Machine Learning

Prof. Dr. Fabian Brunner

<fa.brunner@oth-aw.de>

Amberg, 12. Dezember 2023

Übersicht

Thema heute: Ensemble-Methoden

- Grundgedanke von Ensemble-Methoden
- Methoden zur Konstruktion von Ensembles
- Bagging
- Boosting
- AdaBoost
- RandomForest
- GradientBoosting
- Übung: Ensemble-Methoden in Scikit-learn

Grundgedanke und Ziele beim Ensemble-Lernen

Ostbayerische Technische Hochschule Amberg-Weiden

Grundgedanke:

- Reduktion der Häufigkeit von Fehlurteilen durch Bilden einer „Jury von Experten“ und Abstimmung über die richtige Vorhersage
- Dazu: Kombination mehrerer (Basis-)Modelle zu einem „Ensemble“
- Prognostiziere ein neues Sample durch geeignete **Aggregation** der Vorhersagen der Basis-Modelle.
- Geeignet für Regression (Aggregation durch Mittelwertbildung) und Klassifikation (Aggregation durch Voting, s. gleich). Wir beschränken uns im Folgenden auf die Klassifikation.

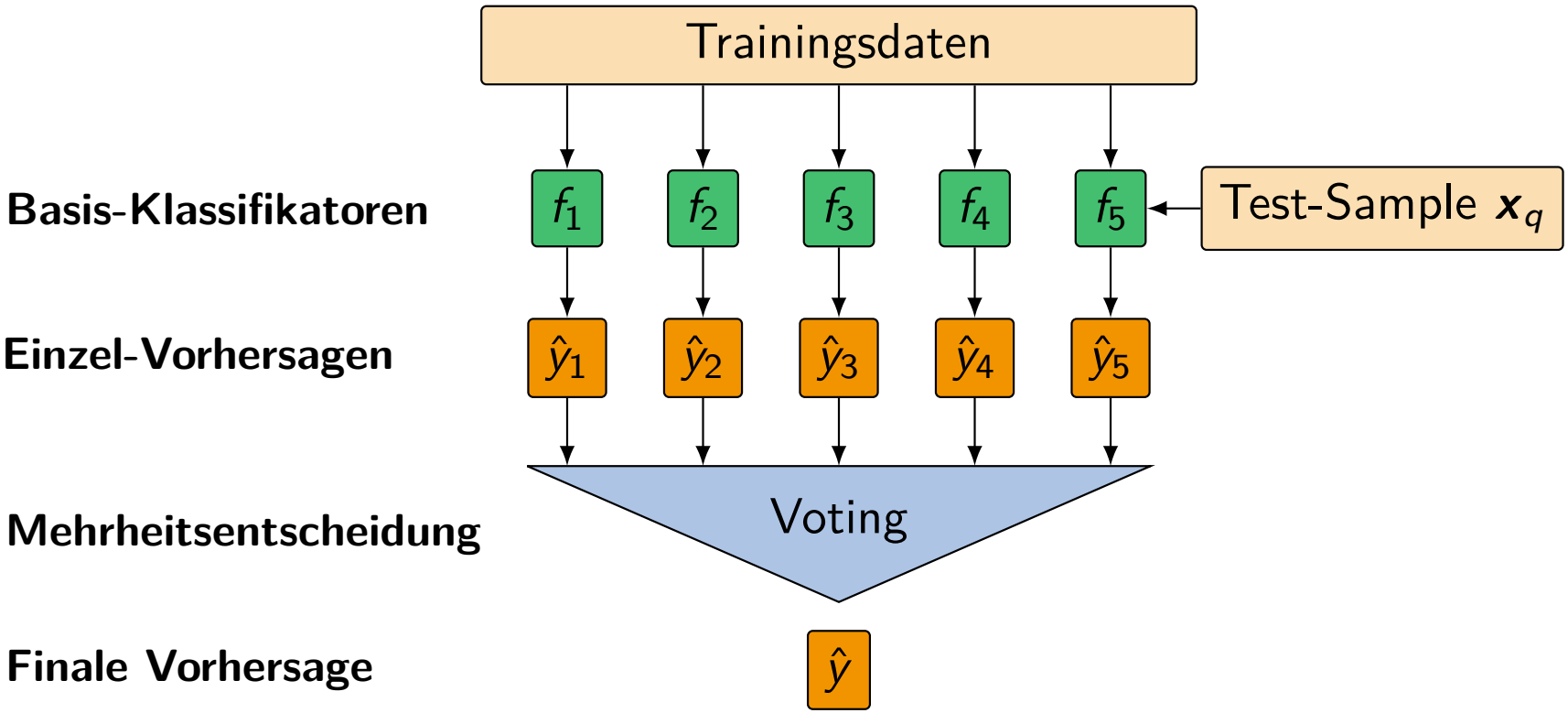
Mögliche Ziele:

- Genauigkeit erhöhen
- Verzerrung reduzieren
- Varianz reduzieren
- Effizienz steigern

Majority Voting

Idee:

- Trainiere mehrere separate Klassifikatoren
- Lasse die Mehrheit entscheiden, welcher Klasse ein gegebenes Sample zugeordnet wird.



Majority Voting

Binomialverteilung

- Zufallsexperiment mit zwei möglichen Ausgängen:
  1 („Erfolg“) und 0 („Misserfolg“).
- Das Experiment wird n-mal unabhängig voneinander ausgeführt.
- Sei X die Zufallsvariable, die die Anzahl der Erfolge misst. Dann ist X binomialverteilt:

$$P(X = k) = \binom{n}{k} p^k (1-p)^{n-k} \ .$$

Warum funktionieren Ensemble-Methoden?

- Betrachte Zusammenschluss von $N = 21$ Klassifikatoren zu einem Ensemble, die per Mehrheitsentscheidung binär klassifizieren.
- Stark vereinfachende Annahme: Die Klassifikatoren sind unabhängig und jeder klassifiziert mit $p = 0.7$ korrekt.
- Wahrscheinlichkeit, dass das Ensemble korrekt klassifiziert:

Majority Voting

Binomialverteilung

- Zufallsexperiment mit zwei möglichen Ausgängen: 1 („Erfolg“) und 0 („Misserfolg“).
- Das Experiment wird n-mal unabhängig voneinander ausgeführt.
- Sei X die Zufallsvariable, die die Anzahl der Erfolge misst. Dann ist X binomialverteilt:

$$P(X = k) = \binom{n}{k} p^k (1-p)^{n-k} \ .$$

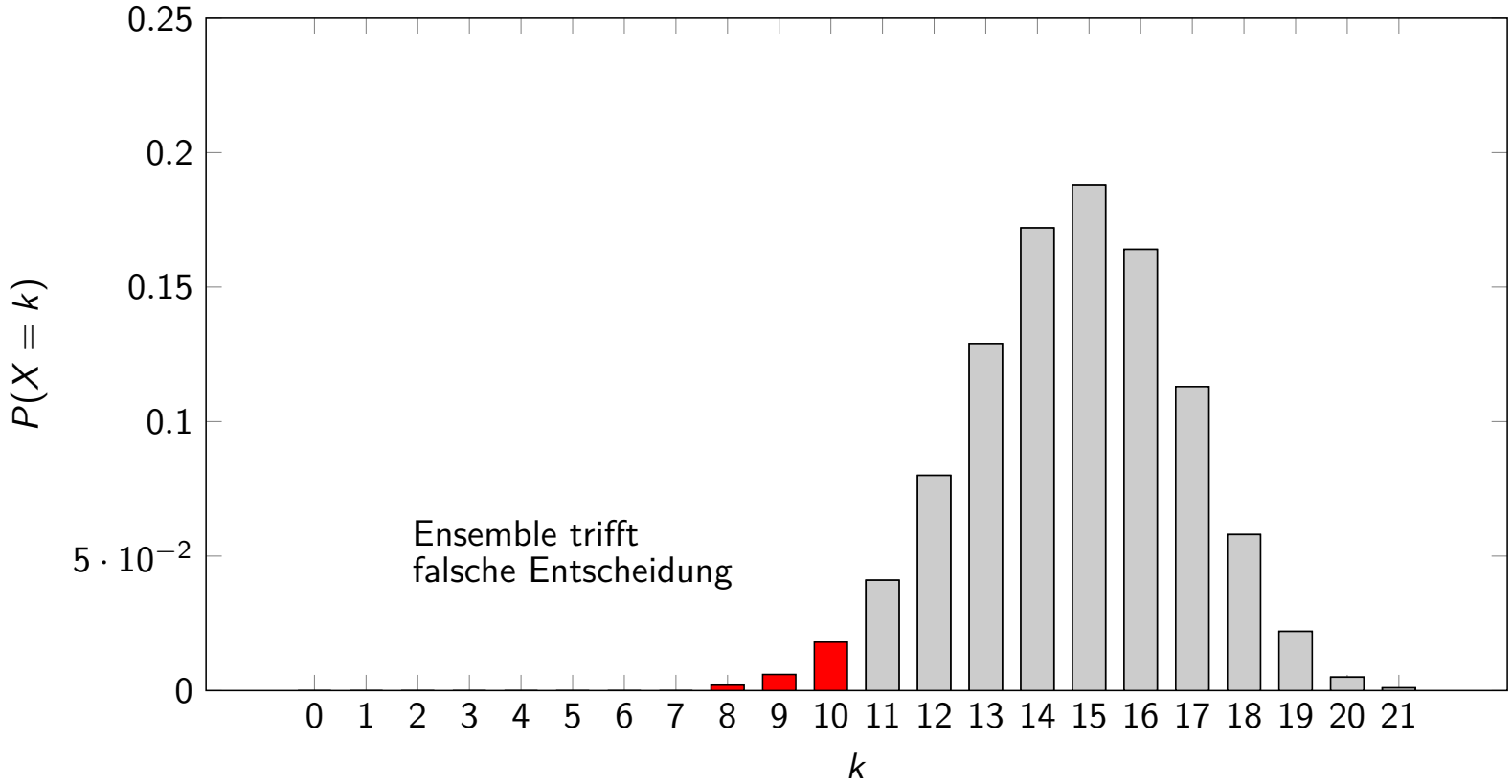
Warum funktionieren Ensemble-Methoden?

- Betrachte Zusammenschluss von $N = 21$ Klassifikatoren zu einem Ensemble, die per Mehrheitsentscheidung binär klassifizieren.
- Stark vereinfachende Annahme: Die Klassifikatoren sind unabhängig und jeder klassifiziert mit $p = 0.7$ korrekt.
- Wahrscheinlichkeit, dass das Ensemble korrekt klassifiziert:

$$\sum_{i=11}^{21} \binom{21}{i} p^i (1-p)^{21-i} = 0.97 \ .$$

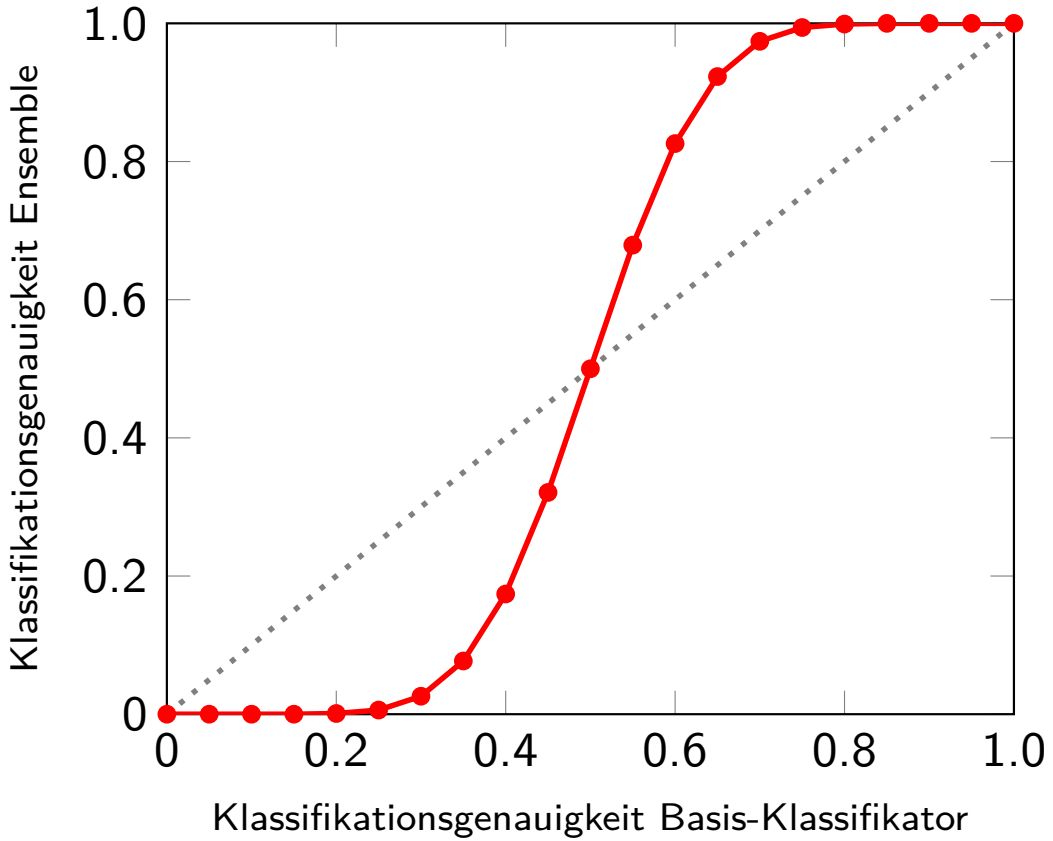
Majority Voting

Sei X die Zufallsvariable, die angibt, wie viele der 21 Klassifikatoren richtig liegen. Unter der Annahme, dass sie unabhängig sind und eine Accuracy von $p = 0.7$ haben, ist X binomialverteilt. Die folgende Grafik zeigt die Wahrscheinlichkeitsfunktion von X:



Ensemble vs. Basis-Klassifikatoren

Solange der Basis-Klassifikator besser ist als „zufälliges Raten“ ($p = 0.5$), ist das Ensemble dem Basis-Klassifikator überlegen:



Voraussetzungen: Accuracy und Diversity

Schlussfolgerung aus obiger Überlegung:

Notwendige Bedingung für die Verbesserung der Gesamt-Fehlerrate

1. Alle Basis-Klassifikatoren müssen hinreichend genau sein („Accuracy“).
2. Die einzelnen Basis-Klassifikatoren müssen hinreichend unterschiedlich sein („Diversity“).

Bemerkungen:

- Es gibt verschiedene Maße, um Diversity und Accuracy zu messen (Beispiel Regression: Varianz und Mean Squared Error)
- Es besteht ein Trade-off zwischen Diversity und Accuracy.

Soft Voting

- Verwendet man Basis-Klassifikatoren, die die Klassenzuordnung basierend auf einem kontinuierlichen Score treffen (z.B. Logistische Regression), kann man auch diesen für die Klassenzuordnung durch ein Ensemble verwenden:

$$\hat{y} = \underset{j \in \{1,\dots,n\}}{\arg\max} \sum_{i=1}^{N} w_i p_{i,j} \ ,$$

  wobei $p_{i,j}$ die Klassenwahrscheinlichkeit des i-ten Klassifikators für die Klasse j bezeichnet.
- Voraussetzung ist, dass die Scores der Basis-Klassifikatoren kalibriert sind.
- Beispiel: drei binäre Klassifikatoren liefern folgende Klassenwahrscheinlichkeiten für die positive Klasse:

$$p_1 = 0.45 \ , \quad p_2 = 0.45, \ p_3 = 0.7 \ .$$

  Welche Klasse würde ein Ensemble-Klassifikator basierend auf Majority-Voting prognostizieren? Welche ein Ensemble-Klassifikator, der auf Soft Voting mit $w_i = \frac{1}{3}$ basiert?

Reduzierung von Verzerrung und Varianz durch Ensembles

Statistische Varianz

- Der Raum möglicher Hypothesen ist zu groß, um anhand der begrenzten Trainingsdaten eine beste Hypothese zu bestimmen.
- Kombination mehrerer Hypothesen reduziert das Risiko, stark daneben zu liegen.

Reduzierung von Verzerrung und Varianz durch Ensembles

Ostbayerische Technische Hochschule Amberg-Weiden

Statistische Varianz

- Der Raum möglicher Hypothesen ist zu groß, um anhand der begrenzten Trainingsdaten eine beste Hypothese zu bestimmen.
- Kombination mehrerer Hypothesen reduziert das Risiko, stark daneben zu liegen.

Berechnungs-Varianz

- Lern-Algorithmen liefern nicht immer eine garantiert beste Hypothese aus einem Raum möglicher Hypothesen.
- Ein Optimierungsverfahren zum Modelltraining findet ggf. nur ein lokales Optimum, aber nicht das globale.
- Durch Kombination mehrerer Hypothesen kann das Risiko reduziert werden, das falsche Optimum gewählt zu haben.

Reduzierung von Verzerrung und Varianz durch Ensembles

Ostbayerische Technische Hochschule Amberg-Weiden

Statistische Varianz

- Der Raum möglicher Hypothesen ist zu groß, um anhand der begrenzten Trainingsdaten eine beste Hypothese zu bestimmen.
- Kombination mehrerer Hypothesen reduziert das Risiko, stark daneben zu liegen.

Berechnungs-Varianz

- Lern-Algorithmen liefern nicht immer eine garantiert beste Hypothese aus einem Raum möglicher Hypothesen.
- Ein Optimierungsverfahren zum Modelltraining findet ggf. nur ein lokales Optimum, aber nicht das globale.
- Durch Kombination mehrerer Hypothesen kann das Risiko reduziert werden, das falsche Optimum gewählt zu haben.

Darstellungsproblem

- Der Hypothesenraum enthält gar keine guten Approximationen an die „wahre“ Funktion f.
- Kombination mehrerer Hypothesen kann den Raum darstellbarer Hypothesen erweitern.

Gewinnung von Basis-Klassifikatoren

Ostbayerische Technische Hochschule Amberg-Weiden

Um diverse Basis-Klassifikatoren zu erzeugen, existieren verschiedene Ansätze, die auf verschiedene Klassen von Ensemble-Methoden führen.

Variieren der Trainingsdaten

- Unterschiedliche Gewichtung der Samples
- Subsampling (Modelltraining auf Teilmengen der Trainingsdatenmenge)

Gewinnung von Basis-Klassifikatoren

Ostbayerische Technische Hochschule Amberg-Weiden

Um diverse Basis-Klassifikatoren zu erzeugen, existieren verschiedene Ansätze, die auf verschiedene Klassen von Ensemble-Methoden führen.

Variieren der Trainingsdaten

- Unterschiedliche Gewichtung der Samples
- Subsampling (Modelltraining auf Teilmengen der Trainingsdatenmenge)

Manipulieren der Input-Features

- Zufällige Auswahl einer Teilmenge von Features („random subspace“)
- Zufällige Projektion von Features („random feature extraction“)

Gewinnung von Basis-Klassifikatoren

Ostbayerische Technische Hochschule Amberg-Weiden

Um diverse Basis-Klassifikatoren zu erzeugen, existieren verschiedene Ansätze, die auf verschiedene Klassen von Ensemble-Methoden führen.

Variieren der Trainingsdaten

- Unterschiedliche Gewichtung der Samples
- Subsampling (Modelltraining auf Teilmengen der Trainingsdatenmenge)

Manipulieren der Input-Features

- Zufällige Auswahl einer Teilmenge von Features („random subspace“)
- Zufällige Projektion von Features („random feature extraction“)

Manipulieren des Lernalgorithmus

- Zufällige Initialisierung von Modellparametern
- Unterschiedliche Startkonfigurationen

Bagging

Bagging=**B**ootstrap **Agg**regat**ing**

- Bagging ist eine Strategie zur Erzeugung eines Ensembles, welche auf der (zufälligen) Variierung der Trainingsdaten basiert.
- Die Klassifikatoren des Ensembles werden gewonnen, indem ein Lernverfahren auf unterschiedlichen Trainingsdatensätzen angewendet wird. Die Trainingsdatensätze werden durch wiederholtes **Bootstrapping** gebildet.
- Dieser Prozess kann gut parallelisiert werden.
- Ein neues, unbekanntes Sample wird durch Majority Voting klassifiziert.
- Bagging wird typischerweise eingesetzt, um Varianz zu reduzieren.

Bootstrap Sampling

Ostbayerische Technische Hochschule Amberg-Weiden

Bagging basiert auf der Bildung zufälliger Trainingsdatensätze durch wiederholtes **Bootstrapping**:

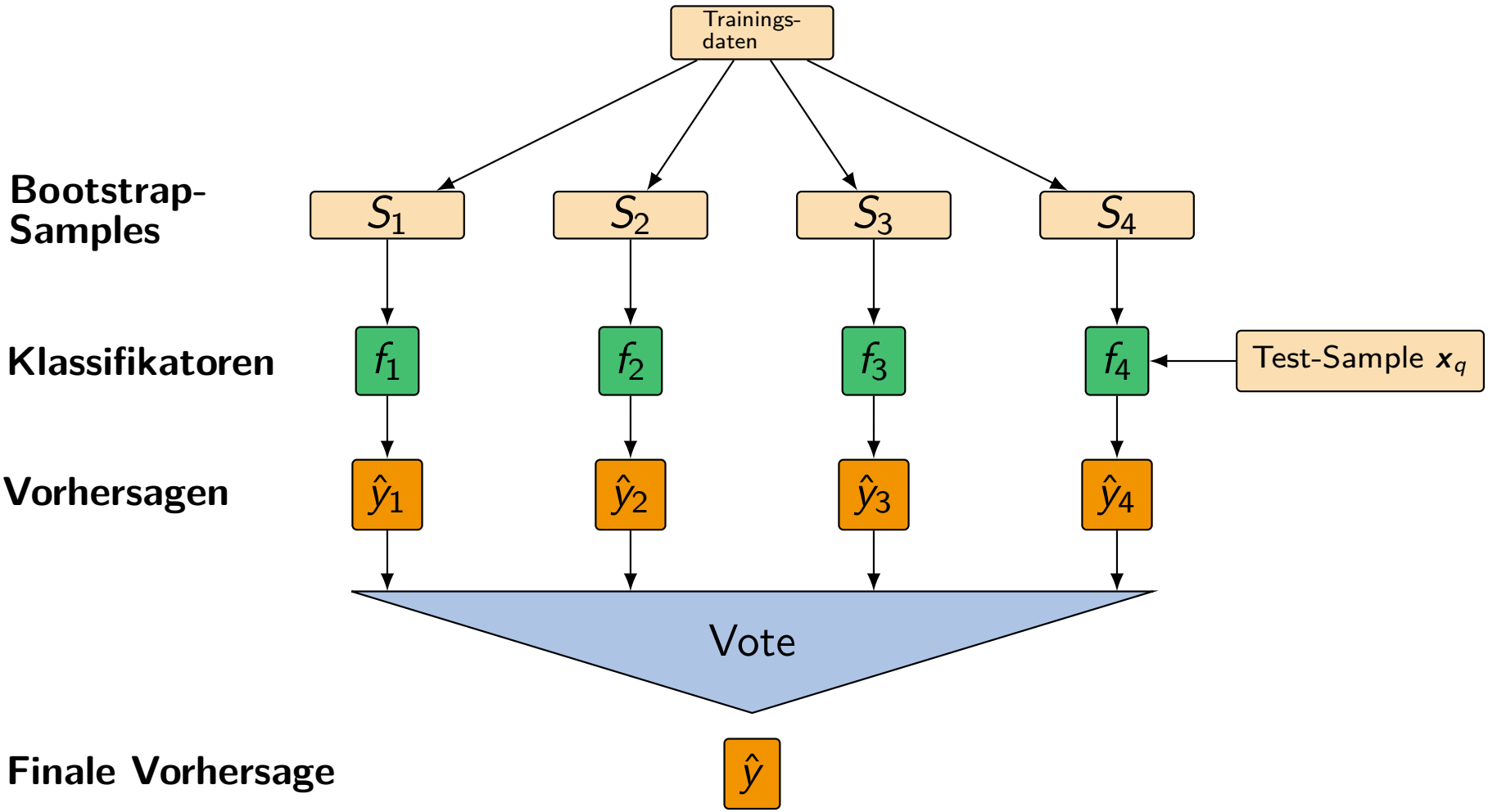
- Gewinnung mehrerer Samples aus der gegebenen Trainingsdatenmenge durch Ziehen mit Zurücklegen
- Jedes Sample hat die gleiche Größe wie die ursprüngliche Trainingsdatenmenge
- Ein Bootstrap-Sample enthält ca. 63% der Elemente der Trainingsdatenmenge (einige mehrfach, etwa 37% gar nicht).
- Begründung: ist m die Länge des Trainingsdatensatzes, so wird ein einzelnes Trainingsobjekt mit Wahrscheinlichkeit $1 - \frac{1}{m}$ bei einmaligem Ziehen mit Zurücklegen nicht ausgewählt. Bei m-fachem Ziehen ist es also mit Wahrscheinlichkeit $\left(1 - \frac{1}{m}\right)^m$ nicht im Bootstrap-Sample vertreten. Es gilt $\lim_{m \to \infty} \left(1 - \frac{1}{m}\right)^m = e^{-1} \approx 0.368$.

Ensemble-Learning durch Bagging

Algorithm 1 Bagging

1: Sei N die Anzahl der Bootstrap Samples und m die Anzahl der Trainings-Samples
2: **for** $i = 1$ to N **do**
3: Ziehe ein Bootstrap-Sample S der Länge m
4: Trainiere ein Modell f_i auf S
5: **end for**
6: $\hat{y} = mode\{f_1(\boldsymbol{x}_q), \ldots, f_N(\boldsymbol{x}_q)\}$

Prinzip beim Bagging



Boosting

Ostbayerische Technische Hochschule Amberg-Weiden

Wie funktioniert Boosting?

- Ziel beim Boosting ist es, durch Kombination mehrerer „schwacher Lerner“ (z.B. Decision-Tree-Stumpf) einen „starken Lerner“ zu generieren.
- Es handelt sich um einen iterativen Prozess, bei dem die Klassifikatoren eines Ensembles sequenziell, d.h. abhängig vom Ergebnis des jeweils vorangegangenen Schritts, erzeugt werden.
- In jedem Schritt wird, basierend auf dem aktuellen Modell, ein schwacher Lerner trainiert und (additiv-gewichtet) dem Ensemble hinzugefügt.

Unterschiede zwischen Bagging und Boosting:

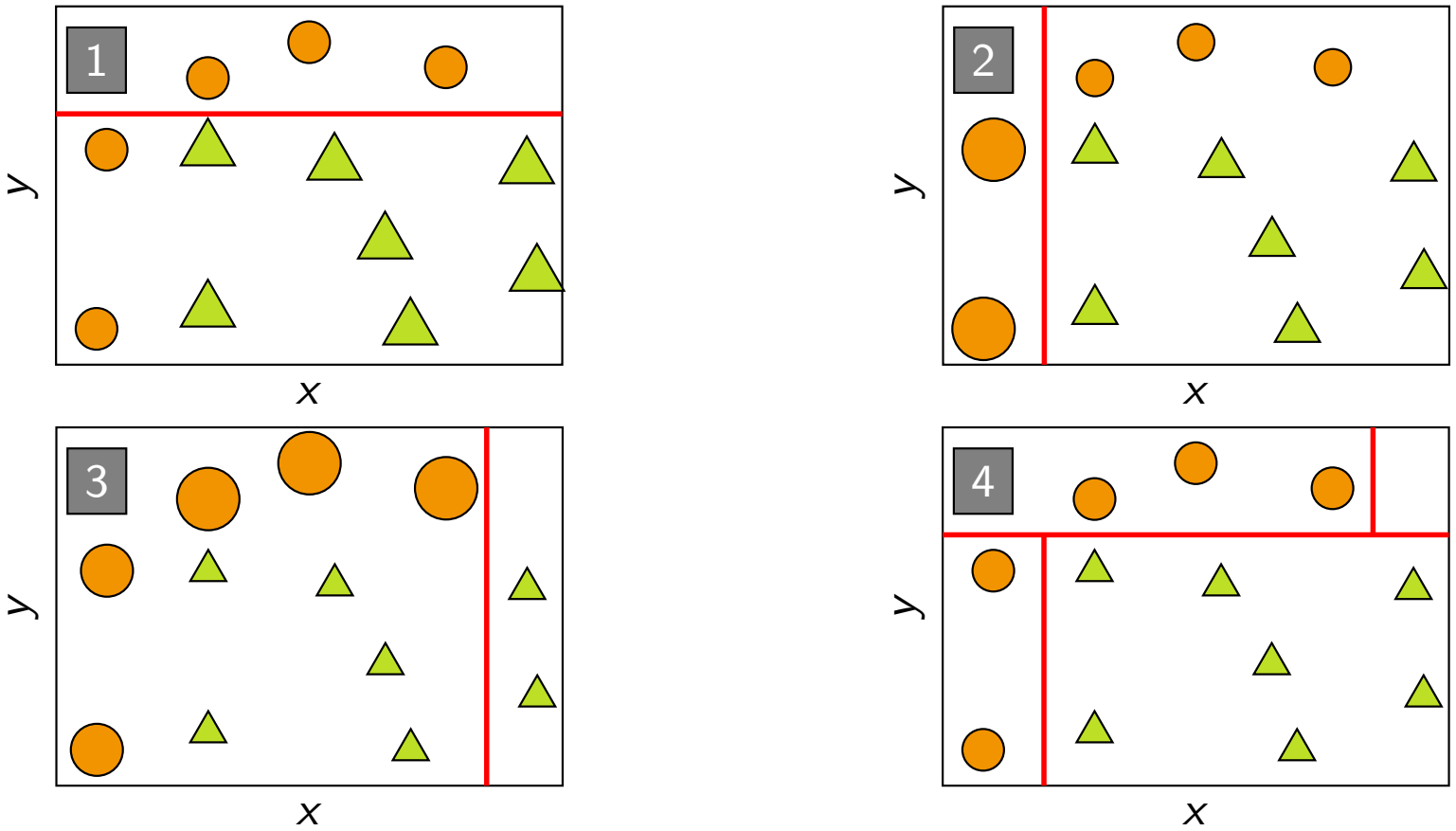
- Bagging: Ein gegebenes Lernverfahren wird **unabhängig** auf verschiedenen Bootstrap-Samples trainiert.
- Boosting: mehrere Klassifikatoren werden **sequenziell** auf der gewichteten Trainingsdatenmenge trainiert.

AdaBoost-Verfahren

- Beim AdaBoost-Verfahren werden die Klassifikatoren des Ensembles erhalten, indem ein schwacher Lerner mehrfach auf den mit Gewichten versehenen Trainingsdatensatz angewendet wird.
- Die Gewichte des Trainingsdatensatzes werden in jedem Schritt basierend auf den Klassifikationsfehlern des vorherigen Schritts neu berechnet.
- Ist $w(\boldsymbol{x}^{(i)})$ das Gewicht des i-ten Trainingsobjekts, dann bedeutet das, dass dieses w-mal zählt. Dies kann beispielsweise durch Resampling der Trainingsdatenmenge erreicht werden, oder indem der Beitrag des Objekts zu einer Fehlermetrik mit $w(\boldsymbol{x}^{(i)})$ gewichtet wird.
- Objekte, die schwierig zu klassifizieren sind bzw. falsch klassifiziert wurden, erhalten im nächsten Schritt ein höheres Gewicht.
- AdaBoost ist typsicherweise robust gegen Overfitting.

Beispiel zum AdaBoost-Verfahren

- Basis-Klassifikator: Decision Tree mit einem Knoten.
- Die ersten drei Abbildungen zeigen die ersten drei Iterationen des AdaBoost-Verfahrens, das vierte den resultierenden Ensemble-Lerner.



AdaBoost - Pseudocode

Pseudocode für ein binäres Klassifikationsproblem mit einem Trainingsdatensatz $\boldsymbol{X} = \{(\boldsymbol{x}^{(1)}, y^{(1)}), \ldots, (\boldsymbol{x}^{(m)}, y^{(m)})\}$ und Labels $y^{(i)} \in \{-1, 1\}$

Algorithm 2 AdaBoost

Sei N die Anzahl der AdaBoost-Iterationen
Seien $\boldsymbol{w}_1 = (w_1^{(1)}, \ldots, w_1^{(m)})$ mit $w_1^{(i)} = \frac{1}{m}$ die Initialgewichte
for $k = 1$ to N **do**
    Trainiere einen schwachen Klassifikator $f_k = f_k(\boldsymbol{X}, \boldsymbol{y}, \boldsymbol{w}_k)$
    Bestimme mit diesem die Labels auf $\boldsymbol{X}$: $\hat{\boldsymbol{y}}_k := \mathit{predict}(f_k, \boldsymbol{X})$
    Berechne den gewichteten Fehler $\varepsilon_k = \sum_{i=1}^{m} w_k^{(i)} \cdot 1_{\hat{y}_k^{(i)} \neq y^{(i)}}$
    Setze $\alpha_k := \frac{1}{2} \log\left(\frac{1-\varepsilon_k}{\varepsilon_k}\right)$
    Update der Gewichte:

$$w_{k+1}^{(i)} := w_k^{(i)} \cdot \begin{cases} e^{-\alpha_k} & \text{falls } \hat{y}^{(i)} = y^{(i)} \\ e^{\alpha_k} & \text{falls } \hat{y}^{(i)} \neq y^{(i)} \end{cases}$$

    Normierung der Gewichte w_{k+1}, sodass $\sum_{i=1}^{m} w_{k+1}^{(i)} = 1$ gilt.
end for
Finale Prognose: $\hat{y}(\boldsymbol{x}_q) = \operatorname{sign}\left(\sum_{k=1}^{N} \alpha_k \cdot \mathit{predict}(f_k, \boldsymbol{x}_q)\right)$

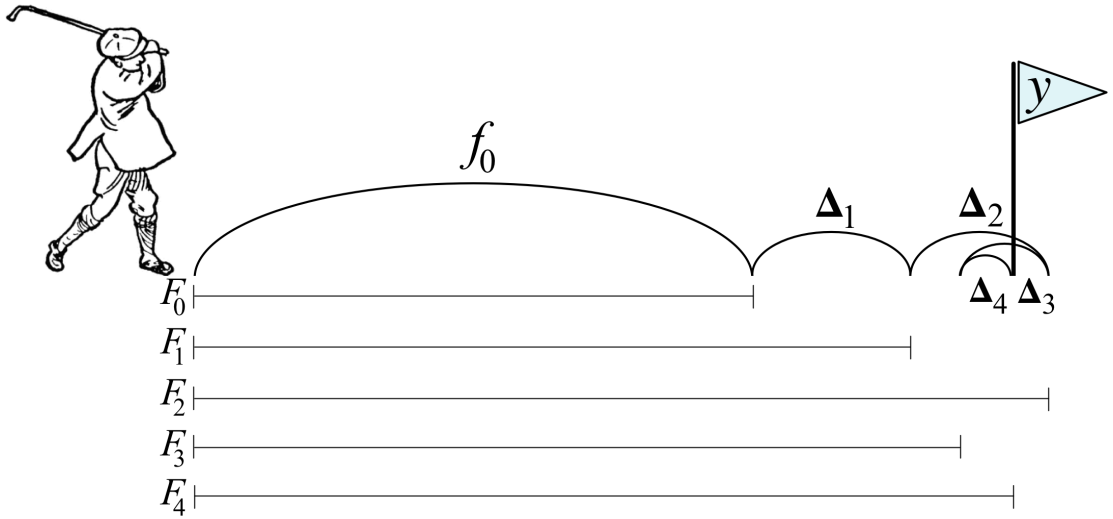
AdaBoost in Scikit-learn

```
from sklearn.ensemble import AdaBoostClassifier
from sklearn.tree import DecisionTreeClassifier
import pandas as pd
import numpy as np

X, y = ... #some labeled training data and labels
clf = AdaBoostClassifier(DecisionTreeClassifier(max_depth=1),
      n_estimators=50)

clf.fit(X, y)
clf.predict(...)
```

Gradient Boosting

Gradient Boosting = Gradient Descent + Boosting

- Ziel ist es, ein Ensemble $f(\boldsymbol{x}) = \sum_{k=1}^{N} h_k(\boldsymbol{x})$ sequenziell zu bestimmen.
- Im Schritt k wird ein (schwaches) Lernverfahren h_k trainiert, das die Fehler des bisher gewonnenen Ensembles kompensieren soll. Dieses wird anschließend zum bisher berechneten Modell (gewichtet) addiert.
- Im Gegensatz zu AdaBoost werden also nicht die Gewichte der Trainingsdaten verändert, sondern Modelle auf den Residuen trainiert.



Quelle: https://explained.ai/gradient-boosting/L2-loss.html

Gradient Boosting - Beispiel

Ostbayerische Technische Hochschule Amberg-Weiden

Gegeben sei ein Trainingsdatensatz bestehend aus drei Objekten

$$(x^{(1)}, y^{(1)}) \ , \ (x^{(2)}, y^{(2)}) \ , \ (x^{(3)}, y^{(3)}) \ .$$

Sei f ein einfaches univariates Regressionsmodell, das auf den Trainingsdaten bestimmt wurde. Im ersten Schritt des Gradient Boosting wird ein Modell h bestimmt, sodass bestenfalls

$$\begin{aligned} f(x^{(1)}) + h(x^{(1)}) &= y^{(1)} \ , \\ f(x^{(2)}) + h(x^{(2)}) &= y^{(2)} \ , \\ f(x^{(3)}) + h(x^{(3)}) &= y^{(3)} \end{aligned}$$

gilt, bzw., äquivalent dazu,

$$\begin{aligned} h(x^{(1)}) &= y^{(1)} - f(x^{(1)}) \ , \\ h(x^{(2)}) &= y^{(2)} - f(x^{(2)}) \ , \\ h(x^{(3)}) &= y^{(3)} - f(x^{(3)}) \ . \end{aligned}$$

Das Modell h verwendet die Residuen als y-Werte. Es wird anschließend zu f addiert. Dieser Schritt wird beim Gradient Boosting mehrfach wiederholt.

Gradient Boosting für die Least-Squares-Regression

- Ist f_k das im k-ten Iterationsschritt berechnete Modell, dann sucht man beim Gradient Boosting ein Regressionsmodell h_k, sodass bestenfalls

$$f_{k+1}(\boldsymbol{x}^{(i)}) := f_k(\boldsymbol{x}^{(i)}) + h_k(\boldsymbol{x}^{(i)}) = y^{(i)} \ , \quad i = 1, \ldots, m \ ,$$

  bzw.

$$h_k(\boldsymbol{x}^{(i)}) = \underbrace{y^{(i)} - f_k(\boldsymbol{x}^{(i)})}_{=:r^{(i)}} \ .$$

- Dazu wird ein Regressionsmodell h_k auf dem **Residuum** trainiert, d.h. auf den Trainingsdaten $(\boldsymbol{x}^{(1)}, r^{(1)}), \ldots, (\boldsymbol{x}^{(m)}, r^{(m)})$.
- Das Residuum $r^{(j)}$ ist die negative partielle Ableitung des Mean Squared Errors

$$MSE(f_k) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{m} (y^{(i)} - f_k(\boldsymbol{x}^{(i)}))^2$$

  nach $f_k(x^{(j)})$. In diesem Sinn lässt sich Gradient Boosting als Gradientenverfahren auffassen. Das Update $f_{k+1} := f_k + h_k$ entspricht einem Schritt des Gradientenverfahrens.

Gradient Boosting

- Gradient Boosting lässt sich als Gradientenverfahren in einem Funktionenraum interpretieren (die Unbekannten und die Updates sind Funktionen).
- Das oben beschriebene Vorgehen lässt sich auf andere Fehlermaße (zusammen mit dem jeweiligen Gradienten) übertragen, um andere Gradient Boosting-Verfahren zu konstruieren.
- Bei Klassifikationsproblemen wird Gradient Boosting häufig mit Decision Trees als schwachen Lernern verwendet, z.B. Decision-Trees mit nur einem Knoten.
- Um Overfitting zu vermeiden, sollte die Anzahl der Schritte begrenzt werden und Regularisierung angewendet werden.

Random Forest

Eigenschaften von Random Forests

- Random Forests sind für Klassifikation und Regression gleichermaßen geeignet.
- Sie sind in der Lage, nichtlineare Beziehungen zu modellieren.
- Sie liefern oft schon bei kleinen Datensätze gute Ergebnisse und sind in der Lage, mit hochdimensionalen Daten und korrelierten Features umzugehen.
- Das Modelltraining ist parallelisierbar.
- Random Forests benötigen wenig Tuning.
- Sie liefern eine **Feature Importance** und können damit auch zur Feature Selection verwendet werden.

Random Forest

Random Forests als Ensemble Lerner

- Kombiniere mehrere Decision Trees zu einem „forest“.
- Aggregation der Ergebnisse z.B. durch Mittelung (Regression) oder Majority Voting (Klassifikation).
- Erzeuge die einzelnen Bäume durch
  1. Bootstrap Sampling zum Training eines einzelnen Baums
  2. Auswahl einer zufälligen Teilmenge der Features in jedem Knoten eines jeden Baums
  3. Verzicht auf Pruning
- Die resultierenden Bäume sind weniger stark korreliert als beim reinen Bagging.
- Das Modelltraining und die Klassifikation können parallel erfolgen.

Feature Importance bei Random Forest

- Random Forests liefern auch eine Gewichtung („importance“) der Features.
- Dabei wird jedem Feature X_j die mittlere Reduktion des Maßes für die Unreinheit (z.B. Entropie, Gini-Index) zugeordnet, die erzielt wurde, wenn X_j als Split-Variable verwendet wurde (gewichtet mit der Anzahl an Samples, die den Knoten erreicht haben):

Mean Decrease in Impurity (MDI)

$$\text{Importance}(X_j) = \frac{1}{N_T} \sum_{T} \sum_{\substack{t \in T \,: \\ v(s_t) = X_j}} p(t) \Delta i(s_t, t) \ ,$$

- Notation:

T:	Entscheidungsbaum
$t \in T$:	Knoten des Baums T
N_T:	Anzahl der Bäume des Random Forests
$\Delta i(\cdot)$:	Reduktion des Impurity Measures
$p(t)$:	Anteil der Daten, der den Knoten t erreicht
$v(s_t)$:	Variable, die im Split s_t verwendet wird ist.

Vor- und Nachteile von Random Forest

Vorteile

- Gute Vorhersagekraft
- Wenig Tuning erforderlich
- Robustheit gegen Overfitting
- keine Skalierung der Daten notwendig
- Feature-Importance wird mitgeliefert
- Parallelisierbarkeit

Nachteile

- Höherer Rechenaufwand als bei Decision Trees
- Geringere Interpretierbarkeit

Zusammenfassung

- Beim Ensemble-Lernern werden mehrere Basis-Klassifikatoren kombiniert, um die Qualität der Vorhersage zu verbessern.
- Um dieses Ziel zu erreichen, sollten die Basis-Klassifikatoren akkurat und divers sein.
- Diverse Basis-Klassfikationen können durch verschiedene Strategien gewonnen werden, z.B. zufällige Variation der Trainingsdaten (Bagging) oder der Modellparameter oder der Features.
- Bagging: Variation der Trainingsdaten durch Bootstrap-Sampling
- Beispiel für Bagging: Random Forest
- Boosting: Sequentielle Generierung und additive Kombination mehrerer schwacher Lerner
- Beispiele für Boosting: AdaBoost und Gradient Boosting