Ensemble methods

Sang Yup Lee

Ensemble approach

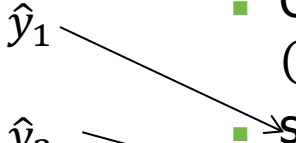
- Ensemble method
  - To combine several (weak) learners into a stronger leaner
  - Approaches
    - Bagging (Bootstrap Aggregating)
      - Resampling => many subsamples
      - Random forest
    - Boosting
      - 이전 learner의 부족한 부분을 이후의 learner가 보완
      - Gradient boosting
      - Adaptive boosting (AdaBoosting)

Bagging

- 참고논문
  - Breiman, L. (1996). Bagging predictors. *Machine learning*, *24*(2), 123-140.
- 기본 원리
  - 우리가 갖고 있는 학습 데이터(하나의 sample)를 이용하여 여러개의 subsample data 를 만들고, 각 subsample에서 예측값을 계산하고 그 값들을 이용하여 최종 예측을 하는 방법
  - subsample size = size of original data (usually)
  - (새로운 관측치에 대한) 예측
    - 회귀문제: 평균
    - 분류문제: majority voting (즉, 최빈값 사용)

Bagging

- Subsampling 방법
  - Bootstrapping
    - Random sampling with replacement (중복을 허용한 sampling 방법)
    - 중복을 허용했기 때문에, 2번이상 추출된 관측치 존재
    - 같은 sample size라고 하더라도 포함된 관측치들이 어느정도 다르다.
  - Example
    - Original dataset (original sample) => $(dp_1, dp_2, dp_3, dp_4, dp_5, dp_6, dp_7, dp_8, dp_9, dp_{10})$
    - sample1 => $(dp_3, dp_6, dp_7, dp_3, dp_1, dp_{10}, dp_6, dp_9, dp_5, dp_2)$
    - sample2 => $(dp_5, dp_2, dp_1, dp_1, dp_{10}, dp_9, dp_8, dp_7, dp_7, dp_4)$



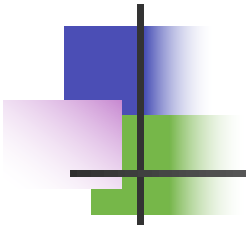
  - Subsample size => hyperparameter

Bagging

- 주효과
  - 모형의 일반화 가능성 증가 ⇒ unseen data 에 대해서 모형의 성능 증가
- Python code
  - "Bagging.ipynb"

Random Forest

- 기본원리
  - Bagging 의 한계
    - 각 decision node에서 모든 feature를 고려해서 data를 split하게 되는데, 여러개의 tree를 사용할 지라도 매번 비슷한 feature 사용 (subsample 간의 차이 미미) ⇒ 즉, 학습데이터 특성에 영향을 많이 받는다 ⇒ overfitting problem
  - Bagging의 확장
    - 각 decision node에서 데이터를 split하는데 모든 feature를 사용하는 것이 아니라 random하게 선택된 일부의 feature들만을 사용
    - 사용되는 feature의 수 = $\sqrt{p}$
    - p = 전체 feature의 수



Random Forest

- Python code
  - “Bagging.ipynb”

Random Forest

- oob_score parameter
  - oob_score: bool, default=False
    - Whether to use out-of-bag samples to estimate the generalization score. Only available if bootstrap=True.

Boosting

Boosting

- 기본원리
  - 학습 데이터에 대해서 tree (혹은 learner)를 순차적으로 (sequentially) 적용
  - 각 단계의 tree (혹은 learner)의 목적은 이전 tree가 잘 설명하지 못한 부분을 보완하는 것
  - 종류
    - adaptive boosting (AdaBoosting)
    - gradient boosting

AdaBoosting

AdaBoosting (Adaptive boosting)

- 기본원리
  - Adaboosting은 예측이 제대로 되지 않은 관측치들에 가중치를 주어서 그 다음 learner가 해당 관측치들을 더 많이 고려하게 하는 방법
  - Freund, Y., Schapire, R., & Abe, N. (1999). A short introduction to boosting. *Journal-Japanese Society For Artificial Intelligence*, *14*(771-780), 1612.
  - 보통 분류문제에 적용

AdaBoosting

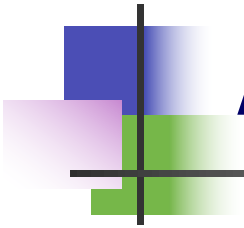
- 기본원리
  - 이전 learner에 의해서 예측이 제대로 잘 되지 않은 data points의 weight 값을 크게해서 다음 단계에서는 그 data points를 더 많이 고려하게끔 만드는 것
  - 틀린 것은 가중치를 많이주고, 맞은 것은 가중치를 적게 주겠다라는 뜻
  - weight가 큰 관측치의 경우 다음 학습에서 더 많이 고려 됨

AdaBoosting

- 종속변수가 취할 수 있는 값 ⇒ +1, -1
- 작동순서
  - 1. 학습데이터에 있는 모든 관측치의 weight를 동일하게 설정 ⇒ 1/n
    - 가중치의 합 = 1이 되게 함
  - 2. 각 base learner에 대해서 아래 과정 반복
    - Subsampling with replacement using the weights
      - 가중치가 높을수록 subsample에 뽑힐 확률이 큼
    - 학습 with the subsample
    - 학습 결과를 original dataset에 적용해서 error 정도를 계산
    - 전체 에러 계산
      - 전체 에러 (Total error) = # of misclassified instances / n
    - 모형의 성능 계산 (모형 t)
      - $\alpha_t = \frac{1}{2}\ln(\frac{1-TE}{TE})$
    - Update the weights

AdaBoosting

- 작동순서 (cont'd)
  - Update the weights
    - For misclassified instances: $w_t = w_{t-1} \cdot e^{\alpha_t}$
    - For correctly classified instances $w_t = w_{t-1} \cdot e^{-\alpha_t}$
    - 의미: 잘못 예측한 것의 가중치를 더 크게 한다.
  - t = t + 1
  - 다시 처음단계로 (앞의 2 step)
- 새로운 관측치에 대한 종속변수 값 예측
  - $sign(\sum_{t=1}^{T} \alpha_t \cdot M_t(x))$



AdaBoosting

- Python code
  - “AdaBoosting_example.ipynb”

Gradient boosting

Gradient boosting

- 기본원리
  - 각 단계에서의 tree (혹은 learner)가 이전 단계의 tree가 설명하지 못한 부분, 즉 나머지 (residual)를 추가적으로 설명하는 것
  - Friedman, J. H. (2001). Greedy function approximation: a gradient boosting machine. *Annals of statistics*, 1189-1232.
- 설명
  - 회귀문제를 예로 설명
  - 분류문제의 경우도 비슷하게 작동

Gradient boosting

- 1단계
  - Fit the model (i.e., a decision tree) into the data
  - Obtain predicted values for data points
    - $\hat{y}_{1,i}$, 이것이 첫번째 단계에서의 예측치가 됨
- 2 단계에서의 예측치
  - 앞 단계의 모형이 설명하지 못한 부분(나머지)을 구함
  - Residuals: $r_{1,i} = y_i - \hat{y}_{1,i}$
  - 위에서 얻은 r을 종속변수로 다시 DT 모형을 적용 => 예측치를 구함, $\hat{r}_{1,i}$
  - 이전 단계에서의 예측치 (즉, $\hat{y}_{1,i}$)에 $\hat{r}_{1,i}$를 더해서 종속변수의 예측치를 업데이트 함
  - 즉, $\hat{y}_{2,i} = \hat{y}_{1,i} + \hat{r}_{1,i}$
  - 이러한 과정을 반복
- 최종 예측치: $\hat{y}_i = \hat{y}_{1,i} + \sum_{t=1}^{T} \hat{r}_{t,i}$
  - Learning rate를 적용하는 경우:$\hat{y}_i = \hat{y}_{1,i} + \eta \sum_{t=1}^{T} \hat{r}_{t,i}$

Gradient boosting

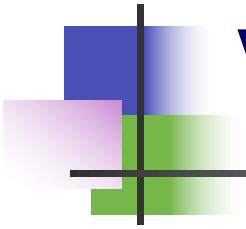
- sklearn class: GradientBoostingRegressor
  - https://scikit-learn.org/stable/modules/generated/sklearn.ensemble.GradientBoostingRegressor.html
- Python code
  - See "Gradient_Boosting_example.ipynb"

Gradient boosting

- Important hyperparameters
  - learning_rate (also known as shrinkage)
    - It shrinks the contribution of individual trees so that no tree has too much influence when building the model.
    - learning_rate_values = [0.001, 0.01, 0.05, 0.1, 0.15, 0.2, 0.3, 0.5, 1.0]
  - subsample
    - The fraction of samples to be used for fitting the individual base learners.
    - subsamples = [1, 0.9, 0.8, 0.7, 0.6, 0.5]
    - subsample 을 사용하면 (보통) 일반화 정도가 커진다.

Gradient boosting

- Gradient boosting for classification
  - The overall process is similar to that of a regression problem.
  - Refer to the following blogs, if you are interested.
    - https://tyami.github.io/machine%20learning/ensemble-5-boosting-gradient-boosting-classification/
    - https://blog.paperspace.com/gradient-boosting-for-classification/



Variants of gradient boosting

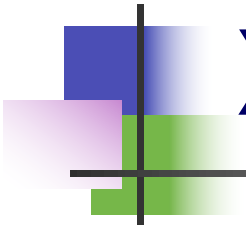
- Variants of gradient boosting
  - XGBoosting
  - Light GBM
  - Cat Boosting

XGBoosting

- XGBoosting (eXtreme Gradient Boosting)
  - Presented by Tianqi Chen in 2016
    - https://arxiv.org/pdf/1603.02754.pdf
    - https://xgboost.readthedocs.io/en/latest/tutorials/model.html
  - Gradient Boosting의 확장을 통한 속도와 성능의 개선
    - 중요 개선 부분: Regularization (L1 or L2)

XGBoosting

- XGBoosting (Extreme Gradient Boosting)
  - Regularization term을 포함
  - 각 단계에서의 objective function
    - $\text{obj}^{(t)} = \sum_{i=1}^{n} l\left(y_i, \hat{y}_i^{(t)}\right) + \Omega(f_t)$
    - $\hat{y}_i^{(t)} = \hat{y}_i^{(t-1)} + f_t(x_i)$
    - $l\left(y_i, \hat{y}_i^{(t)}\right)$은 일반적으로 squared error 즉, $\left(y_i - \hat{y}_i^{(t)}\right)^2$
    - At t, find f_t that minimizes the objective function.



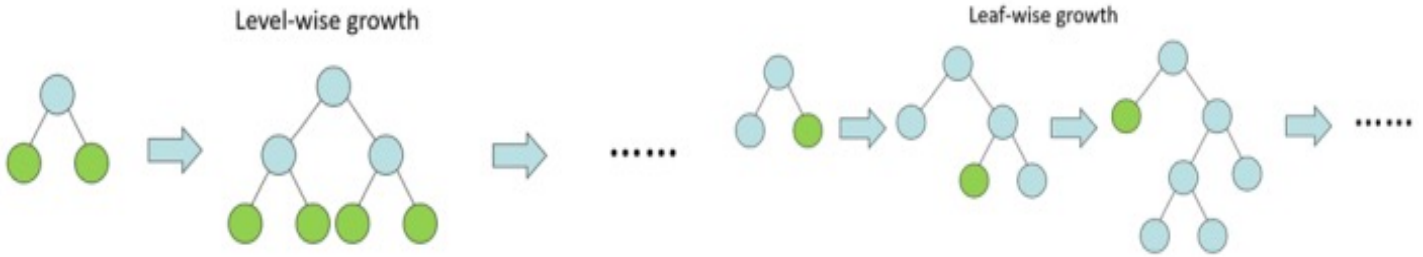
XGBoosting

- Python code
  - Installation
    - pip install xgboost
  - “XGBoost.ipynb”

Light GBM

- Light GBM (Light Gradient Boosting Model)
  - Released by Microsoft in 2017 (XGBoosting의 확장)
  - 자세한 설명은 https://lightgbm.readthedocs.io/en/latest/ 참고
  - 주요 특징
    - Leaf-wise split

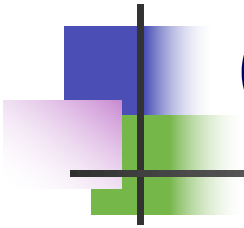
모든 leaf node 중에서 loss reduction에 가장 큰 기여를 하는 노드를 split



    - Gradient-based One-Side Sampling (GOSS)
      - GOSS keeps all the instances with large gradients and performs random sampling on the instances with small gradients. 즉, 에러 정도가 큰 관측치는 모두 사용하고, 에러 정도가 작은 관측치의 일부만 random sampling 방법을 통해서 사용
      - Large gradient => large error => (모형의 성능을 개선하는데 있어서) 더 중요한 역할

Light GBM

- 설치 필요
  - pip install lightgbm
- Python code
  - “lightgbm.ipynb”



CatBoost

- CatBoost
  - Category Boost
  - It was released by a company named Yandex in 2017.
  - Extension of gradient boosting
  - Works well with categorical variables
  - https://catboost.ai/docs

[참고] 서로 다른 모형들 사용하기

- 분류문제: VotingClassifier
  - https://scikit-learn.org/stable/modules/generated/sklearn.ensemble.VotingClassifier.html
  - See "Voting_classifier_example.ipynb"
- 회귀문제: VotingRegressor
  - https://scikit-learn.org/stable/modules/generated/sklearn.ensemble.VotingRegressor.html