# Machine Learning Applications Ensemble Methoden



"There ain't no such thing as a free lunch."

Robert A. Heinlein in "The Moon Is a Harsh Mistress", 1966.

Ensemble Methoden treffen Vorhersage, in dem sie die Vorhersagen vieler individueller Lernen zu einer einzigen Vorhersage

Basierend auf Folien von Aaron Bobick, Beate Sick, Katharina Morik, Uwe Ligges, Johannes Fürnkranz, Emily Fox und Mapt. Danke fürs Offenlegen der Folien.

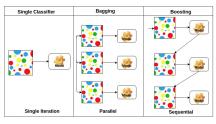


#### Unsere Ziele für heute



# Heute wollen wir Ensemble-Methoden kennenlernen: Gemeinsam können "schwache" Lerner mächtiger sein!

- ▶ Was sind Zufallswälder (Random Forrests)?
- Was ist Bagging?
- Was ist Boosting?





#### **Zufallswälder (Random Forrests)**

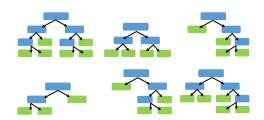


- ► Zufallswälder klassifizieren auf der Basis von vielen Klassifkationsbäumen.
- Das Lernen der erforderlichen Klassifkationsbäume ist dabei zufällig.
- Deshalb spricht man von Zufallswäldern.



#### Wie lernen wir Zufallswälder?





#### Zufallswald (Random Forrest)

Ein Zufallswald besteht aus mehreren unkorrelierten Entscheidungsbäumen. Alle Entscheidungsbäume sind unter einer bestimmten Art von Randomisierung während des Lernprozesses gewachsen.



# Wie treffen Zufallswälder (Random Forrests) Vorhersagen?



#### Vorhersage Zufallswald

Für eine Klassifikation<sup>1</sup> darf jeder Baum in dem Wald eine Entscheidung treffen, und die Klasse mit den meisten Stimmen entscheidet die endgültige Klassifikation.





<sup>&</sup>lt;sup>1</sup>Random Forests können auch zur Regression eingesetzt werden.

#### Wie lernen wir Zufallswälder? Wie viele Bäume?



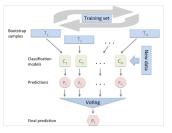
- Zuerst muss festgelegt werden, wie viele Bäume den Wald bilden sollen. Dabei wird die Klassifikationsgüte eines Waldes meistens umso besser, je mehr einzelne Bäume berechnet werden.
- Eine große Anzahl Bäume führt nicht zu Overfitting und ist deshalb zu bevorzugen.
- Grundsätzlich hängt die Anzahl der Bäume aber von verschiedenen Parametern ab, z.B. der Anzahl Merkmalen und der Anzahl Klassen.



# Wie lernen wir Zufallswälder? Welche Daten pro Baum?



- ▶ Die Bäume werden nicht aus allen zur Verfügung stehenden Daten bestimmt, sondern es wird für jeden Baum eine Stichprobe (mit Zurücklegen) aus den Beobachtungen gezogen, daher auch Zufallswald.
- Da hier mit vielen unterschiedlichen Stichproben gearbeitet wird, spricht man auch von bagging (Bootstrap aggregation).



Sample indices	Bagging round 1	Bagging round 2	
1	2	7	
2	2	3	
3	1	2	
4	3	1	
5	7	1	
6	2	7	
7	4	7	
	$c_i$	, , , , , , , , , , , , , , , , , , ,	$c_m$



# Wie lernen wir Zufallswälder? Welche Variablen? Pruning?



- Außerdem werden für die Bestimmung der Verzweigungsregeln nicht alle Variablen verwendet, sondern es wird zufällig eine (vorher festgelegte) Anzahl aus allen Variablen gezogen. Nur diese werden nach der besten Partition durchsucht
- Jeder Baum sollte dabei so groß wie möglich sein (kein Pruning). Er soll auf der entsprechenden Stichprobe mit den gezogenen Variablen den kleinstmöglichen Wiedereinsetzungsfehler haben.

#### Wie lernen wir Zufallswälder? Demokratie im Wald!



Ein neues Objekt wird von dem Zufallswald klassifiziert, indem es von jedem der berechneten Bäume einmal klassifiziert wird und dann der Klasse zugeordnet wird, die die meisten Bäume bevorzugt haben.

#### Vorteil und Nachteil gegenüber eines einzelnen Klassifikationsbaum:



- Jede Variable, die einen Beitrag zur Klassentrennung liefert, wird irgendwann auch bei der Klassifikation verwendet.
- Verständlichkeit geht verloren, denn die Klassifikationsregel ist nicht mehr einfach ablesbar.



# OK, Verständlichkeit geht verloren, aber können wir trotzdem etwas von Zufallsbäumen lernen?



- ➤ Zufallswälder eignen sich besonders dann zur Klassifikation, wenn es mehrere Variablen gibt, die nur einen kleinen Beitrag zur Klassentrennung liefern.
- Der Beitrag zur Klassentrennung kann durch die Wichtigkeit einer Variablen bestimmt werden.
- ► Eine mögliche Berechnung dieser Wichtigkeit ergibt sich aus dem Gütemaß.

#### Wichtigkeit einer Variablen: I := VG/NV

VG = Summe der Verminderungen des Gütemaßes (z.B. Gini-Index) im gesamten Wald durch eine Variable

NV = Anzahl der Verzweigungen dieser Variable im Wald



#### Random Forest in R — randomForest



Funktion randomForest() in Paket randomForest, hier am Beispiel des Datensaetzes Pima Indianer

- > library ("randomForest")
- > set.seed(20060911)
- > pid\_rf <- randomForest(diabetes ~., data = pid\_learn ,</pre>
- + mtry = 3, ntree = 100, importance = TRUE,
- + keep.forest = TRUE)



#### Random Forest in R — randomForest



```
> pred_rf <- predict(pid_rf, newdata = pid_test)
> mc(pred_rf)

$table
pred
true neg pos
neg 134 24
pos 38 56

$rate
[1] 0.2460317
```

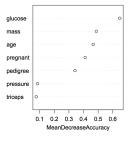


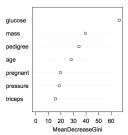
#### Random Forest in R — randomForest



#### > varImpPlot(pid\_rf)

pid\_rf







Aus 16 Charakteristika einer Stromreihe und 5 Charakteristika einer Sensorreihe soll bestimmt werden, ob ein so genannter Lichtbogen vorliegt oder nicht. Dabei werden 2 Arten von Lichtbögen unterschieden (Serial Arc und Wet Arc). Es werden also 3 Klassen unterschieden. Lichtbögen können zu Kabelbränden führen, die gefährlich sind. Es liegen 1235 Beobachtungen vor.





Zunächst müssen die Parameter des Verfahrens festgelegt werden:

- ▶ Pro Baum werden genauso viele Beobachtungen verwendet wie insgesamt zur Verfügung stehen (1235), allerdings zufällig mit Zurücklegen gezogen.
- Pro Baum werden 3 zufällig bestimmte Variablen verwendet.
- ► Es werden 1000 Bäume verwendet.

Daraus ergibt sich eine 246-fach kreuzvalidierte Fehlerrate von 2.59% (hier nicht behandelt).

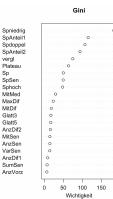




#### Wichtigkeit einzelner Variablen









Man erkennt, dass nur sehr wenige Variablen besonders wichtig sind, also stark zur Senkung der Unreinheit (gemessen mit dem Gini-Index) beitragen oder bei einer Permutation der Werte der entsprechenden Variablen die Fehlerrate stark ansteigen lassen.

Die anderen Variablen scheinen aber trotzdem einen kleinen Beitrag zur Klassentrennung zu liefern. Gerade in solchen Fällen wird die Verwendung von Zufallswäldern empfohlen, da alle Variablen an der Klassifikation beteiligt werden ohne Überanpassung an die Daten.



## **Bagging als Verallgemeinerung**



Es wurde erwähnt, dass die Methode der Konstruktion von Zufallswäldern, nämlich viele Klassifikationsregeln zusammenfassend zu gewichten, als bagging bezeichnet wird. Diese Technik des bagging kann auch auf andere (u.U. auch gleichzeitig auf unterschiedliche) Klassifikationsverfahren angewandt werden.



## **Bagging als Verallgemeinerung**



## **Bagging**

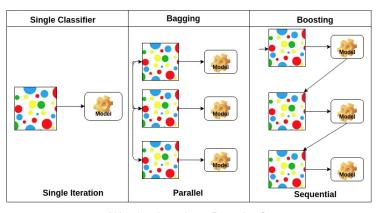
Mit bagging (Bootstrap aggregation) wird die Sammlung vieler gleichartiger Lerner und deren gemeinsame Entscheidungsregel bezeichnet, wobei die Lerner aus Bootstrap-Stichproben sowohl der Beobachtungen als auch der Variablen eines Datensatzes generiert werden.

Die Lernen sind tpyischerweise von recht einfacher Struktur, z.B. Random Forests als Bagging Verfahren, die einzelne Bäume als Lernen verwenden.



#### Wo stehen wir?





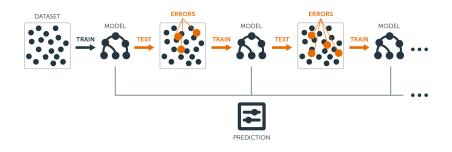
Was ist denn jetzt Boosting?



#### **Boosting**



Idee: Es ist wesentlich leichter ein paar Faustregeln für ein Problem zu finden sind, als eine generelle Regel, die das gesamte Problem wirklich löst.



## **Boosting** — Ein intuitives Beispiel



Wir wollen beim Pferderennen auf den Gewinner tippen. Wir fragen eine Expertin. Ihr wird es schwer fallen, eine einzige Regel aufzustellen, anhand derer man auf den Gewinner schließen kann. Stattdessen nennt sie uns einige Faustregeln:

"Tipp auf das Pferd, das in der letzten Zeit oft gewonnen hat"
und
"Tipp auf das Pferd, das die besten Quoten hat", ....

## **Boosting**

Jede Regel für sich alleine ist nur ein bisschen besser, als zufällig auf ein Pferd zu tippen. Kombinieren wir viele solche Fausregeln zu einer gewichteten Mehrheitsentscheidung, so erhält man u.U. einen mächtigen Klassifikator.



#### Boosting — Schwache und starke Lerner







- Boosting ist ein Verfahren, das eine effiziente Entscheidungsregel für ein Klassfikationsproblem aufstellt, indem es mehrere einfache Regeln kombiniert. Diese Regeln werden schwache Klassifikatoren (weak learner) oder Basisklassifikatoren genannt:
  - z.B. naive Bayes, logistische Regression, decisions stumps oder flache Entscheidungsbäume, etc.: typischerweise keine Überanpassung, können aber auch keine komplexen Vorhersagen treffen.
- Das Ergebnis von Boosting dagegen bezeichnen wir als starken Klassifikator (strong learner).



#### **Boosting**



#### Idee (Shapire, 1989)

Nimm einen schwachen Lernen und trainiere ihn mehrmals — immer wieder neu gewichtet — auf den Trainingsdaten

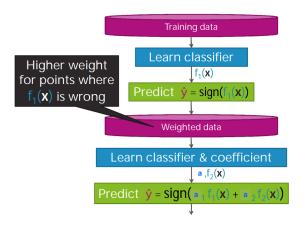
#### In jeder Iteration t:

- Gewichte jede Trainigsbeispiel je nachdem "wie falsch" es klassifiziert wurde
- ► Trainiere den schwachen Lernen erneut auf den so gewichteten Bespielen
- ightharpoonup Bestimme ein "Mitspracherecht"  $\alpha_t$  des trainierten Weak-Learners



#### **Boosting** — Anschaulich







# Boosting — AdaBoost für zwei Klassen Details zur Adaption der Gewichtungen finden Sie in der Literature



- ▶ Als Input ist ein Trainingdatensatz  $(y_1, x_1), ..., (y_m, x_m)$  gegeben, wobei die  $x_i$ s die Merkmale und die  $y_i$ s die Klassenlabels sind . Hier also  $y_i \in \{-1, +1\}$ .
- Anfangs sind alle Beispiele gleich wichtig:  $w_i = \frac{1}{m}$
- ► Wir trainieren einen schwachen Klassifikator, der den (durch die *w*<sub>i</sub>s) gewichteten Klassifiaktionsfehler minimiert.
- lacktriangle Der gewichteten Klassifiaktionsfehler sagt uns, wieviel Mitspracherecht  $\alpha_t$  der Weak-Learner hat
- Nach jeder Trainingsrunde t gewichten wir Beispiel mit einem größerem Fehler mehr, alle Gewichte zusammen summieren sich aber noch zu 1.





## Boosting — AdaBoost für zwei Klassen





- 1. Assign every observation,  $x_i$ , an initial weight value,  $w_i = \frac{a}{n}$ , where n is the total number of observations.
- 2. Train a "weak" model. (most often a decision tree)
- 3. For each observation:
  - 3.1. If predicted incorrectly, wi is increased
  - 3.2. If predicted correctly, w; is decreased
- 4. Train a new weak model where observations with greater weights are given more priority.
- 5. Repeat steps 3 and 4 until abservations perfectly predicted or a preset number of trees are trained.

ChrisAlbon



# AdaBoost — Aber wie beachten wir die Gewichte beim Trainieren der Weak-Learners?



Wenn der Lerner nicht direkt mit gewichteten Trainingsbeispielen umgehen kann, dann ziehen wir Stichproben:

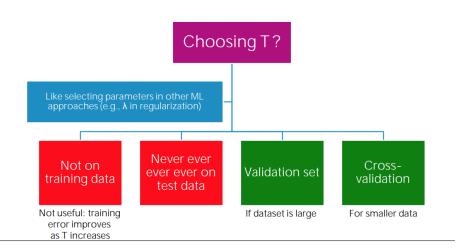
- Wir interpretieren die Gewichte als Wahrscheinlichkeiten
- Beispiele mit größerem Gewicht, haben eine größere Wahrscheinlichkeit als Stichprobe (mit Zurücklegen) gezogen zu werden

Funktioniert wenn, der der Weak-Learner mit unterschiedliche Anzahlen von identischen Trainingsbeispielen umgehen kann.



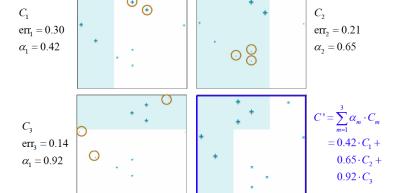
#### Boosting — Und wann stoppen wir das Lernen?





## Beispiel AdaBoost für zwei Klassen

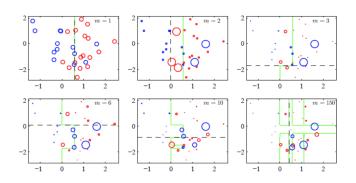






# Ein weiteres Beispiel für AdaBoost auf zwei Klassen





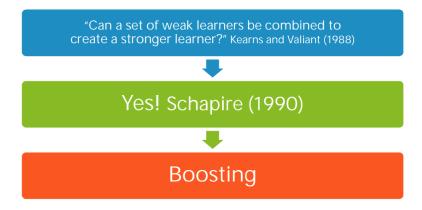
Circle = data points, circle size = weight.

Dashed line: Current weak learner. Green line: Aggregate decision boundary.



#### **Die Boosting Frage**







#### Und das funktioniert sehr oft (aber nicht immer)



Under some technical conditions...

Condition = At every t,
can find a weak learner with
weighted\_error(f₁) < 0.5

Extreme example:
No classifier can separate a + 1
on top of -1

Nonetheless, boosting often yields great training error



#### **Boosting versus Bagging**

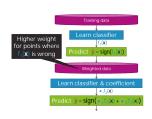


Boosting	Bagging
Gewichtung von Trainingsbeispielen	Ziehen von Stichproben
Das Gewicht eines schwachen Lerners hängt von der Vorhersagegüte ab	Gewicht ist für alle Lerner gleich



# Gradienten Boosting — Warum schauen wir uns nicht den Gradient an, wenn wir ihn haben? Der sagt uns doch auch, wo wir falsch liegen.



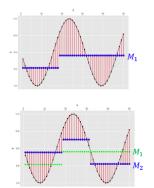


- Wir berechnen eine additives Modell  $f(x) = \sum_{m=1}^{M} \alpha_m f_m(x)$  (Ensemble) Schritt für Schritt von 1 bis M
- In jeder Iteration trainieren wir einen neuen schwachen Lernen, der die "Schwachstellen" der bisherigen schwachen Lerner ausmerzt.
- Gradienten Boosting benutzt dazu die Gradienten der Lossfunktion.
- Bei AdaBoost wurden die "Schwachstellen" durch stark-gewichtete Fehlklassifikationen bestimmt.



## **Gradienten Boosting — Regression als Beispiel**



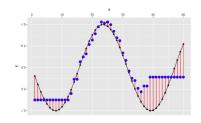


- 1. Trainiere einen flachen Regressionsbaum  $T_1$  auf den Daten. Wir erhalten als erstes Model  $M_1 = T_1$ . Die "Schwachstellen" ergeben sich aus den *residuen* =  $y \hat{y}$ .
- Trainiere einen Regressionsbaum T₂ auf den Residuen. Wir erhalten als zweites Model M₂ = M₁ + γ₂ T₂, wobei γ eine Lernrate ist. Zur Regularisierung führen eine zweite Lernrate ν ∈ (0, 1) ein M₂ = M₁ + νγ₂ T₂
- Trainiere einen weiteren Regressionsbaum auf den Residuen von M<sub>2</sub> ... und mache das so lange, bis die kombinierten Model gut die Daten darstellt.



## **Gradienten Boosting — Regression als Beispiel**





- Wir führen also schrittweise immer mehr Modelle der Residuen ein.
- ▶ Das finale Model M ist das gewichtete Mittel der nacheinander gelernten Modelle:

$$\mathbf{M} = \mathbf{M}_1 + \nu \sum \gamma_i T_i$$

Je näher man die Lernrate  $\nu$  zu 1 setzt, desto schneller das Lernen und desto größer die Gefahr einer Überanpassung.



#### **Gradienten Boosting versus Lineare Regression**



Bei der linearen Regression können wir die optimalen Parameter analytisch finden. Aber wir können auch den Gradienten der Lossfunktion bzgl. der Parameter pro Beispiel berechnen. Damit können wir iterative die optimalen Parameter schätzen.

#### **Funktionaler Gradient**

Gradienten Boosting folgt dieser Idee. Es approximiert aber den funktionalen Gradienten, also den Gradienten im Funktionenraum! Bei einem Squared Loss sind die Residuen gerade die neativen Gradienten der Lossfunktion:

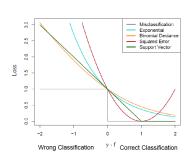
$$L = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{n} r_i^2 = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{n} (y_i - f(x_i))^2$$
$$\frac{\partial L}{\partial f(x_i)} = -(y_i - f(x_i)) = r_i$$



#### **Vorteil von Gradienten Boosting**



Damit können wir andere Lossfunktionen betrachten und entsprechenden Boosting Verfahren herleiten.



- Fehlklassifikation: L(y, F) = I[y = sign(F)]
- Exponential/AdaBoost:  $L(y, F) = \exp(-yF)$
- ▶ Binomial :  $L(y, F) = \log (1 + \exp(-2yF))$
- Quadratisch/ $L_2$ :  $L(y, F) = (y F)^2$
- ► SVM: L(y, f) = y(1 yF)

#### **Allgemeines Gradienten Boosting**



- Wähle Lossfunktion
- ► Trainieren ein schwaches Anfangsmodel  $M = M_1$
- Wiederhole die folgenden Schritte bis zur Konvergenz:
  - ▶ Berechne negative Gradienten  $-g(x_i) = -\frac{\partial Loss(y-i,m(x_i))}{\partial M(x_i)}$
  - ightharpoonup Trainiere ein Regressionsmodell  $T_k$  auf den negativen Gradienten  $-g(x_i)$
  - Füge  $T_k$  zum Ensemble hinzu:  $M = M_1 + \nu \sum \gamma_k T_k$

#### xgboost

Extreme Gradient Boosting (xgboost) eine sehr gute Realisierung von Gradient Boosting. Betont Regularisierung etwas mehr. Verteilte Berechnung möglich (10x schneller als auf einer einzelnen Maschine). War häufig Teil von Gewinnern bei Kaggle Wettbewerben.





```
library (gbm)
library (MASS) # for boston housing data
#separating training and test data
train=sample(1:506, size=374)
Boston.boost=gbm(medv ~ . ,data = Boston[train,],
                    distribution = "gaussian",
                    n.trees = 10000,
                    shrinkage = 0.01, # aka learning rate
                    interaction.depth = 4)
# look at variable importance
summary(Boston.boost)
           rel.inf
# lstat
        1stat 36,0378370
          rm 32.0817888
# dis
         dis 9.1929237
        crim 5.2662981
         nox 3,9236955
         age 3.6299790
# black
        black 3.3031968
# ptratio ptratio 2.6644378
         tax 1.4270161
         rad 0.7865713
# indus
        indus 0.7627721
        chas 0.7511395
f chas
          n 0.1723443
# partial dependency plots
plot(Boston.boost,i="rm")
# price increases with #rooms
```

code credits; https://datascienceplus.com/gradient-boosting-in-r/





```
# Test error as function of #trees
n.trees = seg(from=100 .to=10000, bv=100)
#Generating a Prediction matrix for each Tree
predmatrix<-predict(Boston, boost, Boston[-train,],
                     n.trees=n.trees, type="response")
dim(predmatrix)
#Calculating The Mean squared Test Error
test.error<-with(Boston[-train,],
                  apply((predmatrix-medv)^2.2.mean))
head(test.error)
                                                        Perfomance of Boosting on Test Set
#Plotting the test error vs number of trees
plot(n.trees , test.error ,
     pch=19.col="blue".
                                                       25
                                                    Test Error
     xlab="Number of Trees".
     vlab="Test Error",
     main="Perfomance of Boosting on Test Set")
                                                              2000 4000 6000 8000
                                                                 Number of Trees
```

code credits: https://datascienceplus.com/gradient-boosting-in-r/





```
library(xgboost)
 library (magrittr)
 library(dplyr)
 library (Matrix)
 data <- read.csv("binary.csv", header = T)</pre>
 names(data) # "admit" "gre"
                                "qpa" "rank"
 data$rank <- as.factor(data$rank)
 # Partition data
 set.seed(1234)
 ind <- sample(2, nrow(data), replace = T, prob = c(0.8, 0.2))
 train <- data[ind==1.]
 test <- data[ind==2,]
# Create matrix - One-Hot Encoding for Factor variables
 trainm <- sparse.model.matrix(admit ~ .-1, data = train)
 head(trainm)
 train label <- train[,"admit"]</pre>
 train matrix <- xgb.DMatrix(data = as.matrix(trainm), label = train label)
 testm <- sparse.model.matrix(admit~.-1, data = test)
 test label <- test[,"admit"]</pre>
 test matrix <- xqb.DMatrix(data = as.matrix(testm), label = test label)
```

code credits: https://drive.google.com/file/d/0B5W8CO0Gb2GGV/UMAc2t8bnliG1E/view data: https://drive.google.com/file/d/0B5W8CO0Gb2GGV/RILTdWZkpJU1E/view youtube: youtube: https://www.youtube.com/watch?v=wo\TNwRrFHE&t=299s



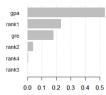


```
# Parameters
nc <- length(unique(train label))</pre>
xgb params <- list("objective" = "multi:softprob",</pre>
                     "eval metric" = "mlogloss".
                     "num class" = nc)
watchlist <- list(train = train matrix, test = test matrix)</pre>
# eXtreme Gradient Boosting Model
bst model <- xgb.train(params = xgb params,
                         data = train matrix.
                         nrounds = 1000.
                         watchlist = watchlist.
                         eta = 0.001.
                         max.depth = 3,
                         gamma = 0
                                                         train loss (blue) & test loss (red)
                         subsample = 1,
                         colsample bytree = 1,
                         missing = NA.
                         seed = 333)
                                                  strain_mlogloss
                                                     9
# Training & test error plot
                                                     9
e <- data.frame(bst model$evaluation log)
plot(e$iter, e$train mlogloss, col = 'blue')
lines(e$iter, e$test_mlogloss, col = 'red')
                                                     26
min(e$test mlogloss)
                                                              200
e[e$test mlogloss == 0.625217.1
                                                                     e$iter
```



```
# Feature importance
imp <- xqb.importance(colnames(train matrix),</pre>
                      model = bst model)
print(imp)
xqb.plot.importance(imp)
title("xgboos importance plot")
# Prediction & confusion matrix - test data
p <- predict(bst model, newdata=test matrix)</pre>
pred <- matrix(p, nrow=nc) %>%
         t() %>%
         data.frame() %>%
         mutate(label = test label,
                \max prob = \max.col(., "last")-1)
                #find max pos in each row
table (Prediction=pred$max prob, Actual=pred$label)
              Actual
# Prediction 0 1
           0 49 21
```

#### xgboost importance plot





#### Was haben sie kennengelernt?



- ► Ensemble Methoden: Zusammen sind schwache Klassifiaktoren mächtig
- Eine der am meisten benutzten Techniken des Maschinellen Lernens. Wird von vielen Gewinnern von ML-Wettbewerben benutzt. Die meisten ML-Systeme in der Praxis basieren auf Ensemble Methoden
- Bagging und Boosting
- Sie k\u00f6nnen Algorithmen f\u00fcr Random Forests, AdaBoost und Gradient Boosting beschreiben
- Sie können die Konvergenzeigenschaften von AdaBoost diskutieren.
- Sie kennen die R packages randomForest, gbm und xgboost

