Lecture 7：Blending and Bagging

> 课件链接：[Hsuan-Tien Lin - blending and bagging]
>
> **Blending and Bagging(混合与套袋)**
>
> - Motivation of Aggregation: 聚合的动机
> - Uniform Blending: 均匀混合
> - Linear and Any Blending: 线性混合与任意混合
> - Bagging (Bootstrap Aggregation): 套袋法

1. Motivation of Aggregation：聚合的动机

Aggregation models(聚合模型)：mix or combine hypotheses (for better performance)——将不同的hypothesis组合起来，以达到更好的表现。

假设现有T个假说$g_1, \cdots, g_T$，它们根据今天的输入预测明天的股票会涨还是会跌(二元分类问题)——$g_t(\mathbf{x}) \in \{-1, +1\}$。从聚合模型的视角，有以下几种常见的聚合方式：

1. 选择其中“最值得信赖的”，也就是表现最好的——等价于**Validation**：

$$G(\mathbf{x}) = g_{t_*}(\mathbf{x})\ with\ t_* = argmin_{t \in \{1,2,\cdots,T\}} E_{val}(g_t^-)$$

2. 均匀混合所有假说预测的结果，**uniformly**：

$$G(\mathbf{x}) = sign\Big(\sum_{t=1}^{T} 1 \cdot g_t(\mathbf{x})\Big)$$

3. 非均匀混合所有假说预测的结果，**non-uniformly**：
   - 包括第一种情况：$\alpha_t = I\Big[E_{val}(g_t^-)\ smallest\Big]$
   - 包括第二种情况：$\alpha_t = 1$

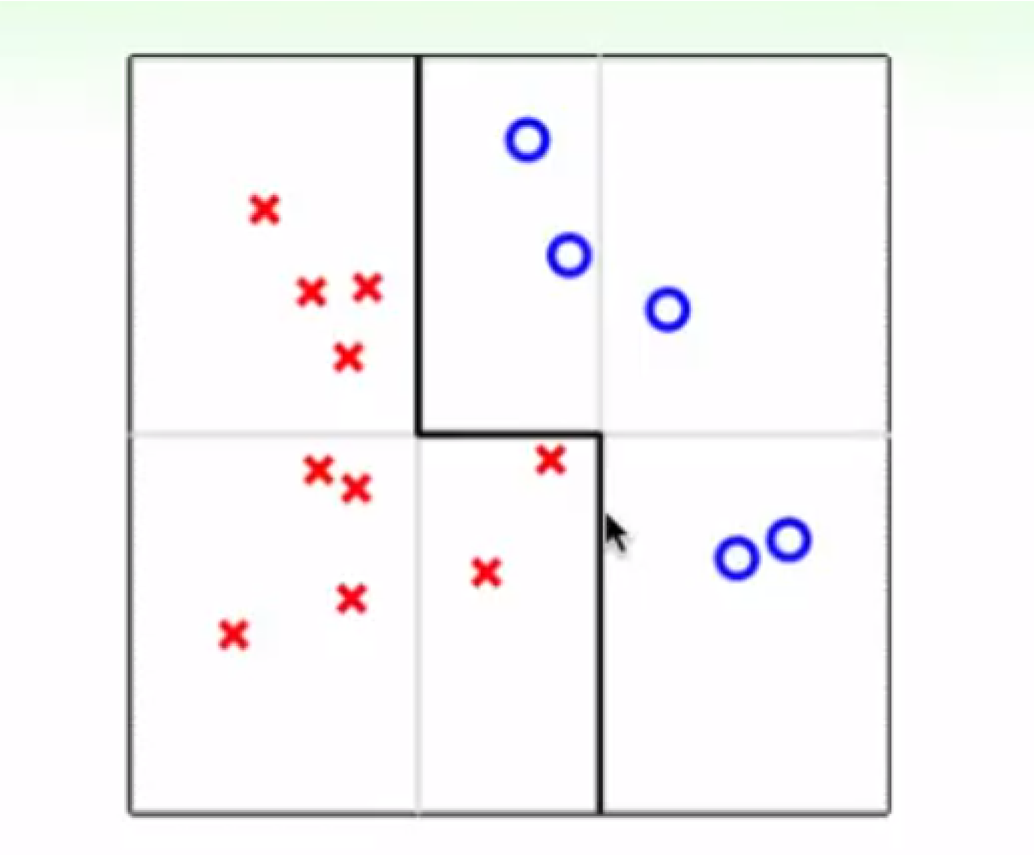
$$G(\mathbf{x}) = sign\Big(\sum_{t=1}^{T} \alpha_t \cdot g_t(\mathbf{x})\Big)\ with\ \alpha_t \geq 0$$

4. 按照不同情况混合所有假说结果，**conditionally**：
   - 包括第三种：$q_t(\mathbf{x}) = \alpha_t$，也就包含了上面所有的情境

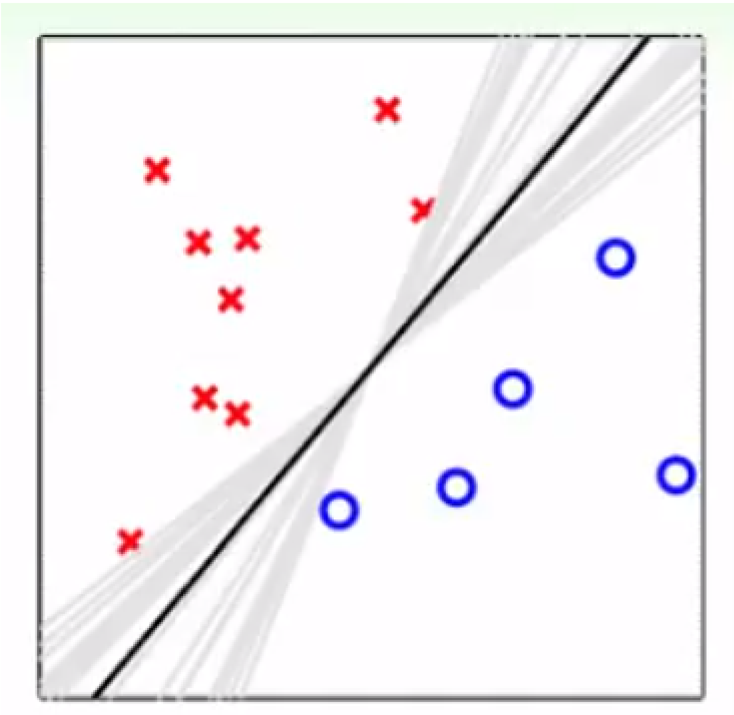
$$G(\mathbf{x}) = sign\Big(\sum_{t=1}^{T} q_t(\mathbf{x}) \cdot g_t(\mathbf{x})\Big)\ with\ q_t(\mathbf{x}) \geq 0$$

聚合的好处

对于Validation，我们要用$E_{val}(g_t^-)$来选择t_*，而不能用$E_{in}(g_t)$，因为会付出VC维的代价。那么这也就需要保证，g_t^-中至少有一个足够好(strong)。所以，用Validation来做选择，依赖一个比较强的假说；但聚合往往并不需要，该方法可以把一些弱弱的(weak)假说集成起来，形成一个较强的聚合模型。



好处1：如上图所示，将一些非常弱的hypothesis（e.g. 决策树桩）均匀混合起来（投票，voting），可以拟合出较复杂的边界，即$G(\mathbf{x})$很强——类似于**feature transform**；



好处2：如上图所示，将不同的PLA的结果均匀混合起来，可以拟合出比较**中性**的边界——类似于**regularization**。

因此，适当的聚合能够得到表现更好的hypothesis。

2. Uniform Blending：均匀混合

"聚合(aggregate)"的一种情况是**"混合(blending)"**，表示：在已知g_t的前提下，将其聚合起来。

1）均匀混合：分类问题

uniform blending for classification = voting

已知g_t，一人一票，等权重均匀混合，得到的聚合模型如下：

$$G(\mathbf{x}) = sign\Big(\sum_{t=1}^{T} 1 \cdot g_t(\mathbf{x})\Big)$$

- 如果g_t都很类似，那么均匀混合起来得到的聚合模型应该没有什么效力；
- 如果g_t很不一样，那么聚合模型应该可以发挥作用，因为
- 、多数可以修正少数的错误；
- 对于多类别问题，选择得票最多的类别：

$$G(\mathbf{x}) = \underset{1\le k\le K}{argmax} \sum_{t=1}^{T} I\Big[g_t(\mathbf{x}) = k\Big]$$

2）均匀混合：回归问题

$$G(\mathbf{x}) = \frac{1}{T}\sum_{t=1}^{T} g_t(\mathbf{x})$$

- 如果g_t都很类似，那么均匀混合起来得到的聚合模型应该没有什么效力；
- 如果g_t很不一样，比如一些$g_t(\mathbf{x}) > f(\mathbf{x})$，一些$g_t(\mathbf{x}) < f(\mathbf{x})$，那么平均起来的话可能更加中肯、精确。

因此，如果要求聚合模型能够发挥效力，必须保证聚合的个体**“非常不同(diverse)”**——只要很不同，即使很简单的个体，聚合起来也会非常强大。

3）均匀混合的理论保证

以**回归形式**为例：

$$G(\mathbf{x}) = \frac{1}{T}\sum_{t=1}^{T} g_t(\mathbf{x})$$

固定$\mathbf{x}$，有：

$$\underset{t}{avg}\Big((g_t(\mathbf{x}) - f(\mathbf{x}))^2\Big) = \underset{t}{avg}\Big((g_t(\mathbf{x}) - G(\mathbf{x}))^2\Big) + (G(\mathbf{x}) - f(\mathbf{x}))^2$$

两边对$\mathbf{x}$求期望得：

$$\underset{t}{avg}\Big(E_{out}(g_t)\Big) = \underset{t}{avg}\Big(\epsilon(g_t - G)^2\Big) + E_{out}(G) \ge E_{out}(G)$$

上式说明，**单一hypothesis的(平均)表现要比均匀混合模型的表现差。**

4）偏差-方差

现在暂时考虑某一固定的演算法A。迭代T次，$t = 1, 2, \cdots, T$：

1. 从分布P上i.i.d.出N笔资料，记做D_t；
2. 用某一固定的演算法根据上述数据学习，得到$g_t = A(D_t)$；

令迭代次数趋近于无穷大，则最后：

$$\bar{g} = \lim_{T\to\infty} G = \lim_{T\to\infty}\frac{1}{T}\sum_{t=1}^{T} g_t = \underset{D}{\epsilon}\, A(D)$$

该演算法在看过各种五花八门的数据集后，产生出五花八门的hypothesis，然后混合起来，得到的就是$\bar{g}$。

之前我们有：

$$\underset{t}{avg}\Big(E_{out}(g_t)\Big) = \underset{t}{avg}\Big(\epsilon(g_t - G)^2\Big) + E_{out}(G) \geq E_{out}(G)$$

现在我们有（$t \to \infty$）：

$$\underset{t}{avg}\Big(E_{out}(g_t)\Big) = \underset{t}{avg}\Big(\epsilon(g_t - \overline{g})^2\Big) + E_{out}(\overline{g})$$

- LHS：演算法表现的期望值，expected performance of A；
- RHS：**expected deviation to consensus(variance)+ performance of consensus(bias)**，前者可以理解为对“共识”的偏离，后者可以理解为演算法输出假设们的“共识”的表现。

因此，一个演算法的平均表现，可以被拆为两个部分：“共识”的表现，以及每个输出假设离“共识”有多远。

所以，我们做聚合，其实相当于**减小variance**。

3. Linear and Any Blending：线性混合与任意混合

1）线性非均匀混合

已知g_t，但每个人的票数不等，是非均匀混合：

$$G(\mathbf{x}) = sign\Big(\sum_{t=1}^{T} \alpha_t \cdot g_t(\mathbf{x})\Big)\ with\ \alpha_t \geq 0$$

如何决定α_t？可能我们希望E_{in}最小：

$$\underset{\alpha_t \geq 0}{min}\ E_{in}(\alpha)$$

因此，对于**回归问题**，我们就是要解：

$$\underset{\alpha_t \geq 0}{min}\ \frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N}\Big(y_n - \sum_{t=1}^{T}\alpha_t g_t(\mathbf{x}_n)\Big)^2$$

这里，我们可以把上述过程看做**transformation+linear regression**：

- 首先将每个$\mathbf{x}$透过各个g_t，得到新的向量$(g_1(\mathbf{x}), g_2(\mathbf{x}), \cdots, g_T(\mathbf{x}))$；
- 然后再在转换过后的数据上，进行线性回归，得到α。

特别的，$\alpha_t \geq 0$的限制可以除去，因为负数相当于投反票。

2）线性非均匀混合 vs Selection

现实中，$g_t \in \mathcal{H}_t$ 通过最小化E_{in}得到。若此，我们就不可以再用E_{in}来选择α_t，否则会过拟合。因此，我们需要切割出一部分资料作为验证集，使用Validation的方法：

- 从E_{train}上训练一堆g_t^-；
- 然后通过最小化E_{val}选α_t。

3）具体操作

Step 1：

- 从D_{train}中训练各个g_t^-：$g_1^-, g_2^-, \cdots, g_T^-$。

Step 2：

- 将D_{val}中的每个$(\mathbf{x}_n, y_n)$进行转换得到$(\mathbf{z}_n, y_n)$，其中$\mathbf{z}_n = \Phi^-(\mathbf{x}_n) = \left(g_1^-(\mathbf{x}_n), g_2^-(\mathbf{x}_n), \cdots, g_T^-(\mathbf{x}_n)\right)$。

Step 3:

- 计算$\alpha = Lin\left(\{(\mathbf{z}_n, y_n)\}\right)$，并返回$G_{LINB}(\mathbf{x}) = LinH(innerprod(\alpha, \Phi(\mathbf{x})))$——这里不是$\Phi^-$而是$\Phi$，即最后还要用整个数据集（$D_{train} + D_{val}$）训练出每一个$g_t$，而不是用之前的$g_t^-$。

当然，我们在第三步中，可以不用线性模型，采用**任意模型**均可：

Another Step 3:

- 计算$\tilde{g} = Any\left(\{(\mathbf{z}_n, y_n)\}\right)$，并返回$G_{ANYB}(\mathbf{x}) = \tilde{g}(\Phi(\mathbf{x}))$。

上一步就是**Any blending**：

- 非常强大，也就是第三种conditional blending = **Stacking**
- 容易过拟合。

4. Bagging：套袋法

blending: aggregate after getting g_t;
learning: aggregate as well as getting g_t

aggregation type	blending	learning
uniform	voting/averaging	?
non-uniform	linear	?
conditional	stacking	?

对于聚合模型，g_t越不一样越好。怎么让学到的g_t越不一样？我们可以考虑：

- 用不同的模型：$g_1 \in \mathcal{H}_1, g_2 \in \mathcal{H}_2, \cdots$
- 用不同的参数：梯度下降时$\eta = 0.001, 0.01, 0.1, \cdots$
- 算法本身的随机性：如PLA，再加上不同的随机数种子；
- **数据的随机性**：交叉检验时，每个g_v^-就是用不同的数据训练出来的——**Bagging的启发点**

下面，我们尝试用同样一份资料，制造出不同的g，而非g^-。

回顾之前所推导的Bias-Variance：

expected performance of A = expected deviation to consensus + performance of consensus

其中，consensus $\bar{g}$ = expected g_t from $D_t \sim P^N$

我们希望拿到$\bar{g}$，它比直接将演算法A用一次在D上更好（更稳定），但是不可能：

- 首先，需要无限多个g，然后平均起来，不可能；
- 其次，我们手头只有一个资料集D。

妥协：

- 拿出有限但足够多的g；
- 想办法从仅有的一个资料集中产生出多笔略微互相不同的资料集——**Bootstrapping**：实质是re-sample。

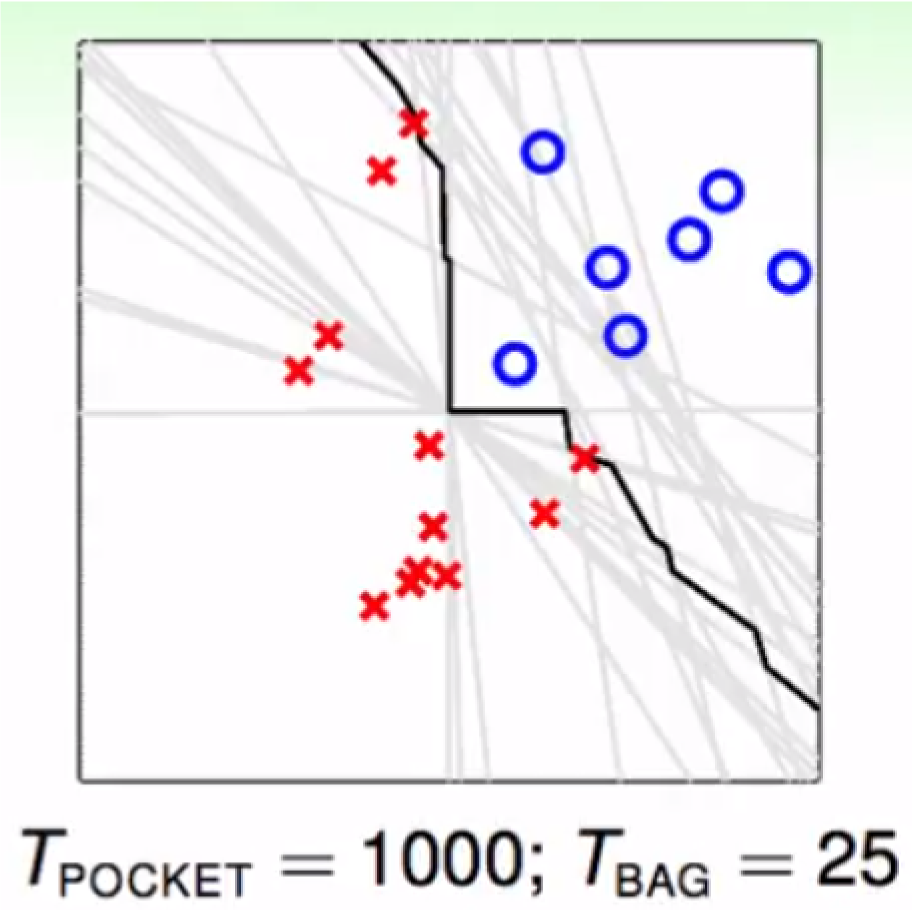
Bootstrapping

从现存的资料集D中**有放回(with replacement)**地取N笔资料，构成一个新的资料集$\tilde{D}_t$——**有放回去的动作**，因此一笔资料可能被选到好几次，也可能一次都没有被选到。这个新的资料集$\tilde{D}_t$被称为**bootstrap sample**。当然，也不一定非要是N笔。

所以，我们现在就有Bootstrap aggregation的概念：每一次拿到一个bootstrap sample $\tilde{D}_t$，然后训练一个$g_t = A(\tilde{D}_t)$；最后把T个g**均匀混合**起来：$G = Uniform\Big(\{g_t\}\Big)$

Bagging = Bootstrap aggregation：A simple **meta algorithm** on top of **base algorithm** A——Bagging是一个上层算法，叫meta；它利用（组合）了其他算法的输出，这里其他算法就是base。

示例：base algorithm是PLA的bagging



注意，当base algorithm对数据的随机性十分敏感的时候，bagging的效果非常好。即base algorithm为不稳定（unstable）型的——数据集稍微变一点点，训练出来的输出假说就很不一样——例如，决策树。

5. Summary

- Aggregation Model有两大好处：
  - 第一，作用类似于特征转换，能够生成更加复杂的边界；
  - 第二，作用类似于正则化，能够得到更加“中庸”的边界。
- 从均匀混合的理论保证中我们得到了两个发现：
  - 第一，混合模型的表现比单一模型的平均表现好；
  - 第二，对于同一种演算法，其均匀混合的极致就代表了该演算法的“共识”，也就是该演算法的真正效力；该演算法表现的期望值，等于这种“共识”加上“波动”水平。
- 面对线性非均匀混合，我们往往需要进行two-level learning：在训练集上训练出不同的hypothesis，然后用它们进行feature transform，再在验证集上学习混合系数。Any Blending，又被称为Stacking，过程与之类似。

- Bagging的核心是Bootstrapping，即从同一笔资料中采用有放回抽样的方法，产生多笔不同的资料，进而训练出多个不同的hypothesis，然后均匀混合。其实质是在逼近演算法的“共识”。因此，Bagging适用于unstable的演算法，例如决策树。