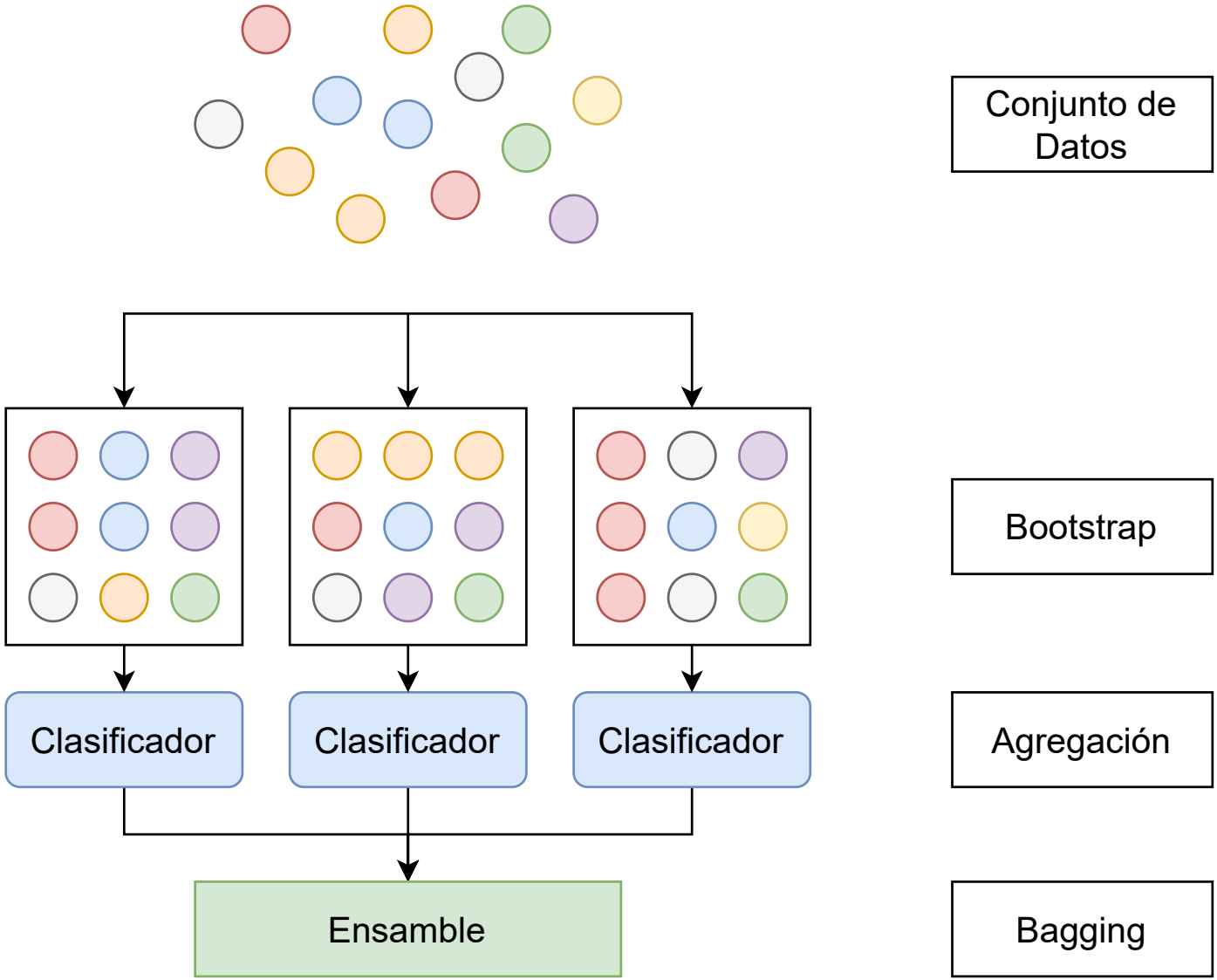
# Ensemble Learning

## Boosting y AdaBoost

Luis Norberto Zúñiga Morales

19 de septiembre de 2022

# En clases anteriores...

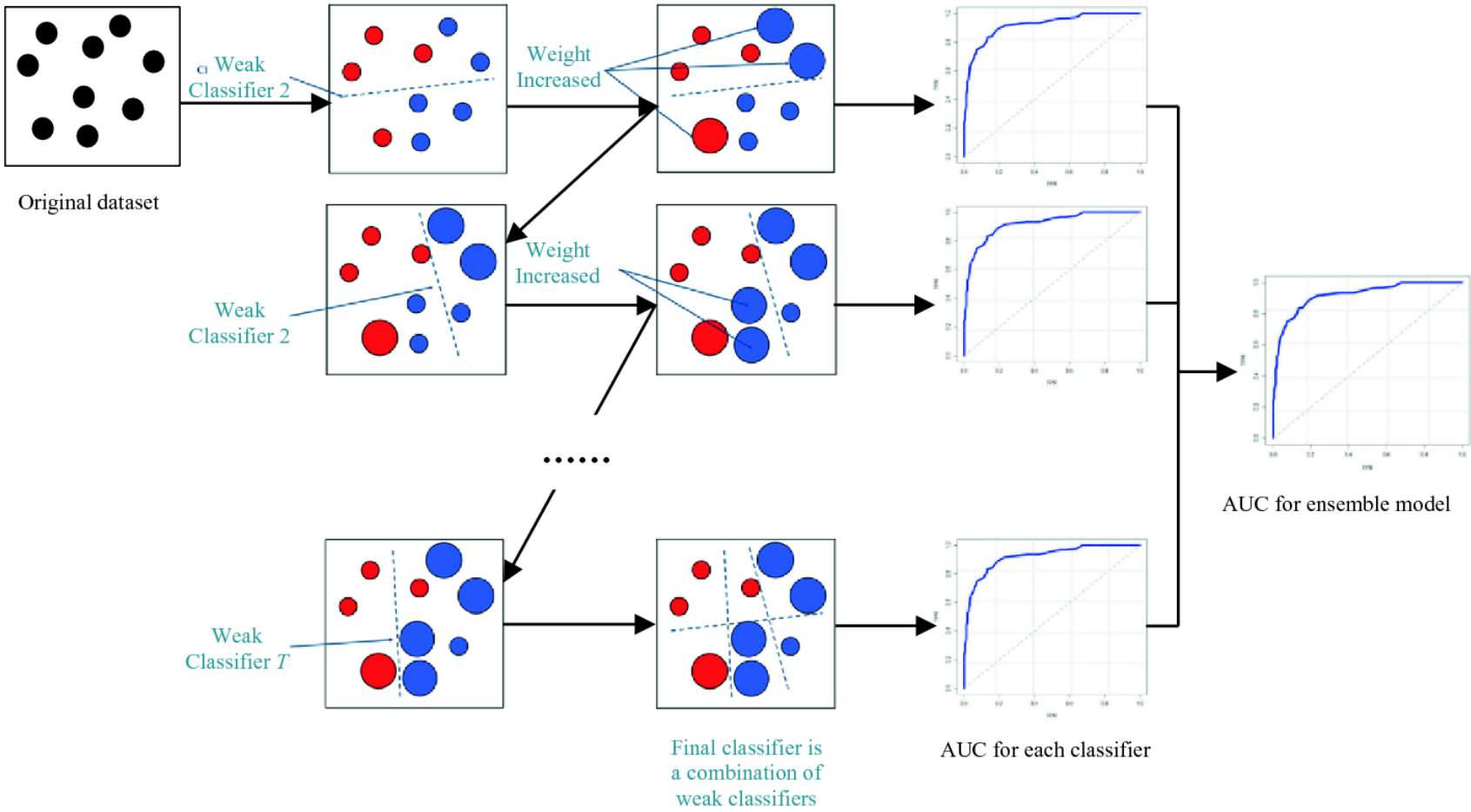


# En clases anteriores...

## Pregunta

¿Se les ocurre alguna otra forma de jugar con los elementos de un ensamble para mejorar su rendimiento?

# Boosting


Weak
Classifier 2
Weight
Increased
Original dataset
Weight
Increased
Weak
Classifier 2
.....
Weak
Classifier T
Final classifier is
a combination of
weak classifiers
AUC for each classifier
AUC for ensemble model

# Boosting

- Selecciona muestras aleatorias las cuales se utilizan para ajustar una serie de modelos de aprendizaje homogéneos en forma secuencial.

# Boosting

- Selecciona muestras aleatorias las cuales se utilizan para ajustar una serie de modelos de aprendizaje homogéneos en forma secuencial.
- Produce nuevos clasificadores capaces de mejorar el ensamble mediante una mejora al rendimiento en la predicción de instancias históricamente mal asignadas.

# Boosting

- Selecciona muestras aleatorias las cuales se utilizan para ajustar una serie de modelos de aprendizaje homogéneos en forma secuencial.
- Produce nuevos clasificadores capaces de mejorar el ensamble mediante una mejora al rendimiento en la predicción de instancias históricamente mal asignadas.
- Permite reducir el sesgo presente en los modelos base, por lo que es conveniente utilizar aquellos que presenten alto sesgo y baja varianza.

# AdaBoost

Supongamos lo siguiente:

- Buscamos crear un equipo de fútbol americano para competir en una liga.

# AdaBoost

Supongamos lo siguiente:

- Buscamos crear un equipo de fútbol americano para competir en una liga.
- **Pregunta:** ¿Cómo realizamos el reclutamiento?

# AdaBoost

Supongamos lo siguiente:

- Buscamos crear un equipo de fútbol americano para competir en una liga.
- **Pregunta:** ¿Cómo realizamos el reclutamiento?
  1. Exploración de jugadores (*scouting*).

# AdaBoost

Supongamos lo siguiente:

- Buscamos crear un equipo de fútbol americano para competir en una liga.
- **Pregunta:** ¿Cómo realizamos el reclutamiento?
  1. Exploración de jugadores (*scouting*).
  2. Selección de los mejores jugadores(*draft*).

# AdaBoost

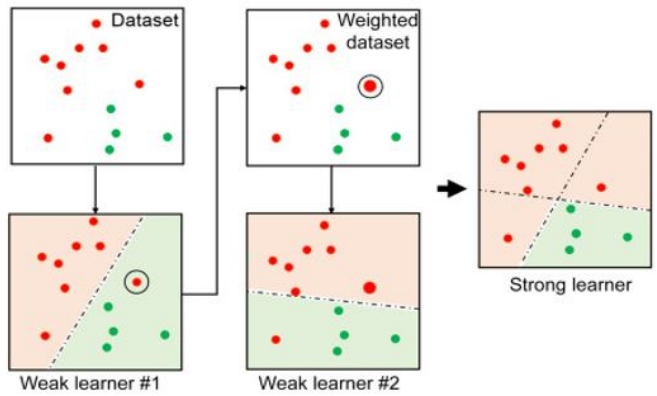
Supongamos lo siguiente:

- Buscamos crear un equipo de fútbol americano para competir en una liga.
- **Pregunta:** ¿Cómo realizamos el reclutamiento?
  1. Exploración de jugadores (*scouting*).
  2. Selección de los mejores jugadores(*draft*).
  3. Asignamos un rol según su importancia.

# AdaBoost

Idea básica [1, 2]:

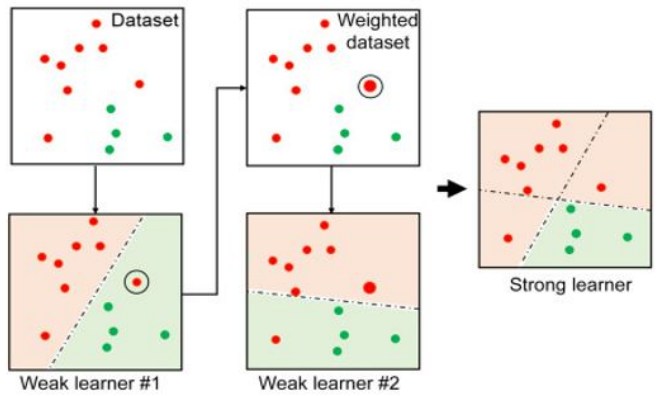
- Se crea un modelo base y se entrena.



# AdaBoost

Idea básica [1, 2]:

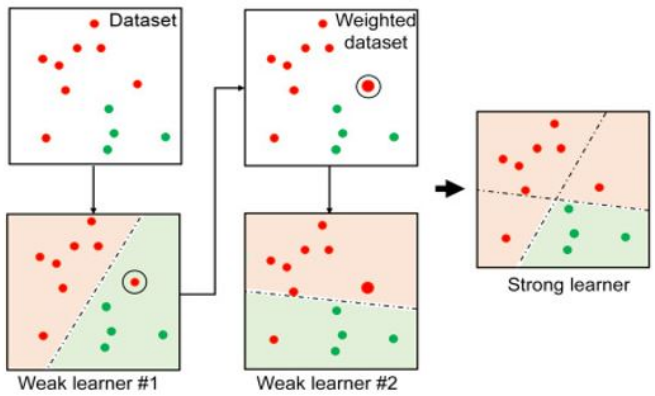
- Se crea un modelo base y se entrena.
- El algoritmo aumenta el peso de los puntos mal clasificados y de los modelos base.



# AdaBoost

Idea básica [1, 2]:

- Se crea un modelo base y se entrena.
- El algoritmo aumenta el peso de los puntos mal clasificados y de los modelos base.
- Se entrena un nuevo modelo base con los pesos actualizados.



Utilizaremos la idea de Rojas [3] para el desarrollo del modelo.

- El primer paso consiste en probar los clasificadores del ensamble por medio de un conjunto de entrenamiento $T$ de $N$ puntos $(\boldsymbol{x}_i, y_i)$.

Utilizaremos la idea de Rojas [3] para el desarrollo del modelo.

- El primer paso consiste en probar los clasificadores del ensamble por medio de un conjunto de entrenamiento $T$ de $N$ puntos $(\boldsymbol{x}_i, y_i)$.
- A cada modelo se le asigna un costo:
  - $e^{\beta}$ cada vez que el clasificador falla, $\beta > 0$
  - $e^{-\beta}$ si el clasificador predice la clase correcta, $\beta > 0$

Utilizaremos la idea de Rojas [3] para el desarrollo del modelo.

- El primer paso consiste en probar los clasificadores del ensamble por medio de un conjunto de entrenamiento $T$ de $N$ puntos $(\boldsymbol{x}_i, y_i)$.
- A cada modelo se le asigna un costo:
  - $e^{\beta}$ cada vez que el clasificador falla, $\beta > 0$
  - $e^{-\beta}$ si el clasificador predice la clase correcta, $\beta > 0$
- A este tipo de error ($e^{\beta}$) se le conoce como función de pérdida exponencial.

# AdaBoost

## Exploración

Cuando se prueban los $k$ clasificadores, se construye una matriz $S$ (*scouting*) que alberga los resultados de aciertos (0) y fallos (1) de cada uno de ellos.

| | $\phi_1$ | $\phi_2$ | ... | $\phi_k$ |
|---|---|---|---|---|
| $\boldsymbol{x}_1$ | 0 | 1 | ... | 1 |
| $\boldsymbol{x}_2$ | 0 | 1 | .. | 0 |
| $\vdots$ | $\vdots$ | $\vdots$ | | $\vdots$ |
| $\boldsymbol{x}_k$ | 1 | 1 | ... | 0 |

**Pregunta**

¿Cómo se elige el nuevo elemento del ensamble?

## Pregunta

¿Cómo se elige el nuevo elemento del ensamble?

## Respuesta

Con un modelo iterativo:

- En cada paso se agregan funciones al ensamble.
- Se jerarquizan todos los posibles clasificadores para elegir al mejor de ellos.

En la $m$-ésima iteración, ya se han incluido $m-1$ clasificadores en el ensamble, por lo que en este paso se debe agregar uno más. Hasta el momento, se tiene la siguiente combinación lineal:

$$C_{m-1}(\boldsymbol{x}_i) = \alpha_1\phi_1(\boldsymbol{x}_i) + \ldots + \alpha_{m-1}\phi_{m-1}(\boldsymbol{x}_i) \tag{1}$$

y se desea llegar a

$$C_m(\boldsymbol{x}_i) = C_{m-1}(\boldsymbol{x}_i) + \alpha_m\phi_m(\boldsymbol{x}_i) \tag{2}$$

En la primera iteración, $C_{m-1} = 0$ (función cero).

El error total del clasificador extendido se define como la pérdida exponencial:

$$E = \sum_{i=1}^{N} \exp[-y_i(C_{m-1}(\boldsymbol{x}_i) + \alpha_m \phi_m(\boldsymbol{x}_i))] \tag{3}$$

donde los valores óptimos de $\alpha_m$ y $\phi_m$ se encuentran pendientes de ser encontrados.

## Ecuación 3

$$E = \sum_{i=1}^{N} \exp[-y_i(C_{m-1}(\boldsymbol{x}_i) + \alpha_m \phi_m(\boldsymbol{x}_i))]$$

La Ec. (3) se puede expresar de la siguiente forma:

$$E = \sum_{i=1}^{N} w_i^{(m)} \exp[-y_i \alpha_m \phi_m(\boldsymbol{x}_i)] \tag{4}$$

donde

$$w_i^{(m)} = \exp[-y_i C_{m-1}(\boldsymbol{x}_i)] \tag{5}$$

para $i = 1, ..., N$.

## Ecuación 5

$$w_i^{(m)} = \exp[-y_i C_{m-1}(\boldsymbol{x}_i)]$$

- En la primera iteración, $w_i^{(1)} = 1$.
- Posteriormente, para cada nueva iteración, el vector $w^{(m)}$ representa el peso asignado a cada dato en el conjunto de entrenamiento en la $m$-ésima iteración.

## Ecuación 4

$$E = \sum_{i=1}^{N} w_i^{(m)} \exp[-y_i \alpha_m \phi_m(\boldsymbol{x}_i)]$$

La suma en la Ec. (4) se puede dividir de la siguiente manera:

$$E = \sum_{y_i = \phi_m(\boldsymbol{x}_i)} w_i^{(m)} \exp(-\alpha_m) + \sum_{y_i \neq \phi_m(\boldsymbol{x}_i)} w_i^{(m)} \exp(\alpha_m) \tag{6}$$

lo cual nos indica que el error total es el error ponderado de los aciertos ($e^{-\beta}$) y el error ponderado de los fallos ($e^{\beta}$).

## Ecuación 6

$$E = \sum_{y_i = \phi_m(\boldsymbol{x}_i)} w_i^{(m)} \exp(-\alpha_m) + \sum_{y_i \neq \phi_m(\boldsymbol{x}_i)} w_i^{(m)} \exp(\alpha_m)$$

La primera sumatoria se puede representar como $W_c \exp(-\alpha_m)$ y la segunda como $W_e \exp(\alpha_m)$:

$$E = W_c \exp(-\alpha_m) + W_e \exp(\alpha_m) \tag{7}$$

## Ecuación 7

$$E = W_c \exp(-\alpha_m) + W_e \exp(\alpha_m)$$

Para la selección de $\phi_m$, el valor exacto de $\alpha_m > 0$ es irrelevante, ya que para $\alpha_m$ fija, minimizar $E$ es equivalente a minimizar $e^{\alpha_m} E$ y por que

$$\exp(\alpha_m) E = Wc + W_e \exp(2\alpha_m) \tag{8}$$

Dado que $\exp(2\alpha_m) > 1$, la Ec. (8) se puede reescribir como

$$\exp(\alpha_m) E = (W_c + W_e) + W_e(\exp(2\alpha_m) - 1) \tag{9}$$

## Ejercicio #1

Verificar que la ecuación

$$\exp(\alpha_m)E = Wc + W_e \exp(2\alpha_m)$$

es igual a

$$\exp(\alpha_m)E = (W_c + W_e) + W_e(\exp(2\alpha_m) - 1)$$

## Ecuación 9

$$\exp(\alpha_m)E = (W_c + W_e) + W_e(\exp(2\alpha_m) - 1)$$

- Noten que $(W_c + W_e)$ es la suma total de todos los pesos de los datos en el conjunto de datos, una constante en la iteración en turno.
- El segundo término de la Ec. (9) se minimiza cuando en la $m$-ésima iteración se elige el clasificador con el menor error total $W_e$, i.e., el que tenga la menor proporción del error ponderado.
- En pocas palabras, tiene sentido elegir al que menor error tenga dentro de los candidatos para que entre al ensamble.

Ya que se eligió el $m$-ésimo miembro del ensamble, se debe determinar su peso $\alpha_m$.

## Ejercicio #2

Determinar

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\alpha_m} W_c \exp(-\alpha_m) + W_e \exp(\alpha_m)$$

donde

$$W_c = \sum_{y_i = \phi_m(\boldsymbol{x}_i)} \exp[-y_i C_{m-1}(\boldsymbol{x}_i)]$$

y

$$W_e = \sum_{y_i \neq \phi_m(\boldsymbol{x}_i)} \exp[-y_i C_{m-1}(\boldsymbol{x}_i)]$$

## Solución

$$\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}\alpha_m} = -W_c \exp(-\alpha_m) + W_e \exp(\alpha_m)$$

## Ejercicio #3

Igualen a cero y multipliquen por $\exp(\alpha_m)$:

$$-W_c \exp(-\alpha_m) + W_e \exp(\alpha_m)$$

## Ejercicio #3

Igualen a cero y multipliquen por $\exp(\alpha_m)$:

$$-W_c \exp(-\alpha_m) + W_e \exp(\alpha_m)$$

## Solución

Igualando a cero y multiplicando por $\exp(e\alpha_m)$ se obtiene que

$$-W_c + W_e \exp(2\alpha_m) = 0 \tag{10}$$

por lo que el óptimo se encuentra dado por

$$\alpha_m = \frac{1}{2} \ln\left(\frac{W_c}{W_e}\right) \tag{11}$$

**Ecuación 17**

$$\alpha_m = \frac{1}{2}\ln\left(\frac{W_c}{W_e}\right)$$

Recordando que $W$ es la suma total de los pesos, la Ec. (11) se puede escribir como

$$\alpha_m = \frac{1}{2}\ln\left(\frac{W - W_e}{W_e}\right) = \frac{1}{2}\ln\left(\frac{1 - e_m}{e_m}\right) \tag{12}$$

donde $e_m = W_e/W$ representa la razón del error dados los pesos de todos los puntos del conjunto de datos.

## Ejercicio #4

Verificar que

$$\alpha_m = \frac{1}{2}\ln\left(\frac{W_c}{W_e}\right)$$

es igual a

$$\alpha_m = \frac{1}{2}\ln\left(\frac{W - W_e}{W_e}\right) = \frac{1}{2}\ln\left(\frac{1 - e_m}{e_m}\right)$$

donde $e_m = W_e/W$.

1. De la lista de posibles clasificadores elegir al $\phi_m$ que minimice

$$W_e = \sum_{y \neq i \phi_m(\boldsymbol{x}_i)} w_i^{(m)}$$

2. Establecer el peso $\alpha_m$ del clasificador a

$$\alpha_m = \frac{1}{2} \ln \left( \frac{1 - e_m}{e_m} \right)$$

3. Actualizar los pesos de los datos para la siguiente iteración. Si $\phi(\boldsymbol{x}_i)$ es un fallo

$$w_i^{m+1} = w_i^m e^{\alpha_m} = w_i^m \sqrt{\frac{1 - e_m}{e_m}}$$

Si es un acierto

$$w_i^{m+1} = w_i^m e^{-\alpha_m} = w_i^m \sqrt{\frac{e_m}{1 - e_m}}$$

4. Para la selección del conjunto de datos, AdaBoost tiene dos opciones:
   - Realizar un muestreo aleatorio considerando los pesos de cada dato, i.e., un muestreo con importancia.
   - Utilizar todo el conjunto de datos original, considerando los pesos como una manera de aumentar o disminuir el error del ensamble.

5. El algoritmo se detiene cuando el número de modelos base es alcanzado, o bien, cuando encuentra un modelo perfecto.
6. Para realizar las predicciones, AdaBoost simplemente computa las predicciones de todos los predictores y las pondera por medios de los pesos $\alpha_j$. La clase predicha es aquella que recibe la mayoría de votos ponderados:

$$\hat{y}_i = \psi(\boldsymbol{x}_i) = \text{sign}\left(\sum_{j=1}^{M} \alpha_j \phi_j(\boldsymbol{x}_i)\right)$$

# Outline

- La idea principal yace en minimizar el error generado por el modelo de aprendizaje en cada paso.
- El error propuesto es el error exponencial.
- Se opera con el error, y se llega a que
  - $\phi_m$ es el modelo que menor error presente
  - $\alpha_m = \frac{1}{2}\ln\left(\frac{1-e_m}{e_m}\right)$, por medio de derivadas y arreglos con álgebra.
- Busca reducir sesgo, más no varianza.
- Usualmente se emplea con árboles de decisión.

# Bibliografía


[1] Yoav Freund and Robert E. Schapire. Experiments with a new boosting algorithm. *Machine Learning: Proceedings of the Thirteenth International Conference*, 1996.

[2] Yoav Freund and Robert E Schapire. A decision-theoretic generalization of on-line learning and an application to boosting. *Journal of Computer and System Sciences*, 55(1):119–139, aug 1997.

[3] Raul Rojas. Adaboost and the super bowl of classiers a tutorial introduction to adaptive boosting. Technical report, Freie Universitat Berlin, 2009.