堆疊泛化 (Stacking) 的論文早在 2012 年，就由 David H. Wolpert 發布

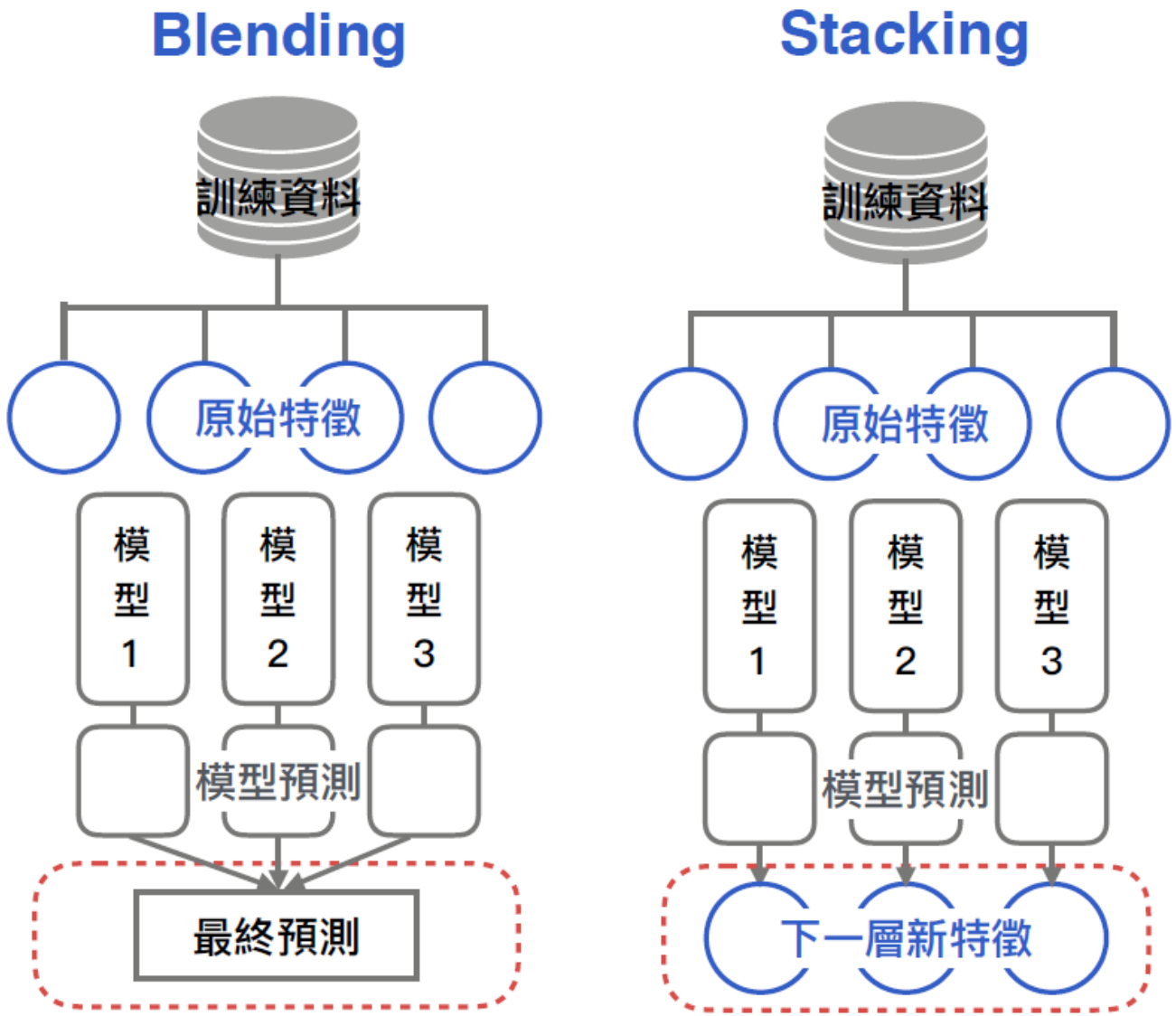
- 但真正被廣泛應用於競賽上，是2014年底的 Kaggle 競賽開始
- 由於 Kaggle 一直有前幾名於賽後發布做法的風氣，所以當有越來越多的前幾名使用 Stacking
- 後，這個技術就漸漸變得普及起來，甚至後來出現了加速混合與計算速度的 StackNet

相對於 Blending 的改良

- 不只將預測結果混合，而是使用**預測**結果**當新特徵**
- 更進一步的運用了**資料輔助集成**，但也使得 Stacking 複雜許多

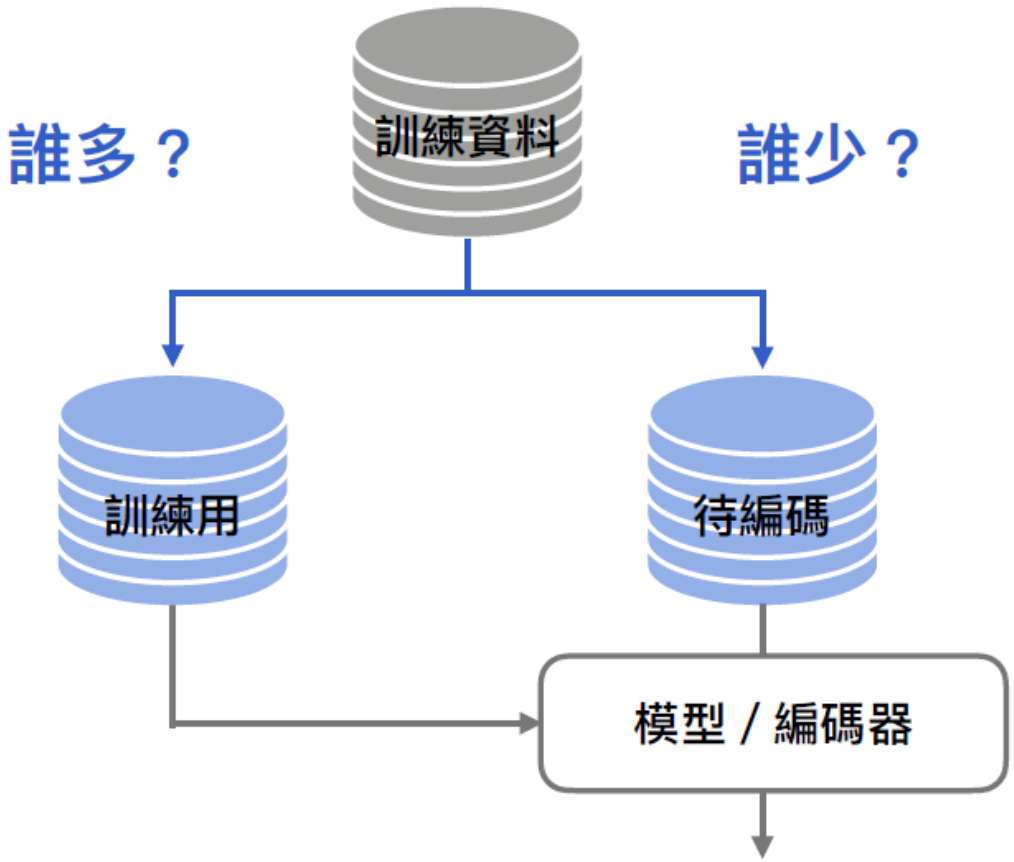
Stacking 的設計挑戰：訓練測試的不可重複性

Blending 與 Stacking 都是模型集成，但是模型預測結果怎麼使用，是關鍵差異



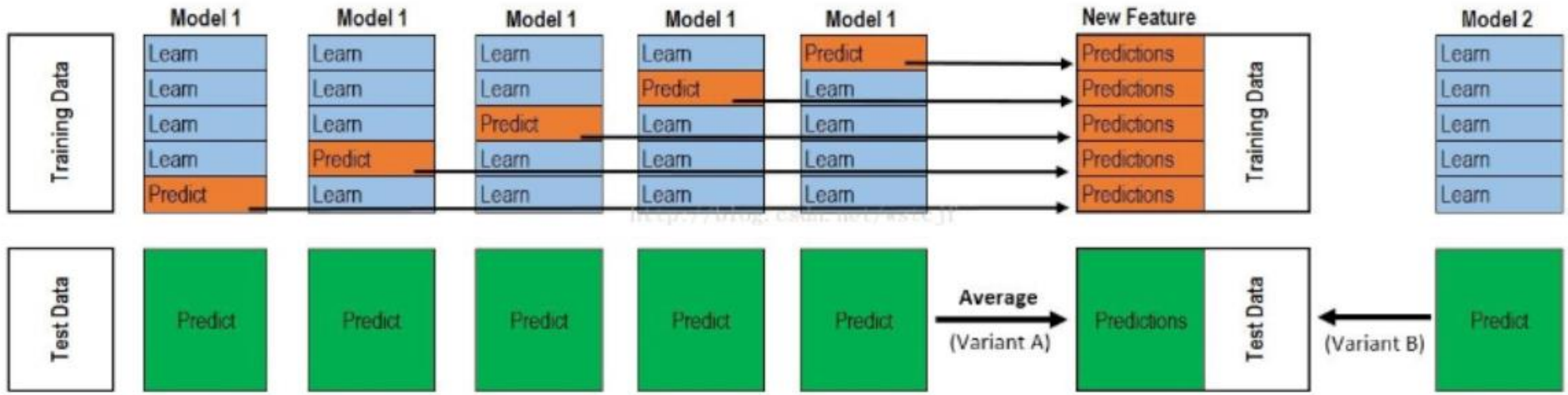
Blending 與 Stacking 的原理差異

- Stacking 主要是把模型當作下一階的**特徵編碼器**來使用，但是**待編碼資料**與用來**訓練編碼器**的資料不可重複 (訓練測試的不可重複性)
- 若將訓練資料切成兩組：**待編碼**資料太少，下一層的資料筆數就會太少，**訓練編碼器**的資料太少，則編碼器的強度就會不夠，這樣的困境該如何解決呢?



Stacking 最終設計：巧妙的 K-Fold 拆分

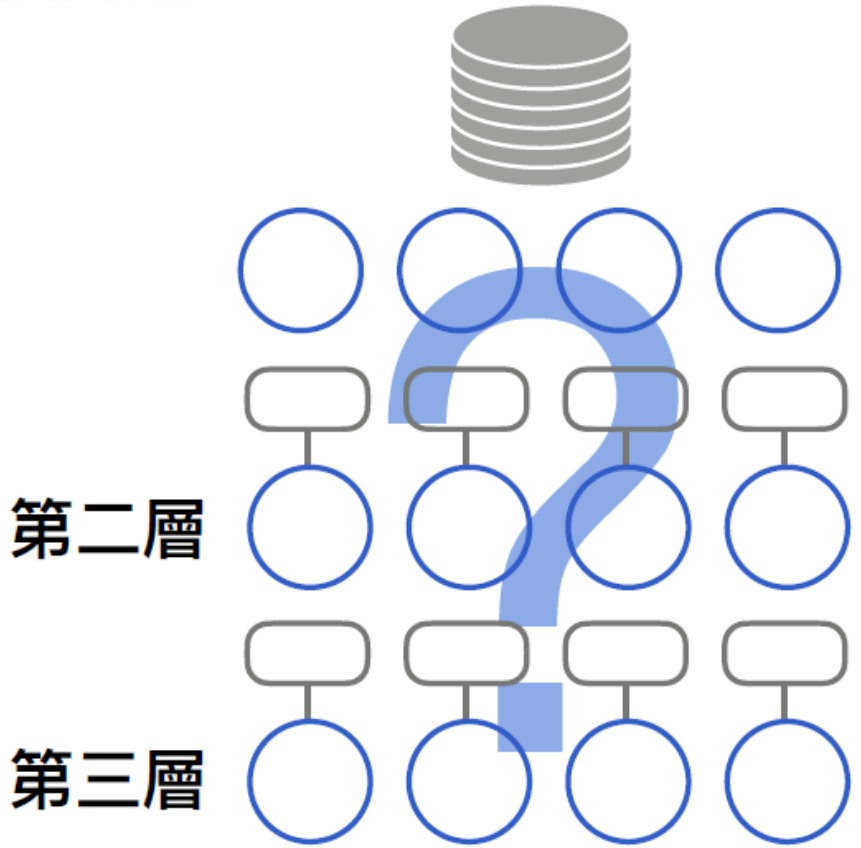
- Stacking 最終採取了下圖設計：將資料拆成 K 份 (圖中 K=5)，每 1/K 的資料要編碼時，使用其他的 K-1 組資料訓練模型/編碼器
- 這樣資料就沒有變少，K 夠大時編碼器的強韌性也夠，唯一的問題就是計算時間隨著 K 變大而變長，但 K 可以調整，且相對深度學習所需的時間來說，這樣的時間長度也還算可接受



圖片來源：CSDN

自我遞迴的 Stacking？(1 / 3)

- 大家在看到 Stacking 時可能已經注意到了：既然 Stacking 是在**原本特徵**上，用**模型**造出**新特徵**，那麼我們自然會想到兩個問題：
  - Q1 能不能**新舊特徵一起用**，再用模型去預測呢?
  - Q2 新的特徵，能不能**再搭配模型創特徵**，第三層第四層...一直下去呢?



自我遞迴的 Stacking？(2 / 3)

Q1：能不能**新舊特徵一起用**，再用模型預測呢?

A1：**可以**，這裡其實有個有趣的思考，也就是：這樣不就可以一直一直無限增加特徵下去？ 這樣後面的特徵還有意義嗎？ 不會 Overfitting 嗎?...其實加太多次是會 Overfitting 的，必需謹慎切分 Fold 以及新增次數

Q2：新的特徵，能不能**再搭配模型創特徵**，第三層第四層...一直下去呢?

A2：**可以**，但是每多一層，模型會越複雜：因此泛化(又稱為魯棒性)會做得更好，精準度也會下降，所以除非第一層的單模調得很好，否則兩三層就不需要繼續往下了

自我遞迴的 Stacking？(3 / 3)

** 更有趣的其實是下面的問題 (純個人分享，如果感到太抽象的同學可以跳過)

Q3：既然同層新特徵會 Overfitting，層數加深會增加泛化，兩者同時用是不是就能把缺點互相抵銷呢?

A3：**可以!!** 而且這正是 Stacking 最有趣的地方，但真正實踐時，程式複雜，運算時間又要再往上一個量級，之前曾有大神寫過 StackNet 實現這個想法，用 JVM 加速運算，但實際上使用時調參困難，後繼使用的人就少了

真實世界的 Stacking 使用心得

實際上寫 Stacking 有這麼困難嗎?

其實不難，就像 sklearn 幫我們寫好了許多機器學習模型，mlxtend 也已經幫我們寫好了 Stacking 的模型，所以用就可以了

Stacking 結果分數真的比較高嗎?

不一定，有時候單模更高，有時候 Blending 效果就不錯，視資料狀況而定

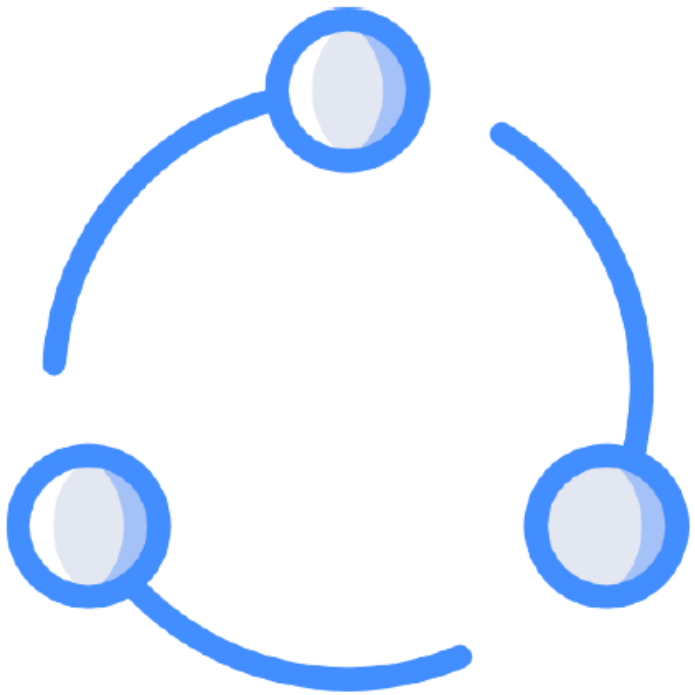
Stacking 可以做參數調整嗎?

可以，主要差異是參數名稱寫法稍有不同

還有其他做 Stacking 時需要注意的事項嗎?

「分類問題」的 Stacking 要注意兩件事：記得加上 use_probas=True(輸出特徵才會是機率值)，以及輸出的總特徵數會是：模型數量*分類數量(回歸問題特徵數=模型數量)

重要知識點複習



- 堆疊泛化因為將模型預測當作特徵時，要避免**要編碼**的資料與訓練編碼器的資料重疊，因此設計上看起來相當複雜
- 堆疊泛化理論上在**堆疊層數**上**沒有限制**，但如果第一層的單模不夠複雜，堆疊二三層後，改善幅度就有限了
- 混合泛化相對堆疊泛化來說，優點在於**使用容易**，缺點在於**無法更深入的利用資料**更進一步混合模型