

7장 앙상블 학습과 랜덤포레스트

감사의 글

자료를 공개한 저자 오렐리앙 제롱과 강의자료를 지원한 한빛아카데미에게 진심어린 감사를 전합니다.

주요 내용

- 앙상블 학습이란?
- 배깅
 - 페이스팅
 - 랜덤 패치 / 랜덤 서브스페이스
 - 랜덤포레스트
- 부스팅
- 스택킹

앙상블 학습이란?

- 여러 개 모델의 예측값을 조합하여 일반화 성능이 좋은 보다 강력한 모델을 구현하며, 대표적으로 평균화 기법과 부스팅 기법이 사용된다.
- 평균화 기법: 독립적으로 학습된 예측기 여러 개의 예측값들의 평균값을 예측값으로 사용하여 분산이 줄어든 모델을 구현한다.
 - 예제: 배깅(Bagging) 기법, 랜덤 포레스트(Random Forest) 등
- 부스팅 기법: 예측기 여러 개를 순차적으로 쌓아 예측값의 편향을 줄인 모델을 구현한다.
 - 예제: 에이다 부스트(AdaBoost), 그레이디언트 부스팅(Gradient Tree Boosting) 등

편향과 분산

- 앙상블 학습의 핵심: 편향과 분산 줄이기
- 편향: 예측값과 정답이 떨어져 있는 정도. 정답에 대한 잘못된 가정으로 발생하며, 편향이 크면 과소적합 발생.
- 분산: 샘플의 작은 변동에 반응하는 정도. 정답에 대한 너무 복잡한 모델을 설정하는 경우 발생할 수 있으며, 분산이 크면 과대적합 발생.

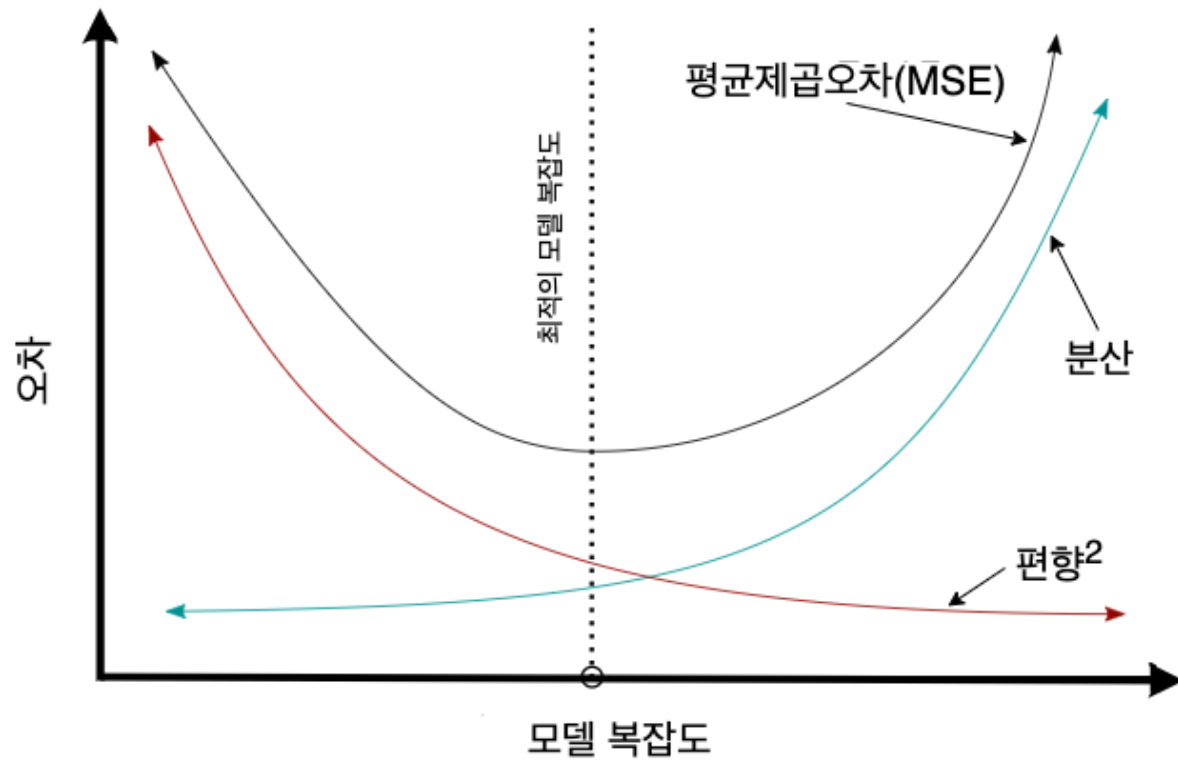
편향과 분산의 트레이드오프

- 편향과 분산의 트레이드오프: 편향과 분산을 동시에 좋아지게 할 수는 없음.
- 예제: 훈련 세트 크기
 - 훈련 세트 작게: 편향은 커지고, 분산은 작아짐.
 - 훈련 세트 크게: 편향은 작아지고, 분산은 커짐.
- 예제: 특성 개수
 - 특성 개수 작게: 편향은 커지고, 분산은 작아짐.
 - 특성 개수 크게: 편향은 작아지고, 분산은 커짐.

모델 복잡도, 편향, 분산의 관계

- 회귀모델의 평균제곱오차는 편향의 제곱과 분산의 합으로 근사됨.

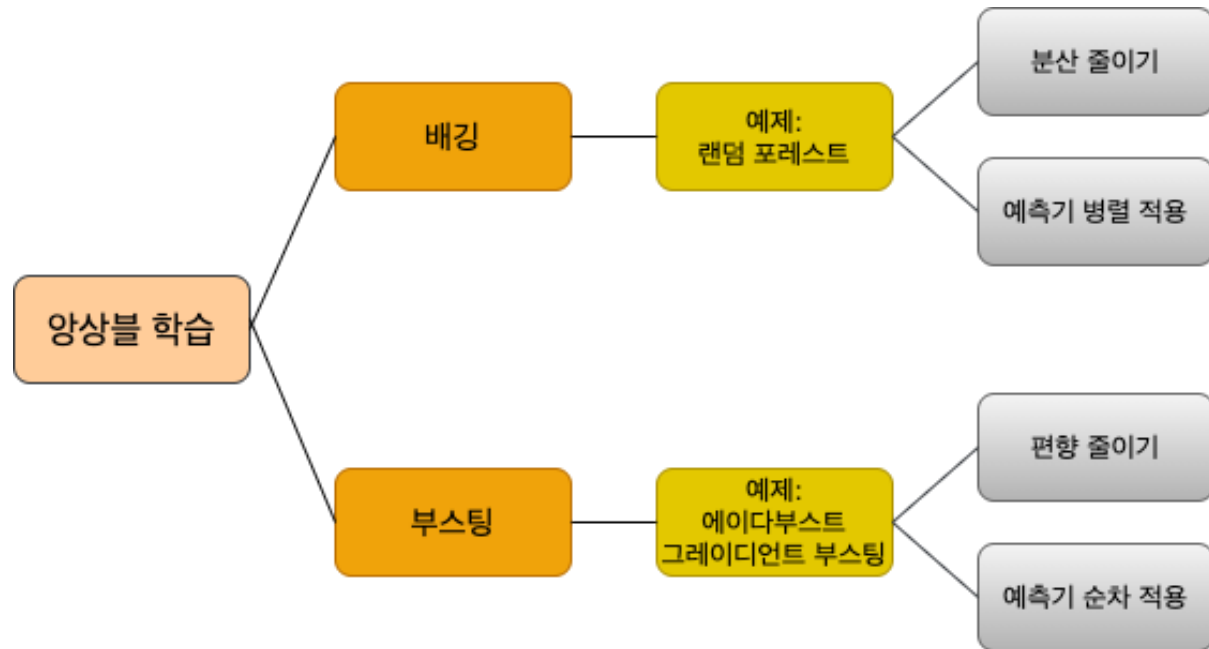
$$\text{평균제곱오차} \approx \text{편향}^2 + \text{분산}$$

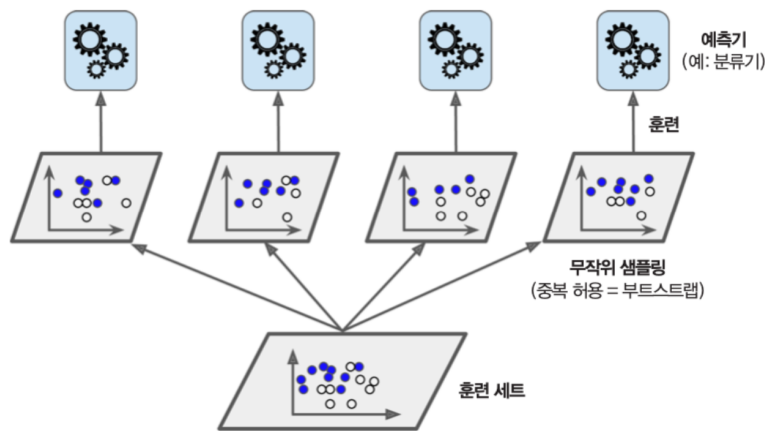


<위키백과: 편향-분산 트레이드오프>

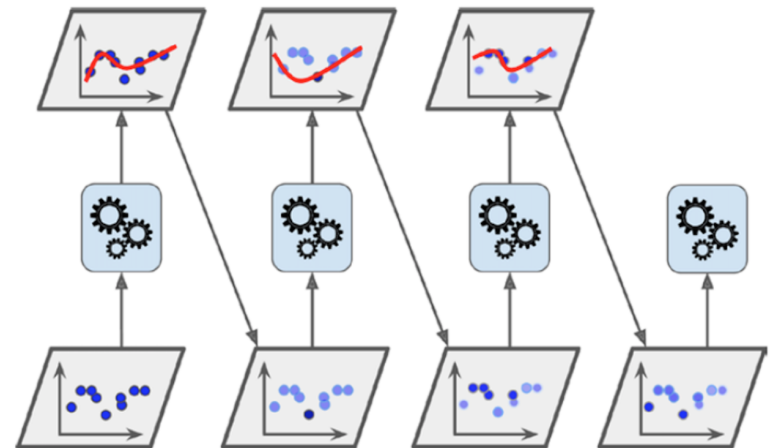
배깅 vs. 부스팅

- 편향 또는 분산을 줄이기 위한 앙상블 학습의 주요 두 기법: 배깅과 부스팅





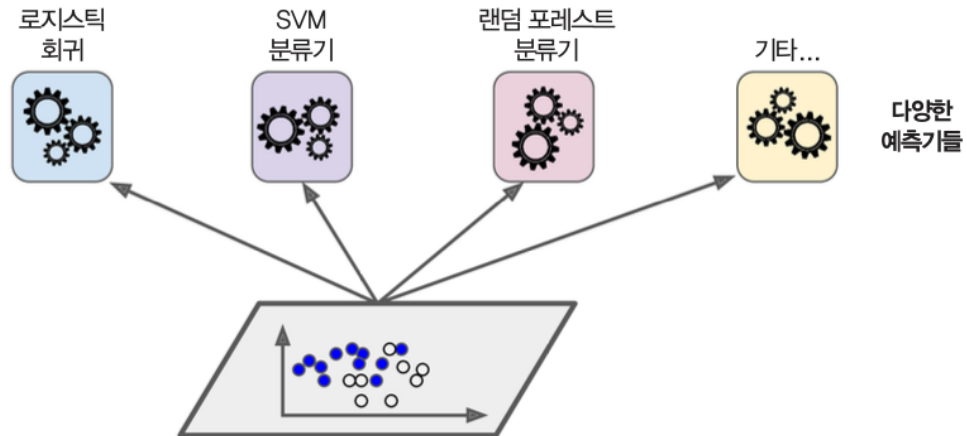
배깅



부스팅

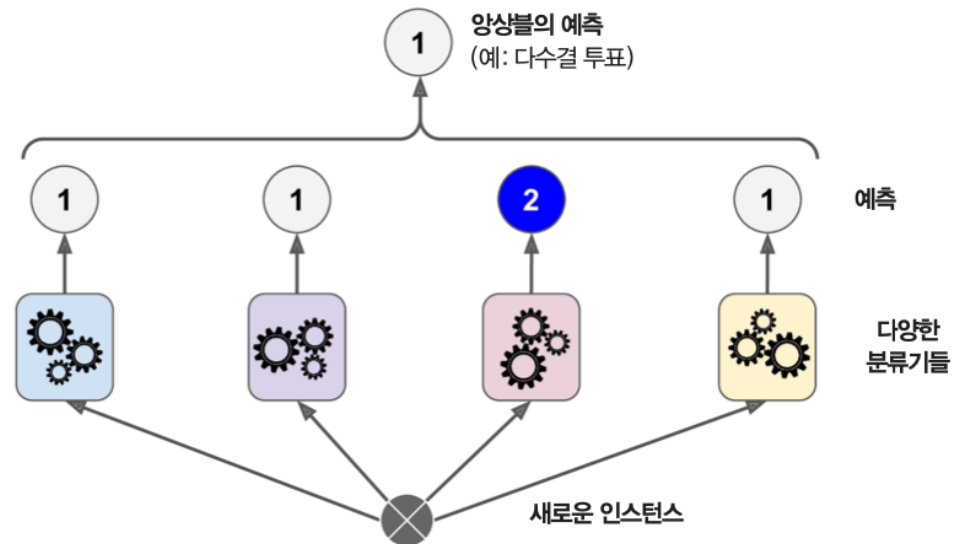
7.1 투표식 분류기

- 동일한 훈련 세트에 대해 여러 종류의 분류기 이용한 앙상블 학습 적용 후 직접 또는 간접 투표를 통해 예측값 결정.



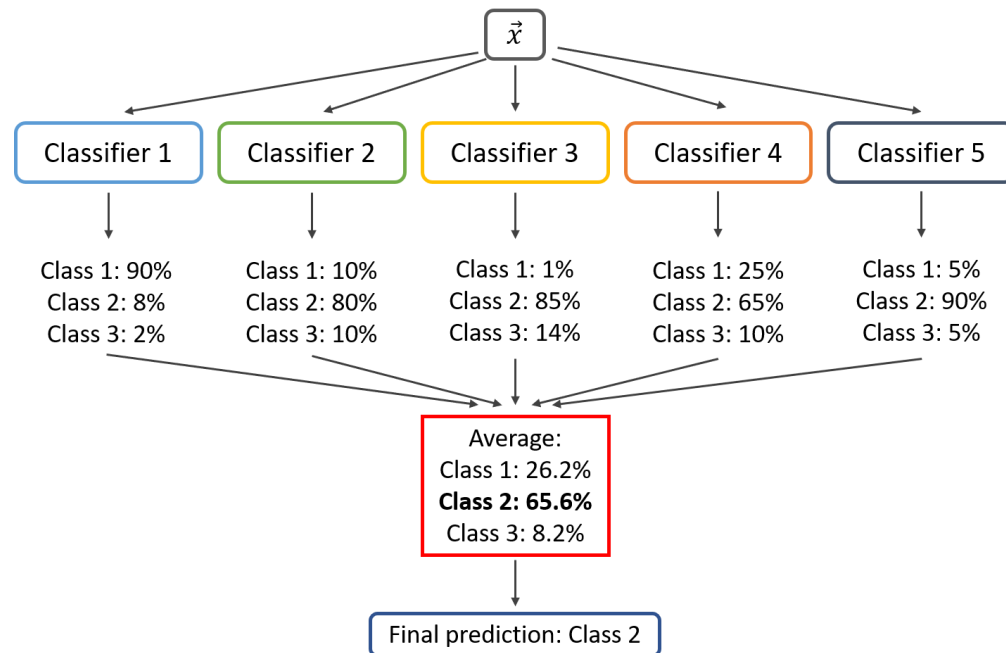
직접투표

- 앙상블에 포함된 예측기들의 예측값들의 다수로 결정



간접투표

- 앙상블에 포함된 예측기들의 예측한 확률값들의 평균값으로 예측값 결정
- 전제: 모든 예측기가 `predict_proba()` 메서드와 같은 확률 예측 기능을 지원해야 함.
- 높은 확률에 보다 비중을 두기 때문에 직접투표 방식보다 성능 좀 더 좋음.



<그림출처: [kaggle](https://www.kaggle.com)>

투표식 분류기의 확률적 근거

이항분포의 누적분포함수를 이용하여 앙상블 학습의 성능이 향상되는 이유를 설명할 수 있음.

- p : 예측기 하나의 성능
- n : 예측기 개수
- 반환값: 다수결을 따를 때 성공할 확률, 즉 다수결 의견이 보다 정확할 확률. 이항 분포의 누적분포 함수 활용.

In [1]:

```
from scipy.stats import binom

def ensemble_win_proba(n, p):
    """
    p: 예측기 하나의 성능
    n: 앙상블 크기, 즉 예측기 개수
    반환값: 다수결을 따를 때 성공할 확률. 이항 분포의 누적분포함수 활용.
    """
    return 1 - binom.cdf(int(n*0.4999), n, p)
```

적중률 51% 모델 1,000개의 다수결을 따르면 74.7% 정도의 적중률 나옴.

```
In [2]: ensemble_win_proba(1000, 0.51)
```

```
Out[2]: 0.7467502275561786
```

적중률 51% 모델 10,000개의 다수결을 따르면 97.8% 정도의 적중률 나옴.

```
In [3]: ensemble_win_proba(10000, 0.51)
```

```
Out[3]: 0.9777976478701533
```

적중률 80% 모델 10개의 다수결을 따르면 100%에 가까운 성능이 가능함.

```
In [4]: ensemble_win_proba(10, 0.8)
```

```
Out[4]: 0.9936306176
```

- **주의사항:** 앙상블 학습에 포함된 각각의 모델이 서로 독립인 것을 전제로한 결과임.
- 동일한 데이터를 사용할 경우 독립성이 보장되지 않으며, 경우에 따라 성능이 하락할 수 있음.
- 독립성을 높이기 위해 매우 다른 알고리즘을 사용하는 여러 모델을 사용해야 함.

투표식 분류기 예제

- 사이킷런의 투표식 분류기
- `VotingClassifier`: 투표식 분류기 모델 제공

- 예제

```
log_clf = LogisticRegression(solver="lbfgs", random_state=42)
rnd_clf = RandomForestClassifier(n_estimators=100, random_state=42)
svm_clf = SVC(gamma="scale", random_state=42)

# 투표식 분류기: 직접 투표
voting_clf = VotingClassifier(
    estimators=[('lr', log_clf), ('rf', rnd_clf), ('svc', svm_clf)],
    voting='hard')
```

- `voting='hard'` : 직접 투표 방식 지정 하이퍼 파라미터
- `voting='soft'` : 간접 투표 방식 지정 하이퍼 파라미터
 - 주의: `SVC` 모델 지정할 때 `probability=True` 사용해야 `predict_proba()` 메서드 지원됨.

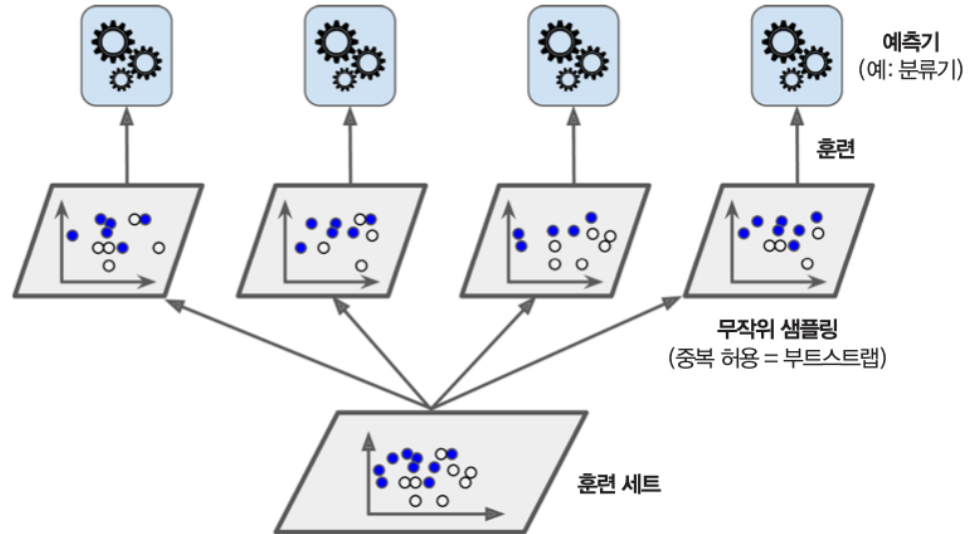
7.2 배깅/페이스팅

정의

- 여러 개의 동일 모델을 훈련 세트의 다양한 부분집합을 대상으로 학습시키는 방식
- 부분집합을 임의로 선택할 때 중복 허용 여부에 따라 앙상블 학습 방식이 달라짐
 - 배깅: 중복 허용 샘플링
 - 페이스팅: 중복 미허용 샘플링

배깅

- 배깅(bagging): bootstrap aggregation의 줄임말
- 통계 분야에서 **부트스트래핑**, 즉, 중복허용 리샘플링으로 불림



배깅/페이스팅 예측 방식

- 분류 모델: 직접 투표 방식 사용. 즉, 수집된 예측값들 중에서 최빈값(mode) 선택
- 회귀 모델: 수집된 예측값들의 평균값 선택

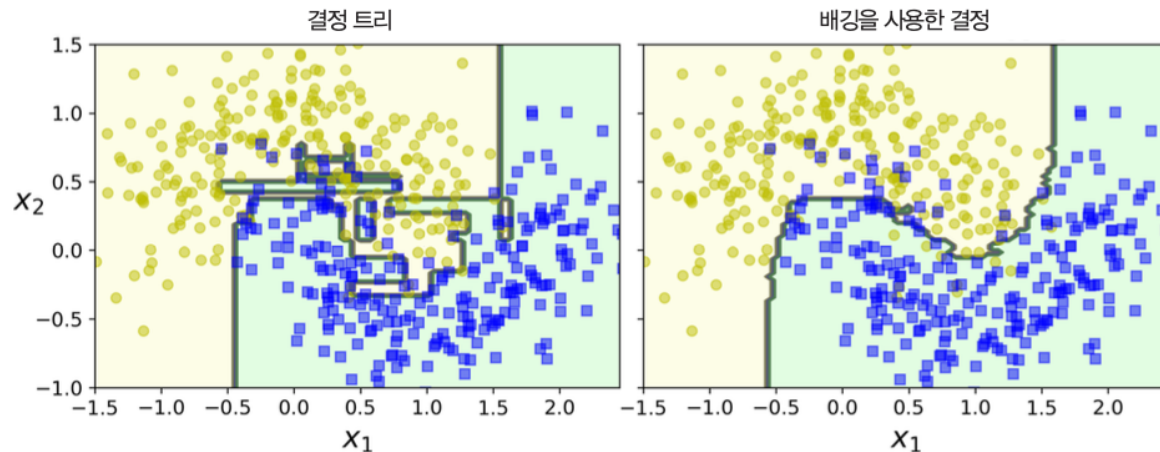
앙상블 학습의 편향과 분산

- 개별 예측기의 경우에 비해 편향은 조금 커지거나 거의 비슷하지만 분산은 줄어듦. 배깅이 표본 샘플링의 다양성을 보다 많이 추가하기 때문임. 배깅이 과대적합의 위험성일 보다 줄어주며, 따라서 배깅 방식이 기본으로 사용됨.
- 개별 예측기: 배깅/페이스팅 방식으로 학습하면 전체 훈련 세트를 대상으로 학습한 경우에 비해 편향이 커짐. 따라서 과소적합 위험성 커짐.
- 참고: [Single estimator versus bagging: bias-variance decomposition](#)

예제: 사이킷런의 배깅/페이스팅

- 훈련세트(`X_train`) 크기: 500
- `n_estimators=500` : 결정트리 500개 사용
- `max_samples=100` : 각 예측기가 100개 샘플 사용. 기본값은 1.0, 즉 전체 훈련 샘플 선택
- `bootstrap=True` : 배깅 방식 사용(기본값). `False` 면 페이스팅 방식 사용.
- `n_jobs=-1` : 모든 사용가능한 cpu 사용하여 훈련을 병렬처리함. 양의 정수일 경우 정해진 수의 cpu 사용.

```
bag_clf = BaggingClassifier(DecisionTreeClassifier(random_state=42),  
                             n_estimators=500, max_samples=100,  
                             bootstrap=True, n_jobs=-1, random_state=42)
```



oob 평가

- oob(out-of-bag) 샘플: 배깅 모델에 포함된 예측기로부터 선택되지 않은 훈련 샘플. 평균적으로 훈련 세트의 약 37% 정도.
- 각 예측기가 oob 샘플을 성능 검증에 활용.
- 앙상블 모델 자체의 성능 검증은 각 예측기의 oob 검증결과의 평균값 활용

앙상블 모델의 검증과 테스트

- `BaggingClassifier` 의 `oob_score=True` 옵션
 - 훈련 종료 후 oob 평가 자동 실행
 - 평가점수는 `oob_score_` 속성에 저장됨.
 - 테스트세트에 대한 정확도와 비슷한 결과가 나옴.

[illegible]

7.3 랜덤 패치와 랜덤 서브스페이스

- `BaggingClassifier`는 특성에 대한 샘플링 기능도 지원: `max_features` 와 `bootstrap_features`
- 이미지 등 매우 높은 차원의 데이터셋을 다룰 때 유용
- 더 다양한 예측기를 만들며, 편향이 커지지만 분산은 낮아짐

max_features

- 학습에 사용할 특성 수 지정
- 특성 선택은 무작위
 - 정수인 경우: 지정된 수만큼 특성 선택
 - 부동소수점($\in [0, 1]$)인 경우: 지정된 비율만큼 특성 선택
- max_samples와 유사 기능 수행

bootstrap_features

- 학습에 사용할 특성을 선택할 때 중복 허용 여부 지정
- 기본값은 False. 즉, 중복 허용하지 않음.
- bootstrap과 유사 기능 수행

랜덤 패치 기법

- 훈련 샘플과 훈련 특성 모두를 대상으로 중복을 허용하며 임의의 샘플 수와 임의의 특성 수만큼 샘플링해서 학습하는 기법

랜덤 서브스페이스 기법

- 전체 훈련 세트를 학습 대상으로 삼지만 훈련 특성은 임의의 특성 수만큼 샘플링해서 학습하는 기법

랜덤포레스트 하이퍼파라미터

- `BaggingClassifier`와 `DecisionTreeClassifier`의 옵션을 거의 모두 가짐. 예외는 다음과 같음.
 - `DecisionTreeClassifier`의 옵션 중: `splitter='random'`, `presort=False`, `max_samples=1.0`
 - `BaggingClassifier`의 옵션 중:
`base_estimator=DecisionClassifier(...)`
- `splitter='random'` 옵션: 특성 일부를 무작위적으로 선택한 후 최적의 임계값 선택
- `max_features='auto'`가 `RandomForestClassifier`의 기본값임. 따라서 특성 선택에 무작위성 사용됨.
 - 선택되는 특성 수: 약 $\sqrt{\text{전체 특성 수}}$
- 결정트리에 비해 편향은 크게, 분산은 낮게.

엑스트라 트리

- 익스트림 랜덤 트리(**extremely randomized tree**) 앙상블 이라고도 불림.
- 무작위로 선택된 일부 특성에 대해 특성 임계값도 무작위로 몇 개 선택한 후 그중에서 최적 선택
- 일반적인 랜덤포레스트보다 속도가 훨씬 빠름
- 이 방식을 사용하면 편향은 늘고, 분산은 줄어듦
- 참고: [ExtraTreeClassifier](#) 클래스 정의

예제

```
extra_clf = ExtraTreesClassifier(n_estimators=500,  
                                max_leaf_nodes=16,  
                                n_jobs=-1,  
                                random_state=42)
```

특성 중요도

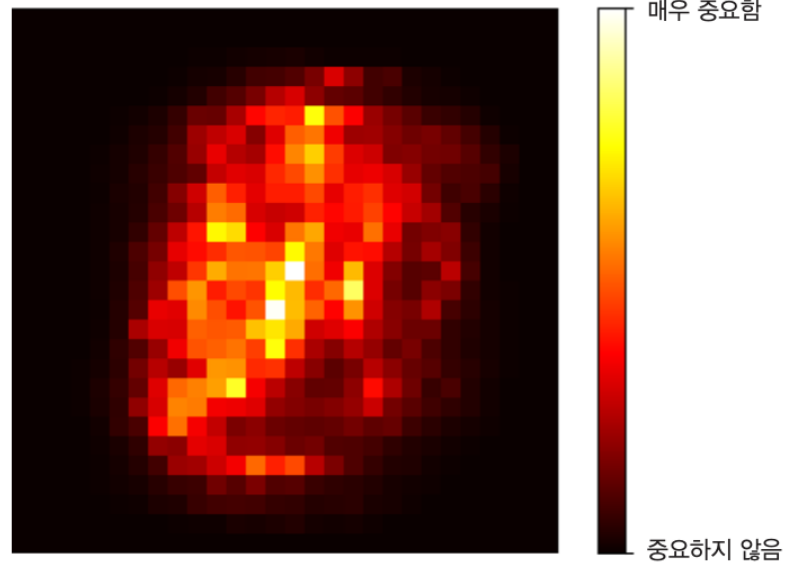
- 특성 중요도: 해당 특성을 사용한 마디가 평균적으로 불순도를 얼마나 감소시키는지 측정
 - 즉, 불순도를 많이 줄이면 그만큼 중요도가 커짐
- 사이킷런의 `RandomForestClassifier`
 - 특성별 상대적 중요도를 측정해서 중요도의 전체 합이 10이 되도록 함.
 - `feature_importances_` 속성에 저장됨.

예제: 붓꽃 데이터셋

특성	중요도(%)
꽃잎 길이	44.1
꽃잎 너비	42.3
꽃받침 길이	11.3
꽃받침 너비	2.3

예제: MNIST

아래 이미지는 각 픽셀의 중요도를 보여준다.

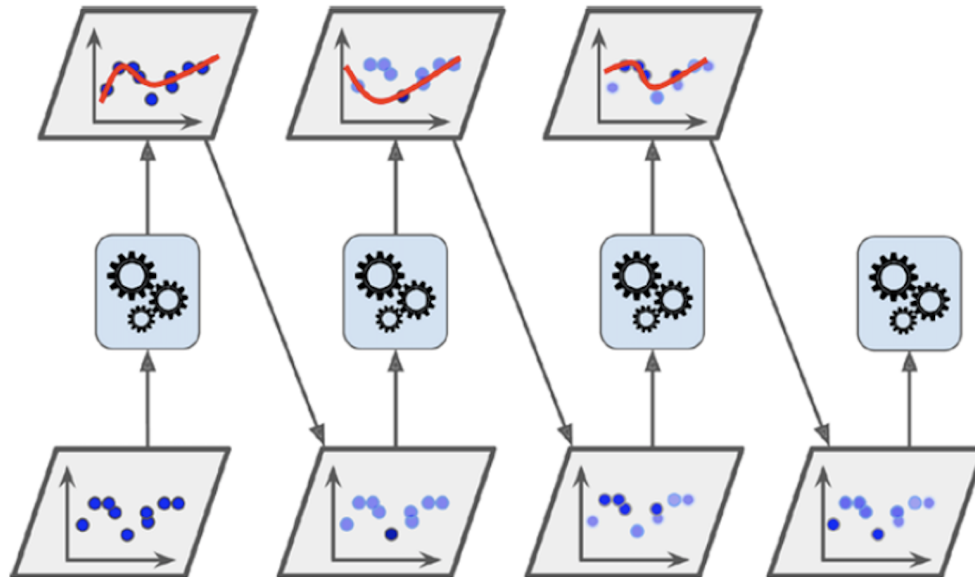


7.5 부스팅

- 부스팅(boosting): 성능이 약한 학습기의 여러 개를 선형으로 연결하여 강한 성능의 학습기를 만드는 앙상블 기법. 대표적 알고리즘은 다음과 같음.
 - 에이다부스트(AdaBoost)
 - 그레이디언트 부스팅(Gradient Boosting)
- 순차적으로 이전 학습기의 결과를 바탕으로 성능을 조금씩 높여감. 즉, 편향을 줄여나감.
- 성능이 약한 예측기의 단점을 보완하여 좋은 성능의 예측기를 훈련해 나가는 것이 부스팅의 기본 아이디어
- 순차적으로 학습하기에 배깅/페이스팅에 비해 확장성이 떨어짐

에이다부스트(AdaBoost)

- 좀 더 나은 예측기를 생성하기 위해 잘못 적용된 가중치를 조정하여 새로운 예측기를 추가하는 앙상블 기법. 이전 모델이 제대로 학습하지 못한, 즉 과소적합했던 샘플들에 대한 가중치를 더 높이는 방식으로 새로운 모델 생성.
- 새로운 예측기는 학습하기 어려운 샘플에 조금씩 더 잘 적응하는 모델이 연속적으로 만들어져 감.

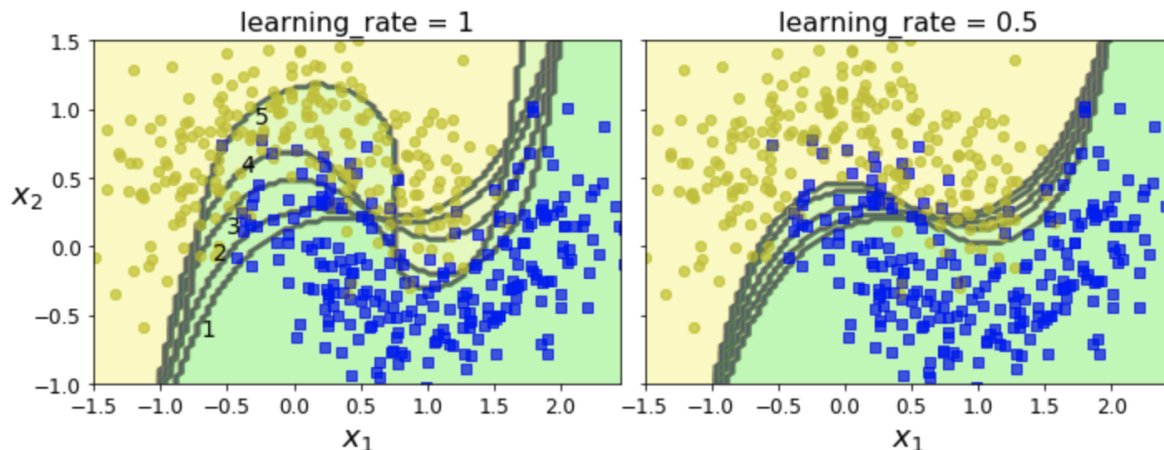


샘플 가중치

- 훈련중에 특정 샘플을 보다 강조하도록 유도하는 가중치를 가리킴.
- 사이킷런 모델의 `fit()` 메서드는 `sample_weight` 옵션인자를 추가로 사용하여 훈련 세트의 각 샘플에 대한 가중치를 지정할 수 있음.
- 샘플 가중치는 모든 샘플에 대해 주어져며, `sample_weight` 옵션인자를 이용하여 각 샘플에 대한 가중치를 결정함.
- `sample_weight` 옵션인자를 지정하지 않으면 모든 샘플의 가중치를 동일하게 간주함.
- 참고: [SVC의 `fit\(\)` 메서드 정의](#)

에이다부스트 알고리즘 작동 과정

- moons 데이터셋에 rbf 커널을 사용하는 SVC 모델을 5번 연속 새로 생성하는 방식으로 학습한 결과를 보여줌.
- 새로운 예측기의 `fit()` 메서드는 이전 예측기의 경우와 다른 `sample_weight` 옵션값을 사용함.
- 새로운 예측기는 이전의 예측기의 예측값이 틀린 샘플을 보다 강조하도록 유도됨.
- 왼편과 오른편은 학습률만 다름.
 - **주의사항:** `learnign_rate` 는 기존에 설명한 학습률과 다른 의미이며, 각 예측기의 기여도 조절에 사용됨.



사이키런의 에이다부스트

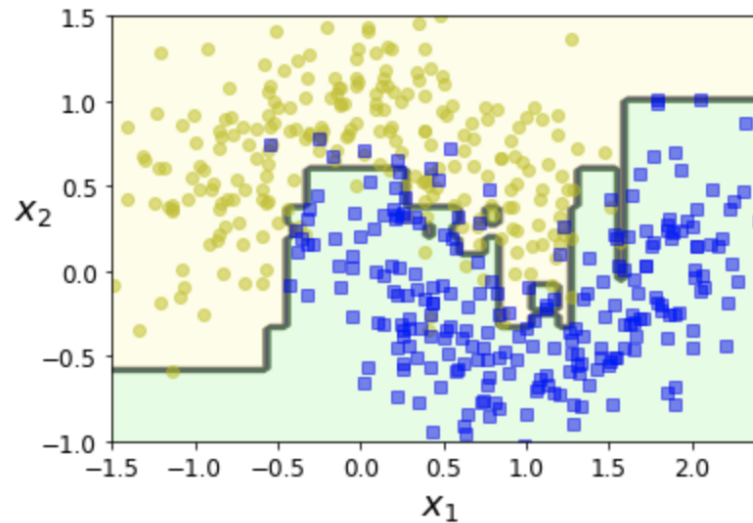
- 분류 모델: AdaBoostClassifier
- 회귀 모델: AdaBoostRegressor

예제: 에이다부스트 + 결정트리

- `AdaBoostClassifier` 의 기본 모델임.

```
ada_clf = AdaBoostClassifier(DecisionTreeClassifier(max_depth=1),  
                             n_estimators=200, algorithm="SAMME.R",  
                             learning_rate=0.5, random_state=42)
```

- 훈련 세트: moons 데이터셋



그레이디언트 부스팅

- 이전 학습기에 의한 오차를 보정하도록 새로운 예측기를 순차적으로 추가하는 아이디어는 에이다 부스트와 동일
- 샘플의 가중치를 수정하는 대신 이전 예측기가 만든 잔차(residual error)에 대해 새로운 예측기를 학습시킴
- 잔차(residual error): 예측값과 실제값 사이의 오차

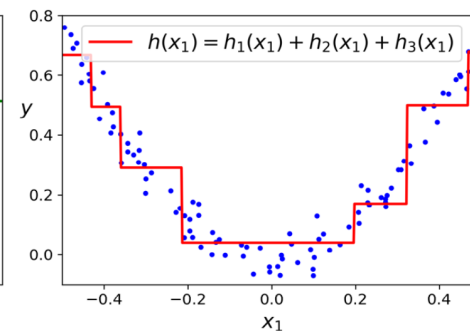
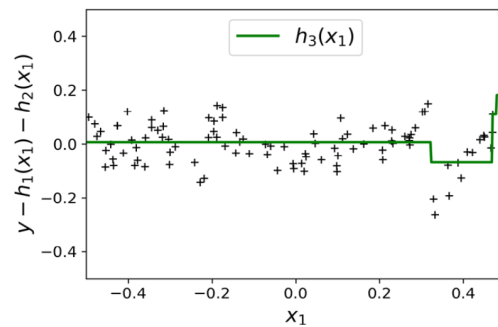
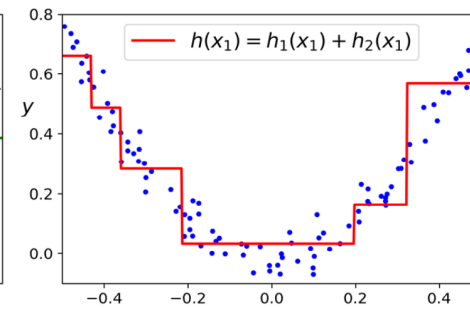
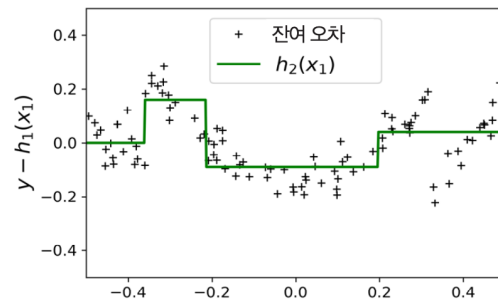
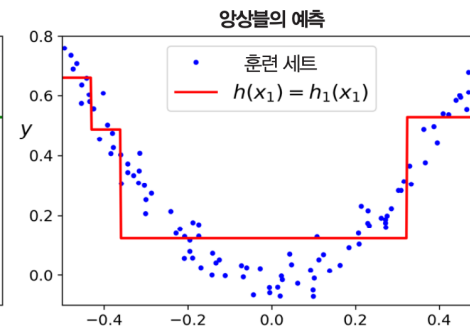
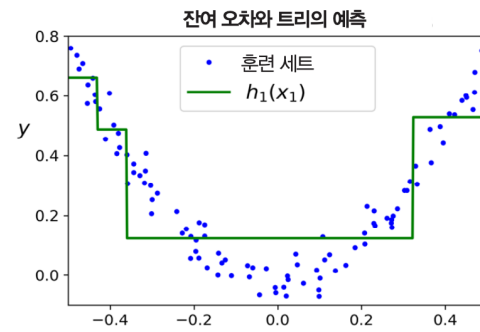
사이킷런 그레이디언트 부스팅 모델

- 분류 모델: `GradientBoostingClassifier`
 - `RandomForestClassifier` 와 비슷한 하이퍼파라미터를 제공
- 회귀 모델: `GradientBoostingRegressor`
 - `RandomForestRegressor` 와 비슷한 하이퍼파라미터를 제공

그레이디언트 부스티드 회귀 나무(GBRT) 예제: 그레이디언트 부스팅 (회귀)+ 결정트리

- 2차 다항식 데이터셋에 결정트리 3개를 적용한 효과와 동일하게 작동

```
gbrt = GradientBoostingRegressor(max_depth=2,  
                                  n_estimators=3,  
                                  learning_rate=1.0)
```

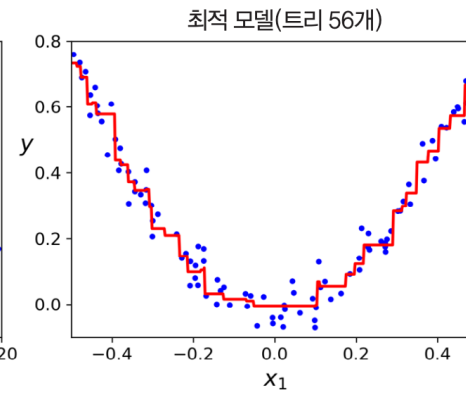
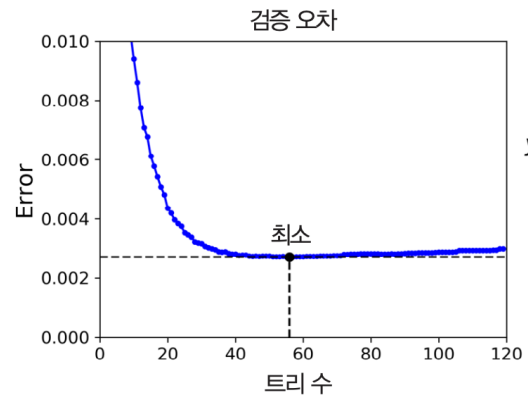


learning_rate (학습률)

- `learnign_rate` 는 기존에 설명한 학습률과 다른 의미의 학습률.
 - 각 결정트리의 기여도 조절에 사용
- 수축(shrinkage) 규제: 학습률을 낮게 정하면 많은 수의 결정트리 필요하지만 성능 좋아짐.
- 이전 결정트리에서 학습된 값을 전달할 때 사용되는 비율
 - 1.0이면 그대로 전달
 - 1.0보다 작으면 해당 비율 만큼 조금만 전달

최적의 결정트리 수 확인법

- 조기종료 기법 활용



확률적 그레이디언트 부스팅

- 각 결정트리가 훈련에 사용할 훈련 샘플의 비율을 지정하여 학습: `subsample=0.25` 등 비율 지정
- 훈련 속도 빨라짐.
- 편향 높아지지만, 분산 낮아짐.

XGBoost

- Extreme Gradient Boosting의 줄임말.
- 빠른 속도, 확장성, 이식성 뛰어남.
- 조기종료 등 다양한 기능 제공.

```
import xgboost
xgb_reg = xgboost.XGBRegressor(random_state=42)
xgb_reg.fit(X_train, y_train,
            eval_set=[(X_val, y_val)],
            early_stopping_rounds=2)
```

7.6 스택킹

- 스택킹 아이디어는 간단하지만, 여기서 설명은 생략함.
- 주피터 노트북 참조.
- 참고:
 - [Stacked generalization](#)