Machine Learning

Ensemble Learning

Present by Sangmin Bae

Contents

Part One

Bagging

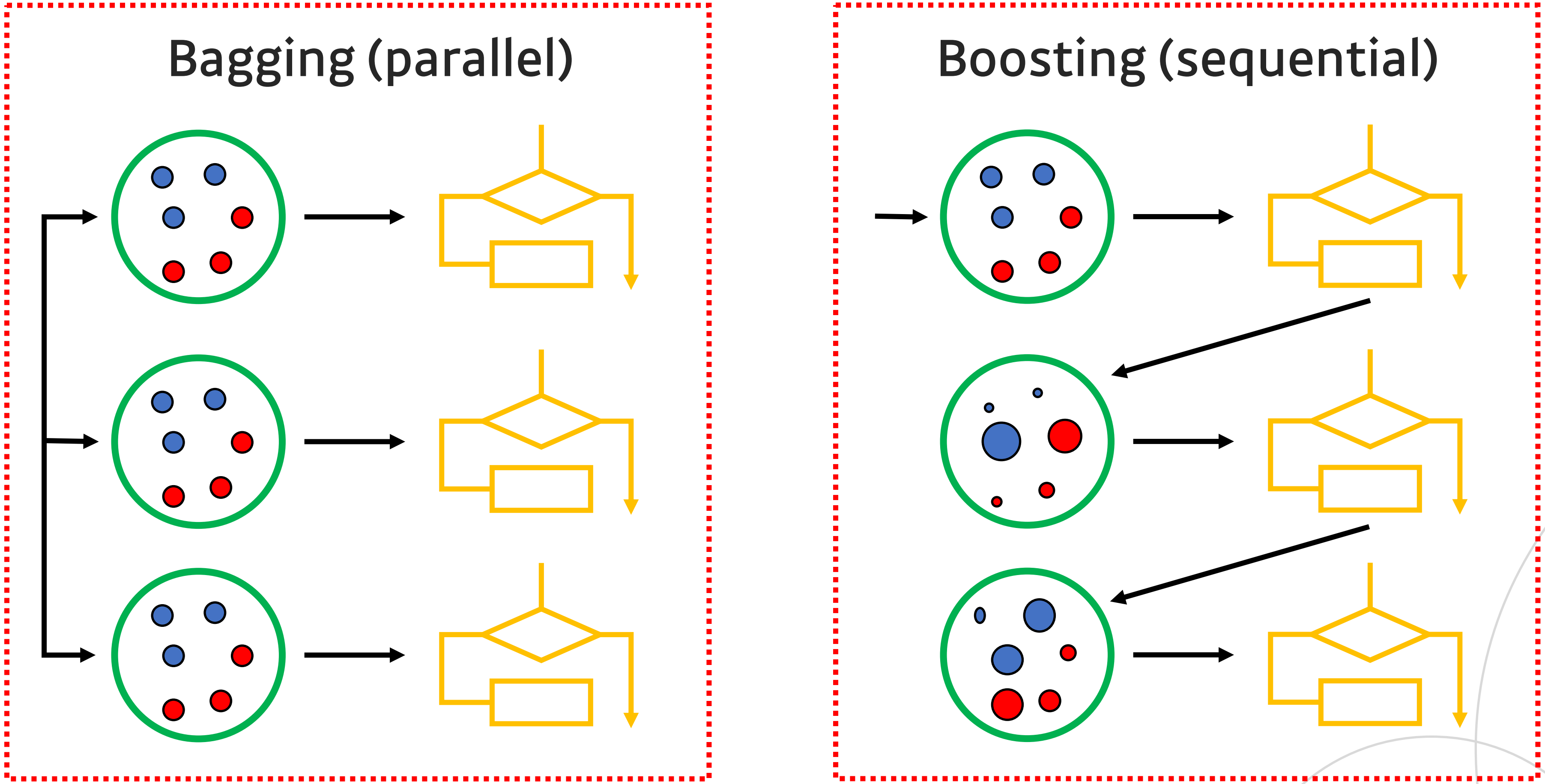
Ensemble Learning (1)

앙상블 학습 (ensemble learning)

- 앙상블 학습은 **여러 개의 모델을 학습시켜, 다양한 예측 결과들을 이용**하는 방법론
- 모든 머신 러닝 모델과 회귀, 분류 문제 모두에 적용 가능함
- 보통 결정 트리에서 자주 사용됨
- 크게 Bagging과 Boosting 두 가지 방법론이 존재

Ensemble Learning (2)

앙상블 학습 (ensemble learning)



Booststrap (1)

부트스트랩 (bootstrap)

- 모수의 분포를 정확히 추정하기 위해선 더 많은 표본 데이터셋이 필요함
- 하지만 표본을 계속 얻는 것은 현실적으로 어려움
- 현재 가지고 있는 샘플을 복원 추출(sampling with replacement)하여 여러 개($\boldsymbol{B}$개)의 데이터셋을 만듬
- $\sigma_\alpha = \sqrt{\frac{1}{B-1}\sum_{i=1}^{B}\left(\widehat{\alpha}_i - \frac{1}{B}\sum_{j=1}^{B}\hat{\alpha}_j\right)^2}$

Booststrap (2)

부트스트랩 (bootstrap) with $\mathbf{B} = 2$

Obs	X	Y
1	4.3	2.4
2	2.1	1.1
3	5.3	2.8

Obs	X	Y
3	5.3	2.8
1	4.3	2.4
3	5.3	2.8

Obs	X	Y
2	2.1	1.1
2	2.1	1.1
1	4.3	2.4

Booststrap (3)

부트스트랩 (bootstrap) with n obs.

- j-th 샘플이 첫번째 bootstrap observation으로 뽑히지 않을 확률: $(\mathbf{1}-\mathbf{1}/\boldsymbol{n})$
- j-th 샘플이 두번째 bootstrap observation으로 뽑히지 않을 확률: $(\mathbf{1}-\mathbf{1}/\boldsymbol{n})$
- 전체 bootstrap 샘플에 j-th 샘플이 포함되지 않을 확률: $\left(\mathbf{1}-\frac{\mathbf{1}}{\boldsymbol{n}}\right)^{\boldsymbol{n}}$
- 데이터 개수 N이 충분히 많을 때: $\lim_{n\to\infty}\left(\mathbf{1}-\frac{\mathbf{1}}{\boldsymbol{n}}\right)^{\boldsymbol{n}}=\frac{\mathbf{1}}{\boldsymbol{e}}$
- B개의 bootstrap 데이터셋을 생성했을 때, j-th 샘플이 없는 데이터셋의 비율: $\frac{\mathbf{1}}{\boldsymbol{e}}\approx\mathbf{1}/\mathbf{3}$

Bagging (1)

Motivation of Bagging

- 각각 σ^2 분산을 가진 n개의 **독립적인** observation $(Z_1, \cdots, Z_n)$
- 관측의 평균 $\bar{Z}$에 대한 분산은 $\boldsymbol{\sigma^2/n}$
- 여러 관측을 평균내면 분산을 줄여줌
- 하지만 다수의 학습 데이터셋을 얻는 것은 현실적으로 어려움

Bagging (2)

배깅 (Bagging)

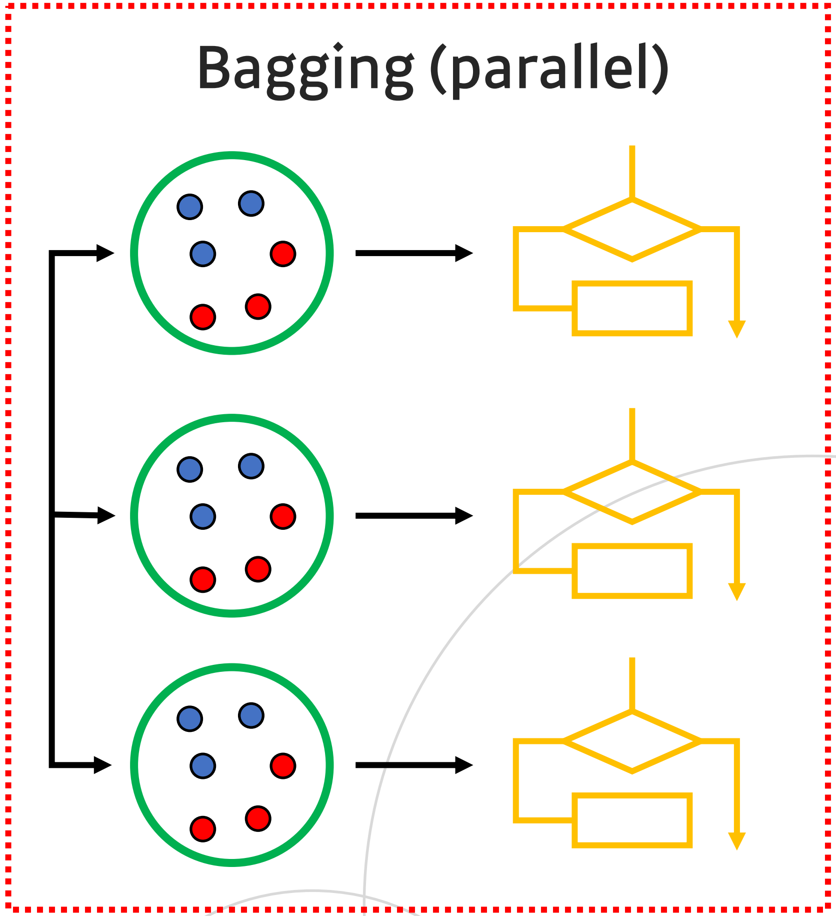
- Bootstrap을 이용해, 한개의 학습 데이터셋으로부터 B개의 데이터셋을 추출
- 각각의 데이터셋으로 $\hat{\boldsymbol{f}}^{*\boldsymbol{b}}(\boldsymbol{x})$ 모델을 학습함
- 모든 예측치를 평균(회귀)내거나, majority vote(분류)를 취해 분산 오류를 낮춤

$$\hat{f}_{bag}(x) = \frac{1}{B}\sum_{b=1}^{B} \hat{f}^{*b}(x) \quad \text{or} \quad \hat{f}_{bag}(x) = \arg\max_{k} \hat{f}^{*b}(x)$$

Bagging (3)

배깅 (Bagging)

- Bagging, 또는 Bootstrap aggregation이라 부르며, 보통 결정 트리에서 많이 사용됨



Bagging (3)

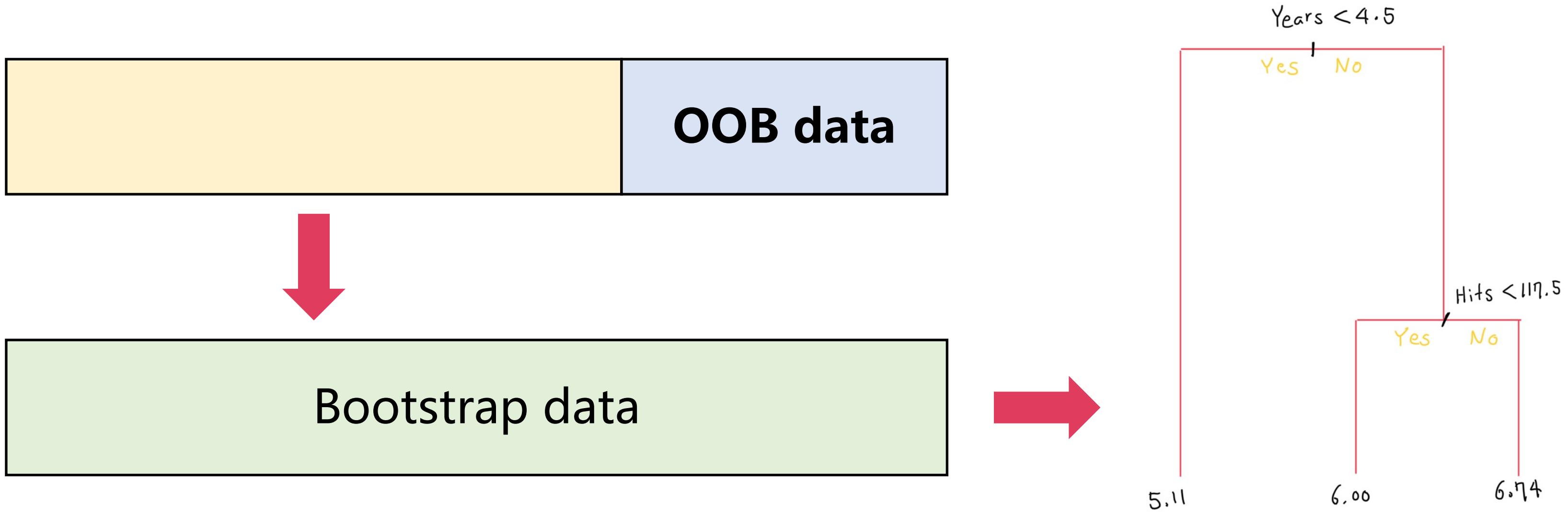
배깅 (Bagging)

- 배깅을 사용하면,
  1. 결정 트리의 성능면에서의 단점을 보완 가능
  2. 학습 결과에 대한 해석력이 떨어짐
- 특히, 어떤 피처(variable)가 가장 중요한지 판단이 힘듦
- B개의 결정 트리에서 각 variable에 따른 split으로 **RSS(회귀) 혹은 Gini index (분류)의 감소량을 평균**내 순위를 매김

Out-of-Bag Error Estimation (1)

OOB error

- Bagged model을 사용하면 **test error를 쉽게 추정**할 수 있음
- 배깅은 bootstrap을 사용하기 때문에, **대략 2/3 샘플만으로 하나의 결정 트리를 학습함**
- 하나의 Bagged tree를 학습할 때 사용되지 않은 샘플들을 out-of-bag (OOB)로 부름



Out-of-Bag Error Estimation (2)

OOB error

- **OOB prediction**: i-th 샘플이 포함되지 않은 bootstrap 데이터셋으로 학습된, 대략 B/3개 tree들의 i-th 샘플에 대한 평균(회귀) 혹은 majority vote(분류)
- **OOB error**: 각 샘플들의 OOB prediction으로 얻은 오류
- OOB error는 test error에 대한 유효한 추정값이 됨
- B가 충분히 많을 때, OOB error는 LOOCV와 거의 동일함

Random Forests (1)

랜덤 포레스트 (random forests)

- Bagged tree 사이의 상관관계를 없애 성능을 향상시킨 알고리즘
- 원래는 p개의 variable을 모두 고려해 split을 결정해 결정 트리를 학습함
- 만약 강력한 variable이 있으면, B개의 모든 트리가 top split으로 이를 사용할 것임
- 상관관계가 커지면 (= high $\mathbf{Cov}(\hat{f}^{*i}, \hat{f}^{*j})$), 분산 오류가 크게 줄어들지 못함

$$Var(\bar{Z}) = \frac{Var(Z_1) + Var(Z_2) + 2Cov(Z_1, Z_2)}{n^2}$$

Random Forests (2)

랜덤 포레스트 (random forests)

- p개의 variable 중 m개를 랜덤하게 선택해 결정 트리를 학습함
- 상관관계가 줄어든 결정 트리를 사용하기 때문에, 분산 감소 효과가 증폭됨
- 일반적으로 $m \approx \sqrt{p}$ 값을 사용할 때, 효과가 제일 좋음

Part Two

Boosting

Boosting (1)

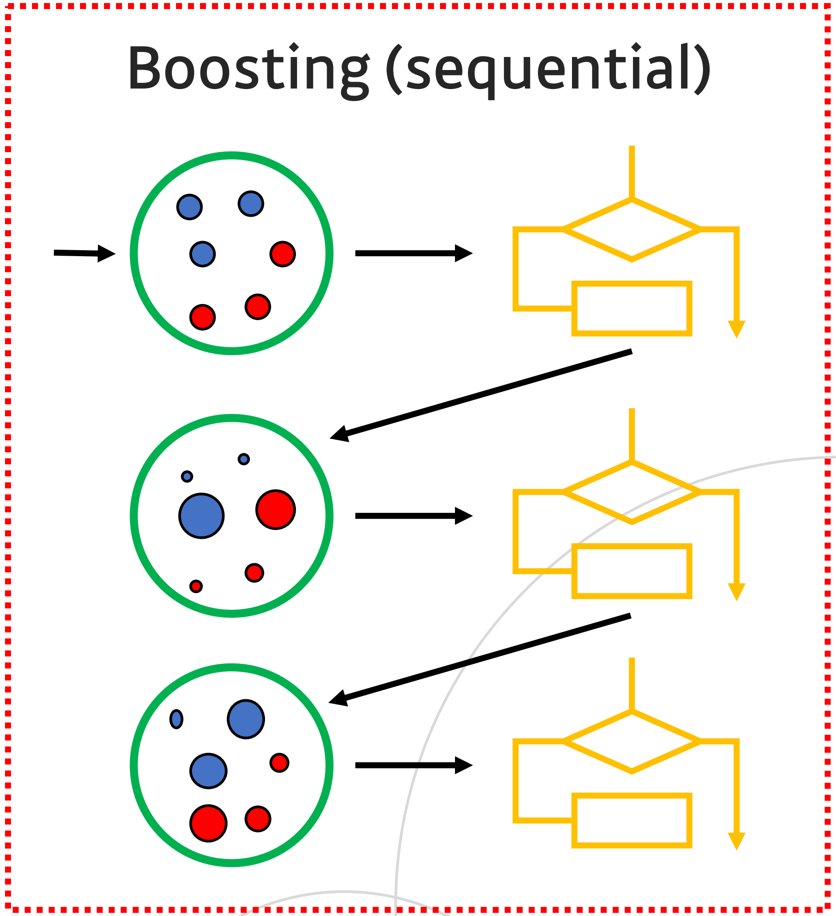
부스팅 (Boosting)

- 배깅과 마찬가지로, 다양한 알고리즘과 회귀와 분류 문제에 모두 적용 가능
- 결정 트리를 사용한 부스팅 알고리즘
  1. AdaBoost
  2. Gradient Boosting(GBM)
  3. XGBoost
  4. Light GBM

Boosting (2)

부스팅 (Boosting)

- 배깅은 **병렬적으로** 생성된 결정 트리를 앙상블하는 방법
- 부스팅은 이전 스텝의 트리 정보를 활용해 순차적으로(sequentially) 트리를 만듦



Hyperparameter for Boosting

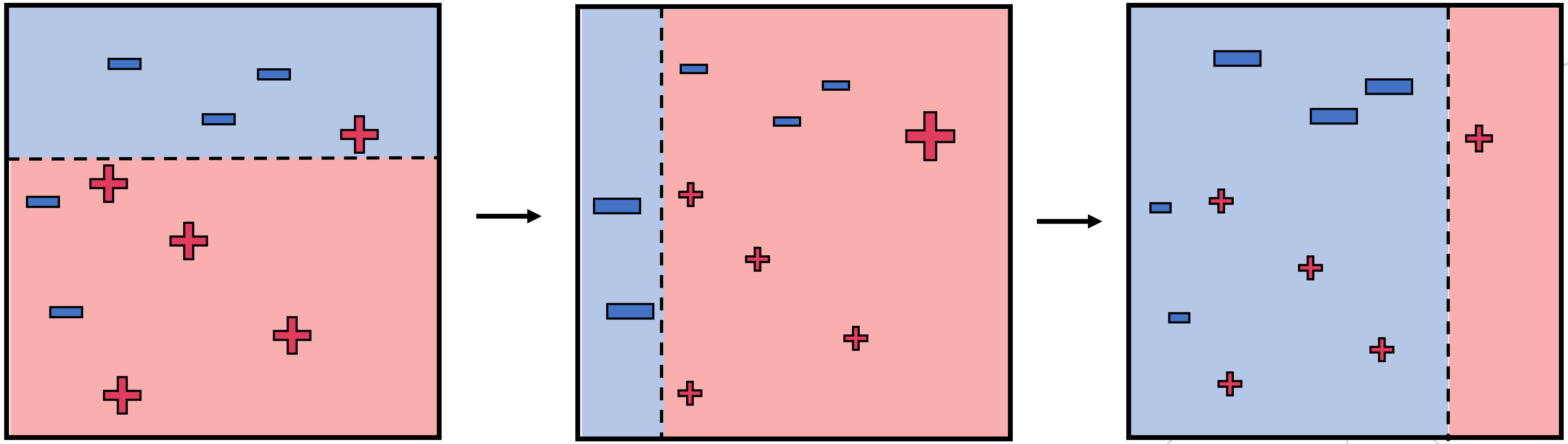
하이퍼파라미터

- Number of trees B:
  - 결정 트리를 순차적으로 생성할 때, 몇 개까지 생성할지 결정
  - B 값이 커질수록, **over-fitting** 문제가 발생함
- Number of split:
  - 각각의 결정 트리가 어느 정도의 depth를 가지는지 결정
  - **Split이 한 번인(= 2 terminal node)** 결정 트리를 특별히 **stump**로 부름

AdaBoost (1)

AdaBoost

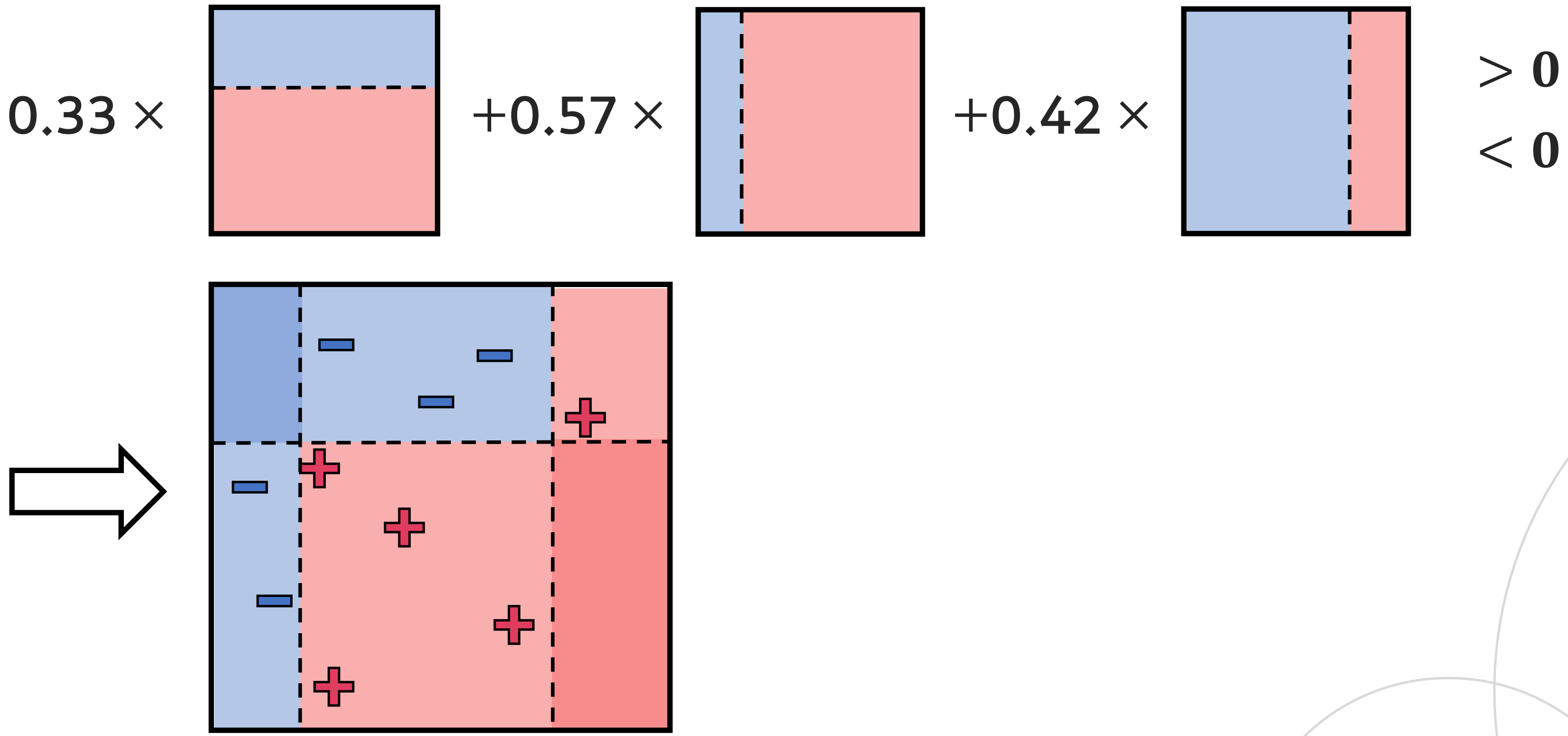
- **최초의 부스팅 알고리즘**
- 이전 결정 트리가 잘못 예측한 데이터에 큰 가중치(w_i)를 부여해, 다음 결정 트리가 더 집중할 수 있도록 순차적으로 학습
- 결정 트리로는 stump 구조 사용



AdaBoost (2)

AdaBoost

- B개의 결정 트리별로 계산된 **모델 가중치(c_b)를 합산해** 최종 모델 생성



AdaBoost (3)

AdaBoost

- b 번째 반복에서의 모델은 다음처럼 결정 트리의 **선형 결합**

$$\hat{f}_b(x_i) = c_1\hat{f}_1(x_i) + \cdots + c_b\hat{f}_b(x_i) = \hat{f}_{b-1}(x_i) + c_b\hat{f}_b(x_i)$$

- 손실 함수는 **지수 손실의 합**으로 정의 ($w_i^1 = 1, w_i^b = e^{-y_i\hat{f}_{b-1}(x_i)}$ 가정)

$$\mathrm{E} = \sum_{i=1}^{N} e^{-y_i\hat{f}_b(x_i)} = \sum_{i=1}^{N} w_i^b e^{-y_i c_b \hat{f}_b(x_i)}$$

$$= \sum_{y_i=\hat{f}_b(x_i)} w_i^b e^{-c_b} + \sum_{y_i\neq\hat{f}_b(x_i)} w_i^b e^{c_b} = \sum_{i=1}^{N} w_i^b e^{-c_b} + \sum_{y_i\neq\hat{f}_b(x_i)} w_i^b\left(e^{c_b}-e^{-c_b}\right)$$

AdaBoost (4)

AdaBoost

- $\mathrm{E} = \sum_{y_i=\hat{f}_b(x_i)} w_i^b e^{-c_b} + \sum_{y_i\neq\hat{f}_b(x_i)} w_i^b e^{c_b} = \sum_{i=1}^{N} w_i^b e^{-c_b} + \sum_{y_i\neq\hat{f}_b(x_i)} w_i^b (e^{c_b} - e^{-c_b})$
- E를 최소화하는 $\hat{f}_b$는 $\sum_{y_i\neq\hat{f}_b(x_i)} w_i^b$를 최소화하는 모델이므로, 잘못 예측한 데이터의 가중치를 고려한 결정 트리가 학습됨
- 모델 가중치 c_b 학습:

$$\frac{dE}{dc_b} = \sum_{y_i\neq\hat{f}_b(x_i)} w_i^b e^{c_b} - \sum_{y_i=\hat{f}_b(x_i)} w_i^b e^{-c_b} = 0$$

$$\Rightarrow c_b = \frac{1}{2}\log\frac{\sum_{y_i=\hat{f}_b(x_i)} w_i^b}{\sum_{y_i\neq\hat{f}_b(x_i)} w_i^b} = \frac{1}{2}\log\frac{1-\epsilon_b}{\epsilon_b}$$

AdaBoost (5)

AdaBoost

- 다음번 스텝의 데이터 가중치는 다음과 같이 결정됨
- $w_i^{b+1} = e^{-y_i \hat{f}_b(x_i)} = e^{-y_i(\hat{f}_{b-1}(x_i)+c_b \hat{f}_b(x_i))} = w_i^b \cdot \exp(-y_i c_b \hat{f}_b(x_i))$
- 이를 **B번** 반복하여 최종 모델을 생성함

AdaBoost (6)

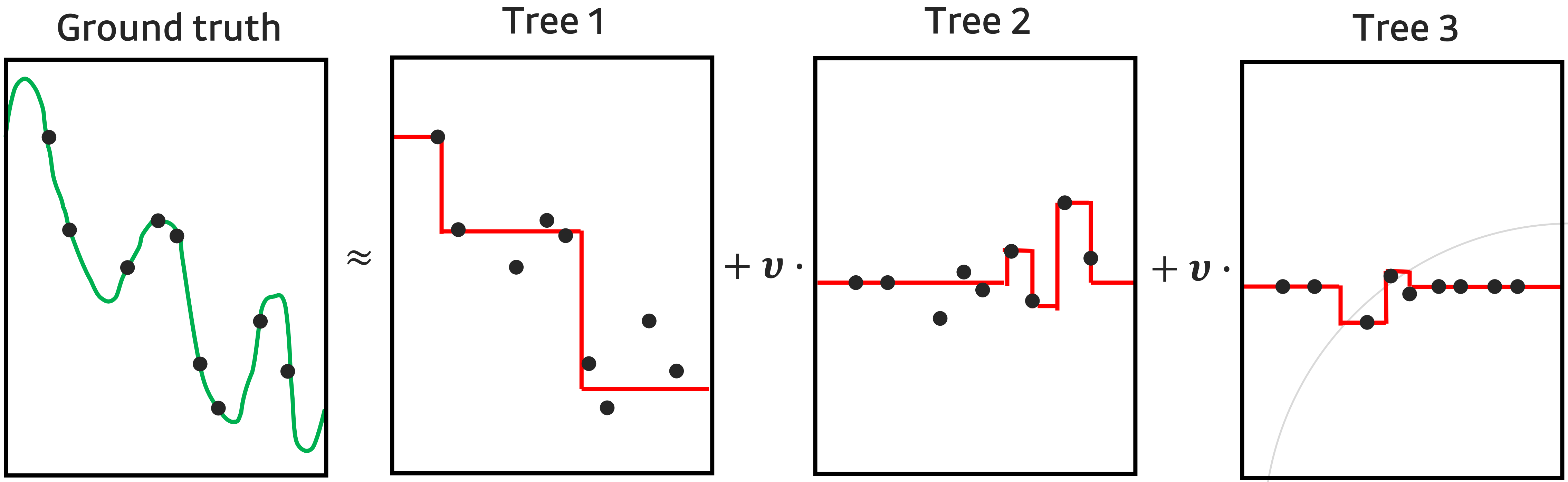
Pseudo code for AdaBoost

1. 초기 데이터 가중치: $\mathrm{w}_{\mathrm{i}}^{1} = 1$
2. 결정 트리의 오류율 계산: $\epsilon_b = (\sum_{y_i \neq \hat{f}_b(x_i)} w_i^b)/(\sum_{i=1}^{N} w_i^b)$
3. 결정 트리의 가중치 계산: $\mathbf{c_b} = \frac{1}{2}\log((1-\epsilon_b)/\epsilon_b)$
4. **데이터 가중치 업데이트:** $\boldsymbol{w_i^b = w_{\mathrm{i}}^{\mathrm{b}-1} \cdot \exp(-c_b\, y_i\, \hat{f}_b(x_i))}$
5. 2~4 과정을 B번 반복
6. 최종 모델 생성: $\hat{f}(x) = sign(\sum_{b=1}^{B} c_b \cdot \hat{f}_b(x))$

Gradient Boosting (1)

Gradient Boosting (GBM)

- 현재 모델의 오차(residual)를 줄여주는 방향으로 결정 트리를 학습하는 방법론



Gradient Boosting (2)

Gradient Boosting (GBM)

- 첫 번째 결정 트리는 **하나의 leaf node 구조** (= 전체 데이터의 평균으로 예측)
- 이 후에는 일반적으로 stump 보다는 **더 복잡한 트리 구조**를 사용
- 손실 함수로는 보통 **미분 가능한 MSE loss, L1 loss, 혹은 Logistic loss** 사용
- Residual은 실제값과 예측값의 차이($y_i - \hat{f}(x_i)$)로, negative gradient와 같은 의미

$$\frac{\partial L}{\partial \hat{f}(x_i)} = \frac{\partial \left(y_i - \hat{f}(x_i)\right)^2}{\partial \hat{f}(x_i)} = \hat{f}(x_i) - y_i$$

- 정의한 손실 함수에 대한 negative gradient로 residual 계산

Gradient Boosting (3)

Gradient Boosting (GBM)

- 이전 모델의 residual을 최소화하는 결정 트리 γ 학습 (j는 terminal node 인덱스)

$$\boldsymbol{\gamma_j^b} = \mathbf{arg}\,\mathbf{min}_{\boldsymbol{\gamma}} \sum_{\boldsymbol{x_i \in R_j^b}} \boldsymbol{L(y_i, \hat{f}_{b-1}(x_i) + \gamma)}$$

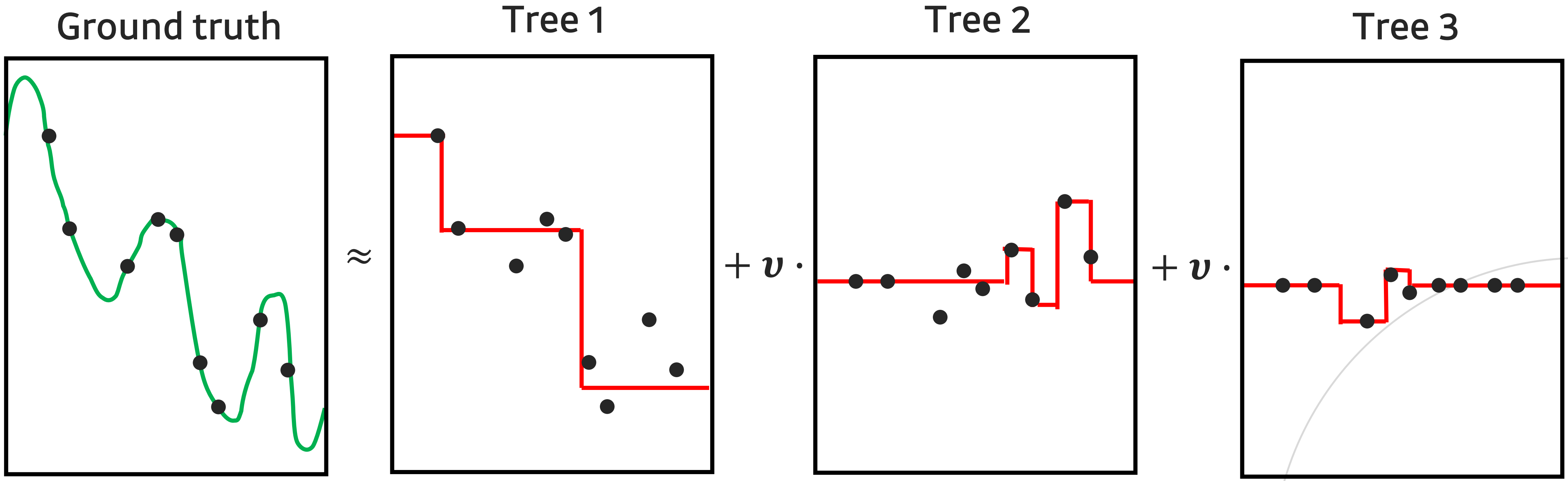
- 학습한 결정 트리를 **그대로 합치면** over-fitting 문제가 발생할 수 있음
- 따라서, 학습률 하이퍼파라미터 ν를 도입함

$$\hat{f}_b(x_i) = \hat{f}_{b-1}(x_i) + \nu \sum_{j=1}^{J_b} \gamma_j^b \, \mathbb{I}(x \in R_j^b)$$

- 경사 하강법 알고리즘과 동일

Gradient Boosting (4)

(Remind) Gradient Boosting (GBM)



$$\approx \text{Tree 1} + v \cdot \text{Tree 2} + v \cdot \text{Tree 3}$$

XGBoost

XGBoost

- GBM 알고리즘의 성능과 속도 면에서 향상된 알고리즘
- 기존의 GBM은 학습 데이터에 대한 residual을 계속 줄여 over-fitting되기 쉬움
- 정규화 항을 손실 함수에 추가함
  - $\boldsymbol{\Omega(f)} = \boldsymbol{\gamma T} + \frac{1}{2}\boldsymbol{\lambda}\|\boldsymbol{c}\|^2$ (T: terminal node의 수, c: 각 노드의 가중치)
- Split finding **알고리즘**을 통해 연산의 효율성을 높임
  - 기존에는 모든 피처를 split 기준으로 탐색했었음
  - 이에 대한 근사 알고리즘을 제안해 속도를 향상시킴

Light GBM

Light GBM

- 기존의 boosting 알고리즘은 B번의 반복 학습 때마다 **전체 데이터셋을 살펴봄**
- 이 과정에서 대부분의 계산 비용이 발생함
- 결정 트리 학습에 사용되는 데이터 수를 다음의 방법들로 줄임

1. GOSS (Gradient-based One-Side Sampling):
   작은 gradient 값을 가진 샘플들을 제외하는 방법론
2. EFB (Exclusive Feature Bundling):
   상호 배타적(mutually exclusive) 피처를 묶어, 탐색해야되는 피처 수를 감소시킴

Thank you

Ensemble Learning