앙상블모형

목차

1) 앙상블모형이란?
2) 앙상블모형의 종류

1. 앙상블 모형이란?

앙상블모형이란?

1) 앙상블모형의 소개

- 앙상블 (ensemble) 모형이란 주어진 데이터를 이용하여 여러 개의 서로 다른 예측모형들을 생성한 후, 이러한 예측모형들의 예측결과들을 종합하여 하나의 최종 예측결과를 도출해 내는 방법

  - 앙상블모형은 목표변수의 형태에 따라 분류분석에도 사용가능하고, 회귀분석의 경우에도 사용가능
  - 현실적으로, 앙상블모형은 대부분 분류모형에서 사용되고 있는 실정

- 앙상블모형은 훈련데이터에서 B개 (B는 50, 100, 200 등의 값을 사용함)의 서로 다른 분류기의 예측을 종합하는 방법으로 주로 다수결 방법이 사용

앙상블모형이란?

1) 앙상블모형의 소개

- 다수결 방식에는 단순 다수결방식과 가중 다수결 방식

$$1\text{이라 예측} : \frac{1}{B}\sum_{i=1}^{B}\hat{T}_i > 0.5 \qquad 1\text{이라 예측} : \sum_{i=1}^{B} W_i\hat{T}_i > 0.5$$

$$0\text{이라 예측} : \frac{1}{B}\sum_{i=1}^{B}\hat{T}_i \le 0.5 \qquad 0\text{이라 예측} : \sum_{i=1}^{B} W_i\hat{T}_i \le 0.5$$

  - 단, 각 분류기의 가중치인 W_i는 각 분류기 오류율의 역수 개념. 즉, 성능이 우수한 분류기에 가중치를 더 부여

- 대표적 분류앙상블 방법중에 배깅과 랜덤포레스트 방법은 단순 다수결방안을 사용하고, 부스팅 방법은 가중 다수결 방안을 사용

앙상블모형이란?

1) 앙상블모형의 성공요인

- 앙상블 방법이 성공하기 위해서는 앙상블 집합내에 구축되는 분류기 (classifier) T_i 가 서로 유사하지 않고, 매우 다양

  - 앙상블모형에 사용되는 각각의 분류기 T_i 는 같은 분류모형에 의해서 생성될 필요는 없음

  - 만약 나무모형 한 종류의 모형을 이용하여 B개의 분류기를 생성해 낸다면 다음과 같은 방법들을 활용해서 다양성을 확보

앙상블모형이란?

2) 앙상블모형의 성공요인

- 앙상블 방법이 성공하기 위해서는 앙상블 집합내에 구축되는 분류기 (classifier) T_i 가 서로 유사하지 않고, 매우 다양

  - 앙상블모형에 사용되는 각각의 분류기 T_i 는 같은 분류모형에 의해서 생성될 필요는 없음

  - 만약 나무모형 한 종류의 모형을 이용하여 B개의 분류기를 생성해 낸다면 다음과 같은 방법들을 활용해서 다양성을 확보

앙상블모형이란?

2) 앙상블모형의 성공요인

(1) 데이터의 다양성

- 붓스트랩 방법은 반복이 있는 확률임의추출 방법을 의미하는데, 훈련데이터를 L 이라고 한다면 붓스트랩 방법은 $L_1, \ldots, L_B$ 개의 데이터를 생성
- 붓스트랩 방법은 배깅과 랜덤포레스트 앙상블 방법에서 사용

앙상블모형이란?

2) 앙상블모형의 성공요인

(2) 나무모형 생성의 다양성

- 나무모형을 적합시킬 때, 분할방법에 변화를 주어 나무모형이 다양해지도록 만드는 방법
- 훈련데이터 L 은 변동없이 그대로 있을지라도, 나무모형의 분할방법에 임의성을 가미
- 중간마디에서 분할후보점을 선발할 때에 전체 변수가 아닌, 임의의 변수의 부분집합중에서 선발하고, 그중에서 분할개선도를 최대화 시키는 분할점을 탐색(랜덤포레스트 방법에서 이 방법을 활용)

2. 앙상블모형의 종류

앙상블모형의 종류

1) 배깅 (Bagging) 방법

- 배깅은 bootstrap aggregating 의 약어로서, 훈련데이터로부터 붓스트랩 데이터를 B번 생성하여 각 붓스트랩 데이터 마다 분류기를 생성한 후 그 예측 결과를 앙상블하는 방법

  - B는 앙상블의 크기라고 정의하며, 일반적으로 50을 많이 사용

앙상블모형의 종류

1) 배깅 (Bagging) 방법

(1) 훈련데이터 $L = \{(x_i, y_i), i = 1, \ldots, n\}$ 을 정의.

여기서 x_i 는 입력변수 벡터이고 y_i 는 목표변수

(2) L로부터 B개의 붓스트랩 데이터 $L_1, \ldots, L_B$ 를 생성

(3) 각 붓스트랩 데이터 $L_1, \ldots, L_B$ 에 대하여 분류기 $T_1, \ldots, T_B$ 를 생성.
흔히, $T_1, \ldots, T_B$ 는 분류나무

(4) B개의 분류기를 결합시켜 최종 예측모형 $\hat{f}(x)$ 를 생성

단, $\hat{f}(x) = \arg\max_j \{\sum_{b=1}^{B} I(T_b(x) = j), j = 1, \ldots, J\}$

이고, x 는 예측하고자 하는 관찰치의 입력변수 벡터값.
분류모형인 경우 $\hat{f}(x)$ 는 다수결투표에 따라 집단을 분류하는 것과 같음

앙상블모형의 종류

1) 배깅 (Bagging) 방법

- 배깅 방법은 불안정한 분류방법의 예측력을 획기적으로 향상시킨다고 알려져 있음 (데이터의 미세한 변동에도 적합된 모형의 결과가 많은 변화가 생기는 분류모형)

  - 분류나무 중에서도 가지치기를 사용하지 않은 최대나무를 사용하는 것이 더 예측정확도가 좋다고 알려져 있음
    - 가지치기를 사용하지 않은 경우에 더 불안정한 분류방법이 되기 때문

앙상블모형의 종류

2) 부스팅 (Boosting) 방법

- 부스팅 (boosting) 방법은 프로인드와 샤파이어 (Freund and Schapire, 1997)에 의해 개발된 분류앙상블 방법

  - 배깅과 마찬가지로 B개의 분류기를 생성하여 종합하는 방법인데, 분류기를 생성하는 방식과 종합하는 방식이 약간 상이

- 부스팅에 사용되는 분류기는 오분류율이 랜덤하게 예측하는 것보다 약간이라도 좋은 예측모형이기만 하면 효과가 있다고 알려져 있음

  - 예측력이 약한 분류모형들을 결합하여 강한 예측모형을 만드는 과정
    - 부스팅방법을 실행하는 알고리즘 중에서 가장 많이 사용되는 아다부스트 (AdaBoost : adaptive boosting) 방법

앙상블모형의 종류

2) 부스팅(Boosting) 방법

(1) 가중치 반영된 분류기 생성 방식

- 훈련데이터 관찰값들의 가중치를 반영한 분류기를 생성하는 방식
- CART 방법의 지니지수 공식은 각 관찰치들이 균등한 가중치를 갖는다는 것을 가정($p(j|t)=\frac{n_j}{n}$)
- 만약 관찰치에 따라서 더 높은 가중치를 갖는 경우가 있다면 지니지수의 공식에서 $p(j|t)$ 값이 이를 반영
  - 각관찰치별가중치가 w_i 라고한다면, $p(j|t)=\sum_{i}^{n} w_i I[y_i=j]$

앙상블모형의 종류

2) 부스팅(Boosting) 방법

(1) 가중치 반영된 분류기 생성 방식

- 부스팅에서는 오분류가 발생한 데이터의 가중치를 높게 설정

∵ 분류기가 생성될때 가중치가 높은 관찰값에 대한 오분류를 줄이는 방향으로 적합될 것이기 때문에, 궁극적으로는 오분류율을 줄일 수 있기 때문(현 분류기의 가중치는 직전 단계의 분류기에 의해 결정)

따라서 앙상블이 진행됨에 따라 지속적으로 오분류되는 관찰치는 더 높은 관심을 받게 되는 결과

- 가중치 조정방식의 아다부스트 (AdaBoost : adaptive boosting)

앙상블모형의 종류

2) 부스팅(Boosting) 방법

(1) 훈련데이터 $L=\{(x_i,y_i),i=1,...,n\}$ 을 정의.

여기서 x_i 는 입력변수 벡터이고 y_i 는 목표변수

(2) 가중치 $w_i=\frac{1}{n},i=1,...,n$ 을 초기화

(3) b=1,...,B에 대하여 다음의 과정을 반복 수행

(a) 가중치 W_i 를 이용하여 분류기 $T_b(x)$ 를 생성

(b) $T_b(x)$ 를 L 에 적용하여 각 데이터의 오분류 여부를 판별

(c) Err_b 를 다음과 같이 계산

$$Err_b=\sum_i^n w_i I[y_i \neq T_b(x_i)]$$

앙상블모형의 종류

2) 부스팅(Boosting) 방법

(d) 분류기의 중요도 α_b 를 다음과 같이 계산

$$\alpha_b = \frac{1}{2}\log\frac{1-Err_b}{Err_b}$$

(e) 가중치 W_i 를 다음과 같이 업데이트

$$w_i = \frac{w_i}{Z}\exp\{\alpha_b I[y_i \neq T_b(x_i)] - \alpha_b I[y_i = T_b(x_i)]\}, i = 1,...,n$$

여기서 Z는 W_i의 합이 1이 되도록 만들기 위한 상수

앙상블모형의 종류

2) 부스팅(Boosting) 방법

(4) 단계 3)에서 생성한 B개의 분류기를 결합하여 최종 예측모형 $\hat{f}(x)$를 생성

단, $\hat{f}(x) = \arg\max_j \{\sum_{b=1}^{B} I(T_b(x) = j), j = 1, ..., J\}$

이고, x 는 예측하고자 하는 관찰치의 입력변수 벡터값

- 분류모형인 경우 $\hat{f}(x)$는 α_b라는 가중치를 반영한 가중투표 방법으로 집단을 분류하는 것과 같음
- 뿌리노드를 한번만 분할하는 나무인 스텀프 (stump) 나무, 혹은 스텀프 나무를 한번 더 분할하는 깊이가 2인 나무모형을 적합하여 사용하여도 훌륭한 예측 정확도를 보임

앙상블모형의 종류

3) 랜덤포레스트(Random Forest) 방법

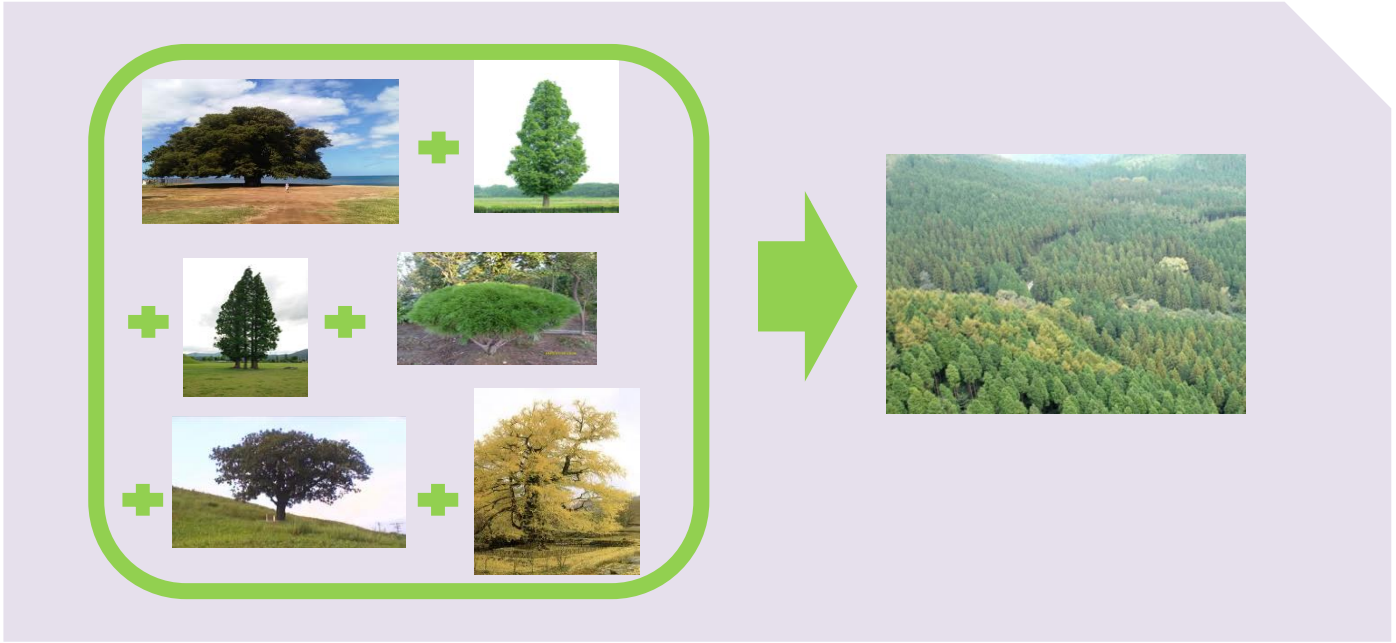
- 랜덤포레스트 방법은 배깅과 부스팅보다 더 정확한 예측력을 가지고 있다고 알려져 있음

  - 특히 입력변수의 개수가 많을 때에는 그 효과가 극대화
  - 랜덤포레스트에서 각 나무모형들을 생성할때는, 랜덤의 속성을 최대화 하기 위해 붓스트랩과 더불어 입력변수들에 대한 무작위 추출을 결합하는 방법을 취함

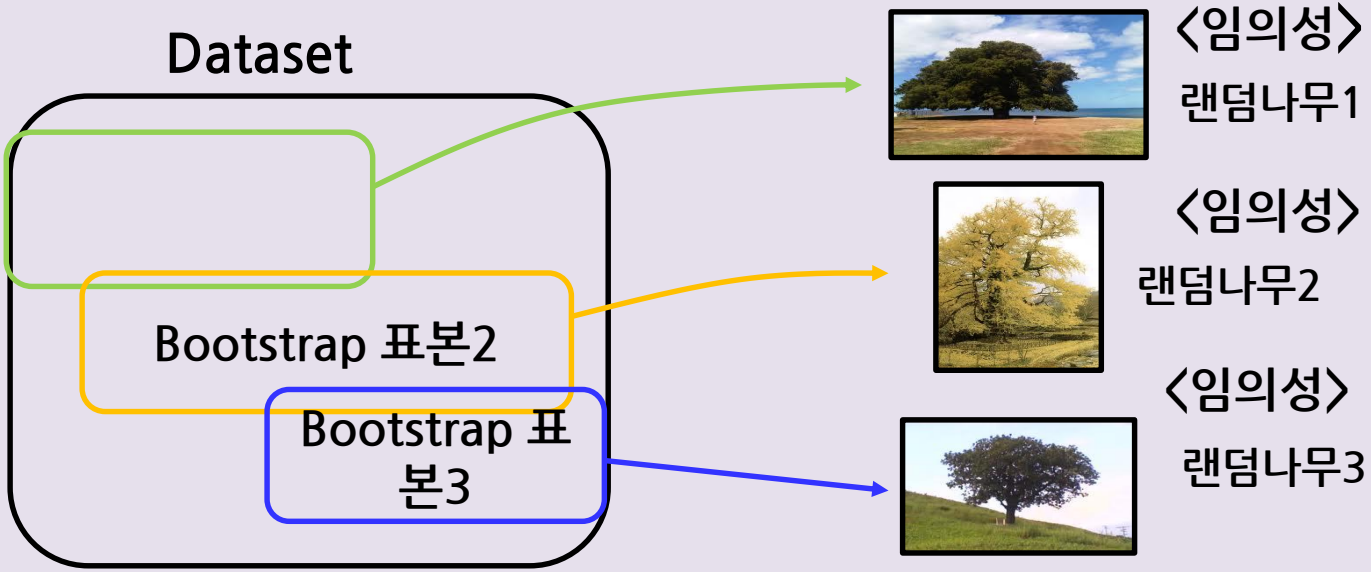
앙상블모형의 종류

❖ 랜덤포레스트(Random Forest) 특징

➢ 임의성(Randomness) + 나무모형의 집합 = 예측력 향상



앙상블모형의 종류


Dataset
Bootstrap 표본2
Bootstrap 표본3
〈임의성〉
랜덤나무1
〈임의성〉
랜덤나무2
〈임의성〉
랜덤나무3

앙상블모형의 종류

❖ 나무들의 결합

랜덤 나무1

랜덤 나무2

랜덤 나무3

선형 결합

Random Forests

앙상블모형의 종류

3) 랜덤포레스트(Random Forest) 방법

(1) 훈련데이터 $L=\{(x_i,y_i),i=1,...,n\}$ 을 정의.

여기서 x_i^*는 입력변수 벡터이고 y_i는 목표변수. 입력변수는 p개라 가정.
즉, $x_i=(x_{i1},...,x_{ip})'$ 이고 입력변수를 랜덤 추출한 벡터 x_i^*는 x_i에서 M개의 변수로 구성된 입력변수집합($M \square p$)

(2) x_i 로부터 B개의 붓스트랩 데이터 $L_1,...,L_B$를 생성

(3) L_b를 이용하여 $T_b(x)$를 생성. 단, $T_b(x)$를 생성할 때 매 중간노드마다 x_i를 사용하지 않고, x_i^*를 사용하여 나무모형을 생성

(4) b=1,...,B에 대하여 (3)의 과정을 반복 수행

앙상블모형의 종류

3) 랜덤포레스트(Random Forest) 방법

(5) 1) B개의 분류기를 결합시켜 최종 예측모형을생성

단, $\hat{f}(x) = \arg\max_j \{\sum_{b=1}^{B} I(T_b(x) = j), j = 1, ..., J\}$

이고, x는 예측하고자 하는 관찰치의 입력변수 벡터값

- 분류모형인 경우 $\hat{f}(x)$는 다수결투표에 따라 집단을 분류하는 것과 같음
- 랜덤포레스트 방법에서는 최적의 M값을 선택하는 방법은 알려져 있지 않지만, 브레이먼 (Breiman, 2001)은 $M = \sqrt{p}$로 하거나 혹은$M = \frac{p}{3}$를 추천하며 또한 M의 최소값으로 5를 추천

- 배깅 방법과 마찬가지로 랜덤포레스트 방법은 가지치기를 사용하지 않은 최대나무를 사용하는 것이 더 예측정확도가 좋다고 알려져 있음