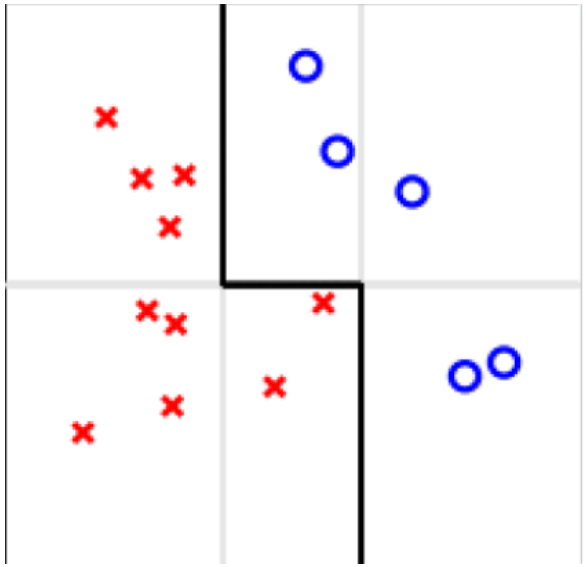
集成学习

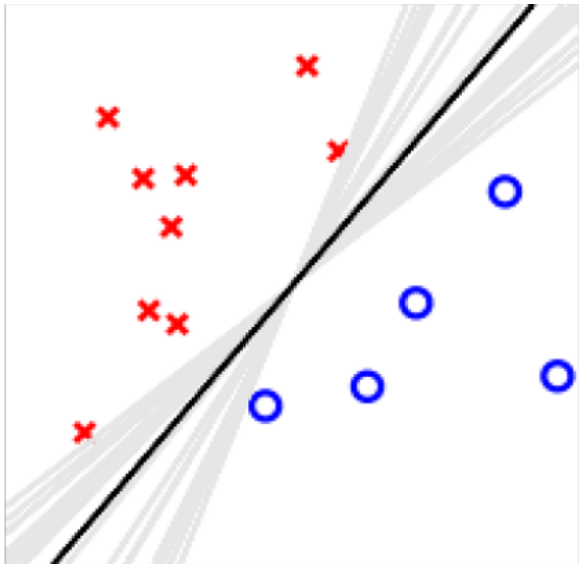
Ensemble Learning

集成学习基础

- 集成学习：构建并结合多个个体学习器来完成学习任务。
  - 基学习器：集成的学习器都是同种类型的。
  - 组件学习器：集成的学习器包含不同的类型。
- 强可学习：在概率近似正确（Probably approximately correct, PAC）学习的框架汇总，一个概念，如果存在一个多项式的学习算法能够学习它，并且正确率很高，那么就称这个概念是强可学习的
- 弱可学习：一个概念，如果存在一个多项式的学习算法能够学习它，学习的正确率仅比随机猜测略好，那么这个概念是弱可学习的
- 定理:在PAC学习的框架下，一个概念是强可学习的充分必要条件是这个概念是弱可学习的。
- 集成学习通常研究弱学习器！

- 集成学习的好处：
  - 从统计的角度：学习任务的假设空间很大，可能有多个假设在训练集上达到同等性能，单个学习器可能因误选导致泛化性能不佳。
  - 从计算的角度：学习算法往往会陷入局部极小，多次运行之后进行结合，可降低陷入糟糕局部极小点的风险。
  - 从表示的角度：某些学习任务的真实假设可能不在当前学习算法的假设空间中，通过结合多个学习器，有可能学得更好的近似。





假设集成包含T个学习器$h_1, h_2, \ldots, h_T$, 集成结果是H. $h_t(\mathbf{x})_c$是学习器$h_t(\mathbf{x})$在类别c上的输出.

学习器的结合策略:

- 均匀组合: $H(x) = \frac{1}{T}\sum_{t=1}^{T} h_t(\mathbf{x})$
- 加权平均: $H(\mathbf{x}) = \sum_{t=1}^{T} \alpha_t h_t(\mathbf{x})$, 其中$\forall t, \alpha_t \geq 0$以及$\sum_{t=1}^{T} \alpha_t = 1$
- 绝对多数投票:

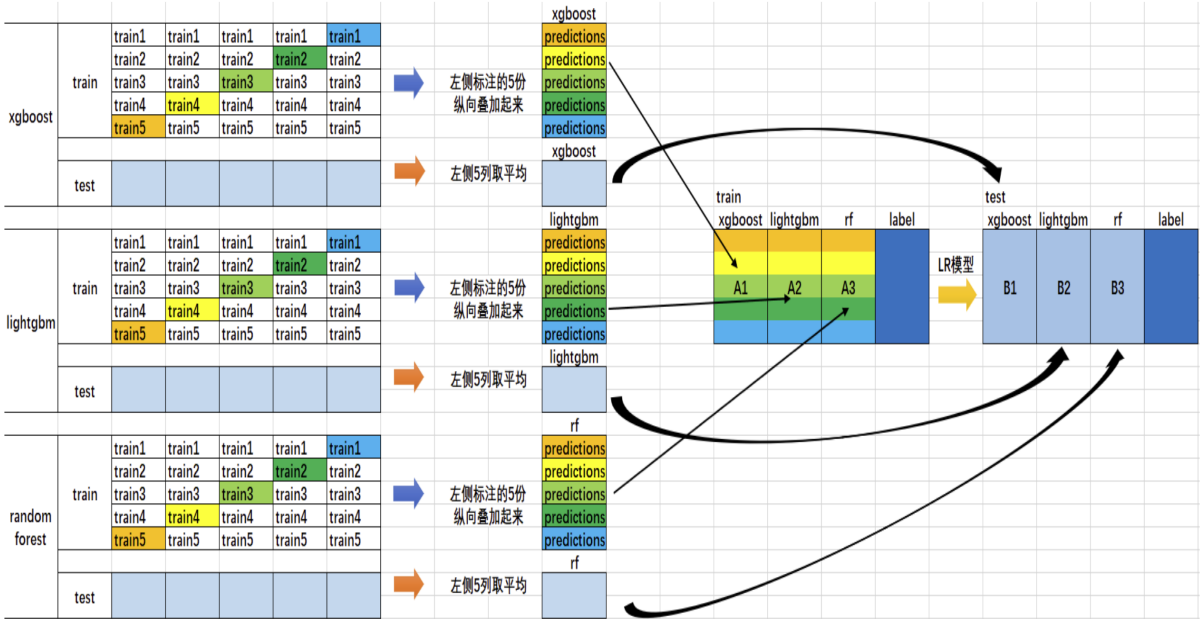
$$H(\mathbf{x}) = \begin{cases} c & \text{若} \sum_{t=1}^{T} h_t(\mathbf{x})_c > \frac{1}{2}\sum_{c=1}^{C}\sum_{t=1}^{T} h_t(\mathbf{x})_c \\ \text{拒绝预测} & \text{否则} \end{cases}$$

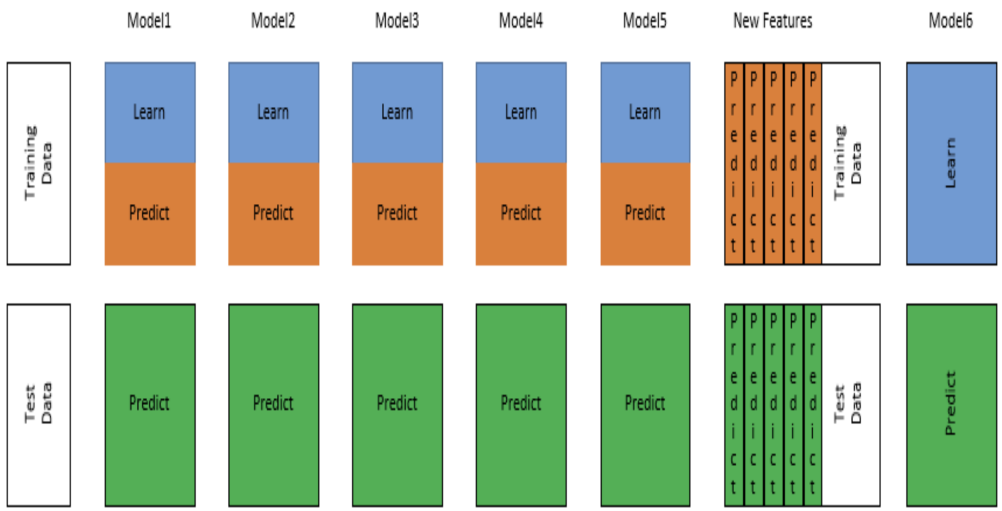
- 相对多数投票: $H(\mathbf{x}) = \arg\max_c \sum_{t=1}^{T} h_t(\mathbf{x})_c$
- 加权投票: $H(\mathbf{x}) = \arg\max_c \sum_{t=1}^{T} \alpha_t h_t(\mathbf{x})_c$, 其中$\forall t, \alpha_t \geq 0$以及$\sum_{t=1}^{T} \alpha_t = 1$.

Stacking: 通过另一个学习器，称为次级学习器或元学习器（meta-learner），对个体学习器（称为初级学习器）的结果进行结合。

- 利用训练集$D = \{(\mathbf{x}_i, y_i)\}_{i=1}^m$分别训练初级学习器$h_1, h_2, \ldots, h_T$.
- 构造次级训练集$\tilde{D} = \{(\tilde{\mathbf{x}}_i, y_i)\}_{i=1}^m$, 其中$\tilde{x}_i = (h(\mathbf{x}_i)_1, h(\mathbf{x}_i)_2, \ldots, h(\mathbf{x}_i)_T) \in \mathbb{R}^T$
- 利用次级训练集$\tilde{D}$训练次级学习器H

Note: 1. 一般使用交叉验证或者留一法，在每一折，用训练初级学习器未使用的样本来产生次级学习器的训练样本。
2.初级学习器的输出类概率作为次级学习器的输入属性。
3.用多响应回归（Multi-response linear regression，MLR）作为次级学习算法。


xgboost
train
test
train1 train2 train3 train4 train5
左侧标注的5份
纵向叠加起来
左侧5列取平均
xgboost
predictions
lightgbm
rf
train
xgboost lightgbm rf label
A1 A2 A3
LR模型
test
xgboost lightgbm rf label
B1 B2 B3
lightgbm
random
forest


Model1
Model2
Model3
Model4
Model5
New Features
Model6
Training Data
Learn
Predict
Predict
Test Data
Predict
Predict

多样性

- 定理 假设基分类器的错误率都为e且相互独立, 对二分类问题, 简单平均集成的错误率随个体分类器数目T指数下降，即：

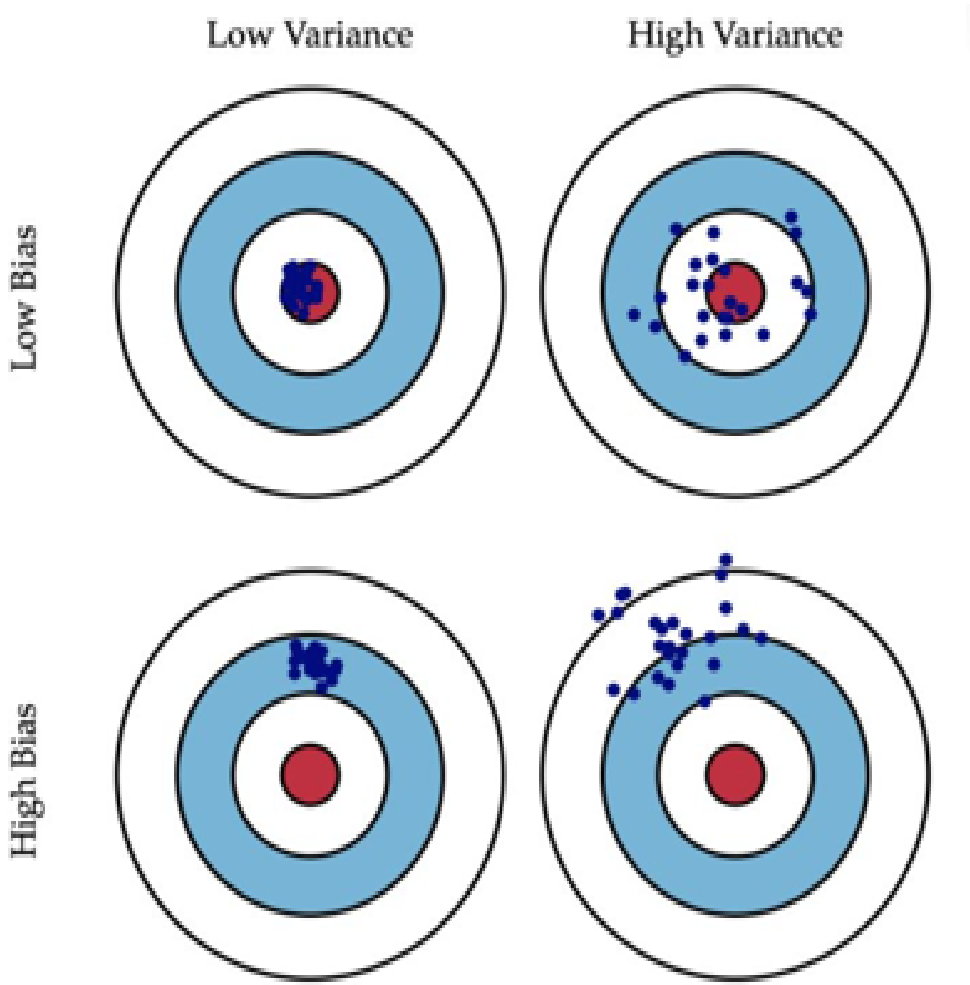
$$E[\mathbb{I}(H(\mathbf{x}) \neq y)] \leq \exp(-\frac{1}{2}T(1-2e^2))$$

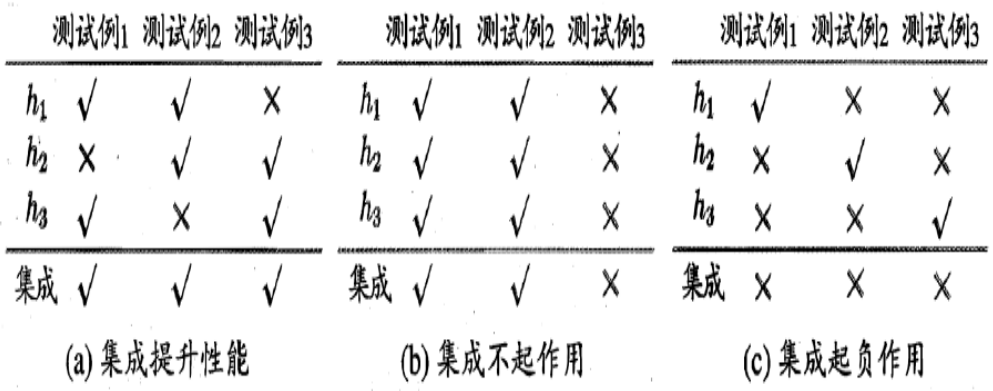
该定理假设基学习器误差相互独立, 但在现实任务中, 基学习器是为解决同一个问题训练出来的, 它们显然不独立. 通过在学习过程引入随机性, 可以获得依赖程度没有那么高的学习器.

- 偏差-方差分解(Bias-Variance Decomposition): 假设使用加权平均法完成回归任务，则：

$$(H(\mathbf{x})-y)^2 = \sum_{t=1}^{T}\alpha_t(h_t(\mathbf{x})-y)^2 - \sum_{t=1}^{T}\alpha_t(h_t(\mathbf{x})-H(\mathbf{x}))^2$$

可以看出个体学习器准确性越高、多样性越大, 则集成越好.


Low Variance
High Variance
Low Bias
High Bias



	测试例1	测试例2	测试例3
h_1	√	√	×
h_2	×	√	√
h_3	√	×	√
集成	√	√	√

(a) 集成提升性能

	测试例1	测试例2	测试例3
h_1	√	√	×
h_2	√	√	×
h_3	√	√	×
集成	√	√	×

(b) 集成不起作用

	测试例1	测试例2	测试例3
h_1	√	×	×
h_2	×	√	×
h_3	×	×	√
集成	×	×	×

(c) 集成起负作用

多样性增强方法

- 数据样本扰动：从给定数据集D中采样产生不同的数据子集~D, 再利用不同的数据子集训练不同的个体学习器. 例如Bagging使用自助采样, AdaBoost 使用序列采样.
- 输入属性扰动：从初始的高维属性空间投影产生低维属性空间, 不同的子空间提供了观察数据的不同视角, 再利用不同的子空间训练不同的个体学习器.
- 算法参数扰动：例如改变神经网络的隐层神经元数、初始连接权值等.
- 输出表示扰动：翻转法(flipping output)随机改变一些训练样本的标记.

Bagging: 从训练集D采样相互有交叠的采样子集, 并用不同的子集训练不同的个体学习器.

- 自助法采样(bootstrapsampling): 从D中有放回地采样m次得到数据集$\tilde{D}$
- 引理： D中的某个样本在自助法采样中不被采到的概率约是36.8%. 也就是说, 在D中大约有36.8%的样本未出现在采样数据集$\tilde{D}$中.
- 包外验证(out-of-bag estimation): 给定数据集D, 我们可以把自助法采样得到的数据集$\tilde{D}$作为训练集, 用$D - \tilde{D}$作为验证集.

Bagging 的具体过程包括如下三步.

1. 从训练集D中由自助法采样得到T个采样集$\tilde{D}_1, \tilde{D}_2, \ldots, \tilde{D}_T$.
2. 基于自助采样集$\tilde{D}_t$训练基学习器h_t.
3. 使用相对多数投票(分类任务) 或简单平均(回归任务)得到H.

在利用Bagging 进行包外估计时, 我们考虑那些未使用$\mathbf{x}$训练的基学习器在$\mathbf{x}$上的预测:

$$H_{oob}(\mathbf{x}) := \arg\max_{c} \sum_{t=1}^{T} \mathbb{I}(\mathbf{x} \notin \tilde{D}_t)\mathbb{I}(h_t(\mathbf{x} = c))$$

那么Bagging的包外误差估计为

$$E_{oob} := \frac{1}{m} \sum_{i=1}^{m} I(H_{oob}(\mathbf{x}_i) \neq y_i)$$

Boosting: 先从初始训练集D训练出一个基学习器, 再根据基学习器的表现对训练样本分布进行调整. 使得先前做错的训练样本在后续受到更多关注, 然后基于调整后的样本分布来训练下一个基学习器,如此重复进行.

AdaBoost(adaptive boosting): 通过给样本加权实现来对训练样本的分布进行调整.

考虑数据集$D = (x_1, y_1), (x_2, y_2), (x_3, y_3), (x_4, y_4)$

经过bootstrap可得$D_t = (x_1, y_1), (x_1, y_1), (x_2, y_2), (x_4, y_4)$

损失函数为： $E(h) = \frac{1}{4} \sum_{n=1}^{4} u_n^t \cdot [\![y_n \neq h(x_n)]\!]$

u_n^t表示数据出现的次数， $u_1^t = 2$， $u_2^t = u_4^t = 1$， $u_3^t = 0$.

$$g_t = \arg\min_h \sum_{n=1}^{N} u_n^t \cdot [\![y_n \neq h(x_n)]\!]$$

$$g_{t+1} = \arg\min_h \sum_{n=1}^{N} u_n^{t+1} \cdot [\![y_n \neq h(x_n)]\!]$$

g_t是由u_n^t得到的， g_{t+1}是由u_n^{t+1}得到的，一般来讲我们希望所有的g_t之间具有较大的差异性。

Idea：在g_t的预测下， u_n^{t+1}中错误率为0.5时， g_t和g_{t+1}有较大的差异性。即：

$$\frac{\sum_{n=1}^{N} u_n^{t+1} \cdot [\![y_n \neq g_t(x_n)]\!]}{\sum_{n=1}^{N} u_{n+1}^t} = 1/2$$

令$A_{t+1} = \sum_{n=1}^{N} u_n^{t+1} \cdot [\![y_n \neq g_t(x_n)]\!]$

$B_{t+1} = \sum_{n=1}^{N} u_n^{t+1} \cdot [\![y_n = g_t(x_n)]\!]$

希望：$A_{t+1} = B_{t+1}$

方法：令

$$\epsilon_t = \frac{\sum_{n=1}^{N} u_n^t \cdot [\![y_n \neq g_t(x_n)]\!]}{\sum_{n=1}^{N} u_n^t}$$

$$\lambda_t = \sqrt{\frac{1-\epsilon_t}{\epsilon_t}}$$

则对于在g_t下分类正确的x_n, $u_n^{t+1} = \frac{u_n^t}{\lambda_t}$

对于在g_t下分类不正确的x_n, $u_n^{t+1} = u_n^t \cdot \lambda_t$

$\lambda_t \geq 1$ 当且仅当$\epsilon_t \leq \frac{1}{2}$

Boosting（提升法）

$u^1 = [1/N, 1/N, \cdots, 1/N]$
For $t = 1, 2, \cdots, T$
(1)获得 $g_t = \mathcal{A}(D, u^t)$
(2)根据下面方法更新u_t到u_{t+1}，
If $[\![y_n \neq g_t(x_n)]\!]$, 则 $u_{t+1} = u_t \cdot \lambda_t$，
If $[\![y_n = g_t(x_n)]\!]$, 则 $u_{t+1} = \frac{u_t}{\lambda_t}$，
(3)计算$a_t = \ln \lambda_t$
Return $G(x) = sign(\sum_{t=1}^{T} a_t g_t(x))$

AdaBoost的统计视角

在g_t下分类正确的x_n, $u_n^{t+1} = \frac{u_n^t}{\lambda_t}$

在g_t下分类不正确的x_n, $u_n^{t+1} = u_n^t \cdot \lambda_t$. Where, $\lambda_t = \sqrt{\frac{1-\epsilon_t}{\epsilon_t}}$

Recall $\alpha_t = \ln \lambda_t$, 则

$$u_n^{t+1} = u_n^t \cdot \lambda_t^{-y_n g_t(\mathbf{x}_n)} = u_n^t \cdot \exp(-y_n \alpha_t g_t(\mathbf{x}_n))$$

因此,

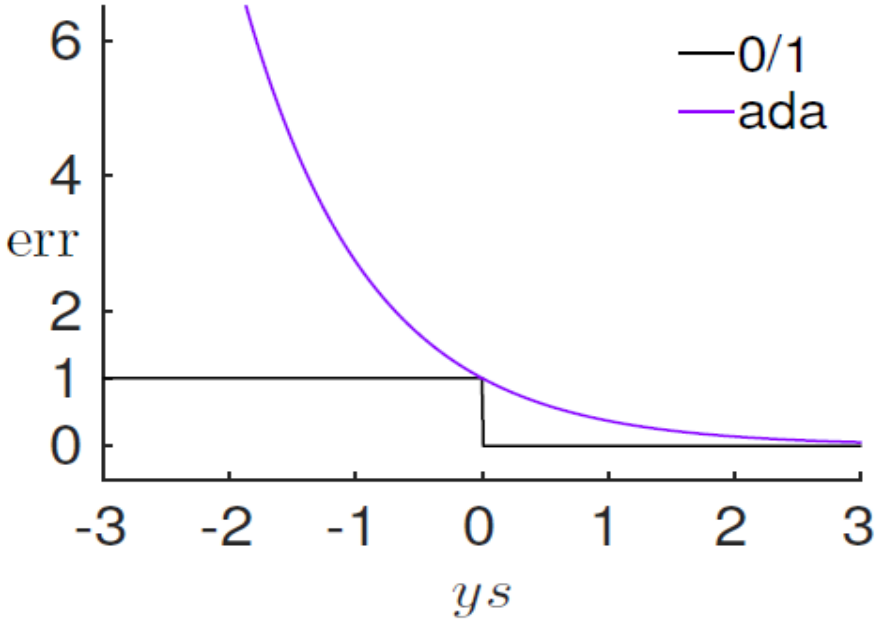
$$u_n^{T+1} = u_n^1 \cdot \prod_{i=1}^{T} \exp(-y_n \alpha_i g_i(\mathbf{x}_n)) = \frac{1}{N} \exp(-y_n \sum_{i=1}^{T} \alpha_i g_i(\mathbf{x}_n))$$

- Voting Score: $s = \sum_{i=1}^{T} \alpha_i g_i(x_n)$
- $u_n^T \propto \exp(-y_n s)$

- 推论：$u_n^{T+1} = \frac{1}{N}\exp(-y_n H(\mathbf{x}_n))$
- Adaboost的损失函数为：

$$\sum_{n=1}^{N} u_n^{T+1} = \frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N}\exp(-y_n H(\mathbf{x}_n))$$

- 指数损失函数：$\exp(-ys)$



$$\min_{\alpha}\min_{H}\sum_{n=1}^{N}u_n^{T+1}=\min_{\alpha}\min_{H}\frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N}\exp(-y_n\sum_{i=1}^{T}\alpha_i h_i(\mathbf{x}_n))$$

AdaBoosting的思路： 采用前向分布算法（Forward Stagewise algorithm）求解。每次只学习一个基学习器h_t及其权重α_t,逐步最小化损失函数。

使用下标T显式表示集成是由T个基学习器得到：

$$H_T(\mathbf{x})=\sum_{t=1}^{T}\alpha_t h_t(\mathbf{x})$$

用前向分步算法每步只需优化如下目标：

$$\min_{\alpha_t}\min_{h_t}\frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N}\exp(-y_n(\sum_{i=1}^{t-1}H_{t-1}(\mathbf{x}_n)+\alpha_t h_t(\mathbf{x_n})))$$

回想梯度下降法：$\min_{\|v\|=1} J(w_t+\eta v) \approx J(w_t)+\eta v^T \nabla J(w_t)$

$$
\begin{aligned}
\min_{h_t} E^t_{ADA}(h_t(\mathbf{x}),\alpha_t) &= \min_{h_t} \tfrac{1}{N}\textstyle\sum_{n=1}^{N} \exp(-y_n(H_{t-1}(\mathbf{x}_n)+\alpha_t h_t(\mathbf{x}_n))) \\
&= \min_{h_t} \textstyle\sum_{n=1}^{N} u_n^t \exp(-y_n \alpha_t h_t(\mathbf{x}_n)) \\
&\approx \min_{h_t} \textstyle\sum_{n=1}^{N} u_n^t (1-y_n \alpha_t h_t(\mathbf{x}_n)) \\
&= \min_{h_t} \textstyle\sum_{n=1}^{N} u_n^t - \alpha_t \sum_{n=1}^{N} u_n^t y_n h_t(\mathbf{x}_n) \\
&= \min_{h_t} \textstyle\sum_{n=1}^{N} u_n^t (-y_n h_t(\mathbf{x}_n)) \\
&= \min_{h_t} (-\textstyle\sum_{n=1}^{N} u_n^t + 2\sum_{n=1}^{N} u_n^t [\![y_n \neq h_t(\mathbf{x}_n)]\!]) \\
&= \min_{h_t} \textstyle\sum_{n=1}^{N} u_n^t [\![y_n \neq h_t(\mathbf{x}_n)]\!]
\end{aligned}
$$

得到：$g_t(\mathbf{x}) = \arg\min_{h_t} \sum_{n=1}^{N} u_n^t [\![y_n \neq h_t(\mathbf{x}_n)]\!]$

$$\min_{\alpha_t} E^t_{ADA}(g_t(\mathbf{x}), \alpha_t) \quad = \min_{\alpha_t} \sum_{n=1}^{N} u_n^t \exp(-y_n \alpha_t g_t(\mathbf{x}_n))$$

分类正确：$y_n = g_t(\mathbf{x}_n)$, 有$u_n^t \exp(-\alpha_t)$

分类错误：$y_n \neq g_t(\mathbf{x}_n)$, 有$u_n^t \exp(+\alpha_t)$

因此，

$$\min_{\alpha_t} E^t_{ADA} \quad = \min_{\alpha_t} (\sum_{n=1}^{N} u_n^t)((1-\epsilon_t)\exp(-\alpha_t) + \epsilon_t \exp(+\alpha_t))$$

$$\frac{\partial E_{ADA}}{\partial \alpha_t} = (\sum_{n=1}^{N} u_n^t)(-(1-\epsilon_t)\exp(-\alpha_t) + \epsilon_t \exp(+\alpha_t) = 0$$

得到：$\alpha_t = \ln \sqrt{\frac{1-\epsilon_t}{\epsilon_t}}$.

Gradient Boosting

- Adaboost:

$$\min_{\alpha} \min_{H} \frac{1}{N} \sum_{n=1}^{N} \exp(-y_n \sum_{i=1}^{T} \alpha_i h_i(\mathbf{x}_n))$$

$$\min_{\alpha_t} \min_{h_t} \frac{1}{N} \sum_{n=1}^{N} \exp(-y_n (\sum_{i=1}^{t-1} \alpha_i g_i(\mathbf{x}_n) + \alpha_t h_t(\mathbf{x}_n)))$$

- Gradientboost:

$$\min_{\eta} \min_{H} \frac{1}{N} \sum_{n=1}^{N} Loss(\sum_{i=1}^{T} \alpha_i h_i(\mathbf{x}_n), y_n)$$

$$\min_{\eta_t} \min_{h_t} \frac{1}{N} \sum_{n=1}^{N} Loss(\sum_{i=1}^{t-1} \alpha_i g_i(\mathbf{x}_n) + \eta_t h_t(\mathbf{x}_n), y_n) \qquad (*)$$

- 定理： 对(*)式内层的优化问题，h_t的最优值是对任意的$i = 1, 2, \ldots, N$,

$$h_t(\mathbf{x_i}) \approx -\frac{\partial Loss}{\partial H(\mathbf{x})}|_{H(\mathbf{x})=H_{t-1}(\mathbf{x}_i)}$$

- Proof.

$$\begin{aligned} h_t &= \arg\min_{h_t} \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} Loss(H_{t-1}(\mathbf{x}_i) + \alpha_t h_t(\mathbf{x}_i), y_i) \\ &= \arg\min_{h_t} \sum_{i=1}^{N} (Loss(H_{t-1}, y_i) + \alpha_t h_t \frac{\partial Loss}{\partial H(\mathbf{x})}|_{H(\mathbf{x})=H_{t-1}(\mathbf{x}_i)}) \\ &= \arg\min_{h_t} \sum_{i=1}^{N} \alpha_t h_t \frac{\partial Loss}{\partial H(\mathbf{x})}|_{H(\mathbf{x})=H_{t-1}(\mathbf{x}_i)} \end{aligned}$$

因此，h_t的最优值是使$h_t(x_i)$近似$-\frac{\partial Loss}{\partial H(\mathbf{x})}|_{H(\mathbf{x})=H_{t-1}(\mathbf{x}_i)}$

- GradientBoosting学习算法
  1. $H_0 \leftarrow \arg\min_c \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} Loss(c, y_i)$
  2. for $t \leftarrow 1$ to T do
  3. for $i \leftarrow 1$ to N do
  4. $r_i \leftarrow -\frac{\partial Loss}{\partial H(\mathbf{x})}\Big|_{H(\mathbf{x})=H_{t-1}(\mathbf{x}_i)}$
  5. 基于训练数据$D_t := \{(\mathbf{x}_i, r_i)\}_{i=1}^{N}$训练学习器$h_t$
  6. $\alpha_t \leftarrow \arg\min_{\alpha_t} \frac{1}{N} Loss(H_{t-1}(\mathbf{x}_i) + \alpha_t h_t(\mathbf{x}_i), y_i)$
  7. $H_t(\mathbf{x}) \leftarrow H_t(\mathbf{x}) + \alpha_t h_t(\mathbf{x})$
  8. return $H_T(\mathbf{x})$
- 当使用牛顿法进行求解时，称为XGBoost

	梯度下降	GradientBoosting
更新形式	$\boldsymbol{\theta}_t := \boldsymbol{\theta}_{t-1} + \eta_t \Delta\boldsymbol{\theta}_t$	$H_t(\boldsymbol{x}) := H_{t-1}(\boldsymbol{x}) + \alpha_t h_t(\boldsymbol{x})$
内层变量最优值	$\Delta\boldsymbol{\theta}_t := -\frac{\partial \ell}{\partial \boldsymbol{\theta}}\Big\|_{\boldsymbol{\theta}=\boldsymbol{\theta}_{t-1}}$	$h_t(\boldsymbol{x}_i) \approx -\frac{\partial \ell}{\partial H(\boldsymbol{x})}\Big\|_{H(\boldsymbol{x})=H_{t-1}(\boldsymbol{x}_i)}$
外层变量最优值	$\eta_t := \arg\min_{\eta_t} \ell(\boldsymbol{\theta}_{t-1} + \eta_t \Delta\boldsymbol{\theta}_t)$ 或设为很小的常数	$\alpha_t := \arg\min_{\alpha_t} \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m} \ell(H_{t-1}(\boldsymbol{x}_i) + \alpha_t h_t(\boldsymbol{x}_i), y_i)$
累积形式	$\boldsymbol{\theta}_T = \sum_{t=1}^{T} \eta_t \Delta\boldsymbol{\theta}_t$	$H_T(\boldsymbol{x}) = \sum_{t=1}^{T} \alpha_t h_t(\boldsymbol{x})$