

极客大学机器学习训练营 集成学习方法

王然

众微科技 Al Lab 负责人



- 集成学习的目的
- 2 基本集成学习方法
- 3 一些其他的尝试
- 4 参考文献



- 1 集成学习的目的
- ☑ 基本集成学习方法
- 一些其他的尝试
- 参考文献

集成学习的简介



- ▶ 最简单描述: 将多个模型的结果合并到一起进行预测;
- ▶ 一般来说,仅仅在预测性建模当中使用;
- 流行主要原因是数据科学竞赛;
- ▶ 但是其流行程度在逐渐减弱。

思考题



集成学习为什么会有效?

集成学习为什么有效



- 目前来说,很不幸我们还不清楚为什么集成学习会有效果;没有(?)相应的理论证明,只有实践支持;
- ▶ 几种常见的理由:
 - Error Correction Encoding;
 - ▶ "各取所长";
 - ▶ 过拟合;

Error Correction Encoding



- ▶ 假设原始的(正确的)encoding 为 1110110011;
- ▶ 为了保证信号传输的正确,我们选择用三次 encoding 来记录实际的信号:
 - **>** 1010110011;
 - **1110110011**;
 - **▶** 1110110011。
- ▶ 则三者投票之后,结果仍为正确的 encoding。

小练习



假设每位密码被污染的概率是 10%, 那么假设密码有八位, 最终解码正确的 概率是?

"各取所长"



- 假设我们将数据分为三种:非常容易预测的、有一定难度的、非常难以 预测的;
- 对于非常容易预测的,大部分模型都能预测对;
- 对于非常难以预测的,大部分(或者全部)模型都无法预测;
- 其他的观测是我们争取的重点,如果我们能够找到权重合适并可以加权 求和得到结果,帮助我们综合各个模型的优点,则理论上我们可以得到 较好的结果。

对于集成学习的启示



- ▶ 被集成的模型应该有一定的准确性;
- ▶ 被集成的模型应该在预测上有一定的区分。

区分的作用



- ▶ 假设我们的真实结果都是正样本;
- ▶ 假设我们的三个模型预测结果为:
 - **1**1111111100;
 - **11111111100**;
 - **>** 1011111100;
- ▶ 则最终结果为 1111111100, 准确度为 80%。

区分的作用:续



- ▶ 假设我们的真实结果都是正样本;
- ▶ 假设我们的三个模型预测结果为:
 - **11111111100**;
 - **0111011101**;
 - **1**000101111;
- ▶ 则最终结果为 1111111101;准确度为 90%。
- 当然这个例子是人为构建的。

过拟合的角度



- ▶ 尝试使模型过拟合;
- 这一点最为反常识;但是考虑在很多预测性建模例子当中,很多"最好"的模型都是严重过拟合的;
- 从稳定性角度来说,有宣称为过拟合的模型更不稳定,所以不应该使用 集成学习;
- 但是由于不同类型的模型可能能够抵御不同的异常情况,所以反而可能增加模型的准确性;
- 这在数据信息量较小的情况下尤其有意义。

竞赛的角度



- ▶ 竞赛中提交次数是有限的,加之提交有一定的随机性;
- ▶ 竞赛中一般只取最好的结果,而不是看最终的提交;
- 所以如果能知道怎样可以猜到一个有效的提交是很重要的摸奖条件;



- 集成学习的目的
- 2 基本集成学习方法
 - 集成学习的重要选择 加权求和 Stacking
- 一些其他的尝试
- 参考文献



- 集成学习的目的
- 2 基本集成学习方法
 - 集成学习的重要选择 加权求和 Stacking
- 一些其他的尝试
- △ 参考文献

是否要进行集成学习



- ▶ 竞赛: 基本答案是"是"。
- ▶ 实际建模:核心考量 → 建模效率和推断效率,后者尤其重要。

何时开始集成学习



- ▶ 早开始的优点:可以看到实际模型的效果、充分利用提交次数、充分利用已有模型效果;
- ▶ 早开始的问题: 过多算力浪费、过多精力浪费、思维定式。

将哪些模型进行集成:预测不同的来源



- 不同的模型结构 → 最常见;
 - ▶ 可来自于模型数学形式不同、训练方式不同甚至初始化不同;
- 不同的数据:
 - ▶ 不同的数据扩充结果 → 非结构化数据非常常见;
 - ★ 去掉不容易预测变量之后的结果 → 比较罕见;
- ▶ 不同的变量: 一般只有不同的人员在表格化竞赛中才会使用。

将哪些模型进行继承:子模型选择



- 子模型选择跟集成方式有关:一般来说,集成方式越复杂,则对于被集成模型的输入要求越小;
- ▶ 一般要求:
 - ▶ 同样模型选预测准确度高的;
 - 不同模型预测准确度应该一致,并且有一定区别;
 - ▶ 预测粒度尽可能一致。



- 集成学习的目的
- 2 基本集成学习方法
 - 集成学习的重要选择 加収求和 Stacking
- 一些其他的尝试
- △ 参考文献

算数平均



- ▶ 最基本的方法: 直接取算数平均值;
- ▶ 需保持预测粒度一致;
- 需保持模型的可信度类似。

其他方法



- ▶ 几何平均;
- ▶ 根据排序进行平均。

权重



- 权重的确定可能非常具备随机性;
- ▶ 举例: 五个模型中,最好的模型3票,其他模型各1票;
- ▶ 在 stacking 的最后一层,常常采用类似的方法。



- 集成学习的目的
- 2 基本集成学习方法
 - 集成学习的重要选择 加权求和 Stacking
- 一些其他的尝试
- 参考文献

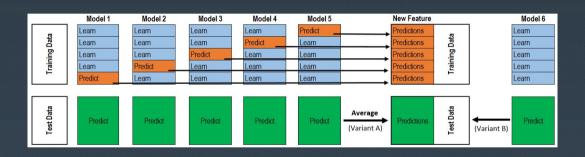
基本思路



- ▶ 使用模型的预测结果作为输入并进一步进行预测;
- ▶ 目的 (之一): 过拟合训练集;
- ▶ 问题: 为什么不能直接用训练集结果进行预测?

Stacking 基本图示





Stacking 所使用的模型



- ▶ 在最后一层,一般采用逻辑回归或者简单加权平均;
- 在中间,一般非线性的模型比线性模型效果更好;
- ▶ 同时,非线性模型不应该过于复杂。



- 集成学习的目的
- ☑ 基本集成学习方法
- 3 一些其他的尝试
- △ 参考文献

Adaboost



Given: $(x_1, y_1), ..., (x_m, y_m)$ where $x_i \in \mathcal{X}, y_i \in \{-1, +1\}$. Initialize: $D_1(i) = 1/m$ for i = 1, ..., m.

For $t = 1, \dots, T$:

- Train weak learner using distribution D_t .
- Get weak hypothesis $h_t: \mathcal{X} \to \{-1, +1\}.$
- Aim: select h_t with low weighted error:

$$\varepsilon_t = \Pr_{i \sim D_t} \left[h_t(x_i) \neq y_i \right].$$

- Choose $\alpha_t = \frac{1}{2} \ln \left(\frac{1 \varepsilon_t}{\varepsilon_t} \right)$.
- Update, for $i = 1, \dots, m$:

$$D_{t+1}(i) = \frac{D_t(i) \exp(-\alpha_t y_i h_t(x_i))}{Z_t}$$

where Z_t is a normalization factor (chosen so that D_{t+1} will be a distribution).

Output the final hypothesis:

$$H(x) = \operatorname{sign}\left(\sum_{t=1}^{T} \alpha_t h_t(x)\right).$$

Fig. 1 The boosting algorithm AdaBoost.

Stacking 中 Meta-feature 的引入



- 一般来说,将模型预测结果跟原始模型的变量同时输入模型是一个不太 合适的选择(容易导致过拟合);
- ▶ 但是将降维后的变量引入模型可能效果比较好;
- ▶ 常见的降维方法: tSNE+KNN。

Stacking 当中 Meta-feature 的引入(续)



- ▶ 可以将模型预测当作是普通的变量使用;
- ▶ 二阶的特征可能起到很大作用;
- 预测层级之间的差异可能起到很大作用。

Stacking 当中的随机调参



- ▶ 一般来说, stacking 当中都会选取效果最好的参数;
- 另一种思想是:不选取效果最好的模型,只纯粹做随机调参(但是需保证随机调参的基本质量);
- ▶ 可以作为 stacking 当中的一个输入;
- 耗费大量计算资源,一般只在比赛当中使用。



- 集成学习的目的
- ☑ 基本集成学习方法
- 一些其他的尝试
- 4 参考文献

