Machine Learning

11장 Ensemble Learning

고려대학교 통계학과 박유성



- **01** Ensemble Learning
- 02 Bagging, Pasting, 그리고
 - Random forest
- **03** Boosting
- **04** Gradient Boosting method의 해석

01 Ensemble Learning

- 앙상블 학습은 지금까지 배운 많은 종류의 분류기법(classifier)과 회귀기법 (regression)들의 모임이며 이 기법들을 이용하여 예측 성능을 높이는 머신러닝을 말함.
- 많은 경우 분류기법에 다양하게 사용되기 때문에 분류를 중심으로 설명하겠음.

ll장 Ensemble Learning 3/30

투표분류기법(Voting classifier)

- 가장 쉬운 앙상블 학습임.
- 2개 이상의 분류기법들을 동일한 데이터에 각각 적합 시킨 후 이를 이용해 새로운 자료에 대한 범주를 예측함.
 - 1) 범주를 예측하여 <mark>빈도가 가장 높은</mark> 범주로 할당
 - → Hard voting
 - 2) 범주에 속할 확률을 예측하여 이 <mark>평균 확률이 가장 큰</mark> 범주로 할당
 - → Soft voting
- 이러한 앙상블기법은 이용되는 분류기법들이 개념적으로 독립적인 경우에 효과가 높음.

비장 Ensemble Learning 4/30

02 Bagging, Pasting, 그리고 Random forest

- 앙상블기법은 대수의 법칙(Law of large number, LLN)에 기초함. 즉, 독립적인 분류기법이 많으면 분류의 정밀도가 높아진다는 의미임.
- 그러나 현재까지 개발된 분류기법의 종류가 LLN을 적용할 만큼 많지는 않고
 서로 간에 독립인지 검정도 할 수 없음.
 - → 적은 수의 분류기법을 사용하되 학습 데이터를 늘림.
 - 1) Bagging (Bootstrap aggregating)
 - 2) Pasting
 - 3) Random forest

11장 Ensemble Learning 5/30

Bagging과 Pasting

- 학습 데이터의 크기가 n이라면 이 학습 데이터에서 크기가 n개의 표본을 뽑아 M개의 새로운 학습 데이터를 생성함.
 - 1) with replacement \rightarrow Bagging
 - 2) without replacement → Pasting
- 분류를 할 때는 hard voting 또는 soft voting을 이용하여 분류함. 회귀를 할 때는 각 특성변수 별로 예측된 값들을 평균해 예측 값으로 함.
- 일반적으로 bagging을 주로 사용함.
- Bagging을 할 경우 새로운 학습 데이터에 포함 되지 않는 데이터가 존재할수 있는데 이 뽑히지 않은 데이터를 out-of-bag (oob)라고 함. Oob는 검증데이터로 이용할 수 있음.

ll장 Ensemble Learning 6/30

Bagging과 Pasting

- 예를 들어 목표변수를 2개의 범주로 분류하고자 하며 3가지 분류기법을 이용하고 M =100이라면
 - 1) 3가지 분류기법을 이용해 각각 100번의 예측 값을 산출. 즉, 시험데이터에 대하여 총 300번의 예측을 하게 됨.
 - 2) 분류일 경우

hard voting: 300번의 할당 중 가장 많이 할당된 값이 예측 값

soft voting: 300번의 예측 확률을 평균을 내어 가장 큰 평균 값을 갖는 범주가 예측 값.

회귀일 경우

300개의 목표변수 예측 값의 평균이 예측 값.

11장 Ensemble Learning 7/30

Random forest

- 의사결정나무의 bagging 버전임.
- 분석 절차
 - 크기가 n이고 d개의 특성변수를 가진 원래의 학습 데이터를 이용할 경우
 - n 1) n 개의 확률 붓스트랩 표본을 뽑아 새로운 학습 데이터를 생성함.
 - 2) 새로운 학습 데이터를 이용해 각 노드마다 d개의 특성변수 중 임의로 k개의 특성변수를 뽑은 후 이 k개의 변수에 대해서 일반적인 의사결정나무를 완성함.
 - 3) 절차 1-2를 *M* 번 반복함.
 - 4) M개의 의사결정나무 결과에 의해 분류일 경우에는 voting, 회귀일 경우에 평균을 취하여 예측 값으로 함.
- ullet 가지치기는 필요하지 않고 보통 $oldsymbol{k} = \sqrt{d}$ 으로 하며 M은 가능한 크게 택함.

ll장 Ensemble Learning 8/30

03 Boosting

- Boosting은 개선함(to improve)를 뜻함.
- Weak learner를 여러 번 사용하여 성능을 높이는 방법임.
- 분석 절차
 - 1) weak learner를 이용해 분류한 후 n개의 학습 데이터 중 분류가 올바르게 된 학습 데이터 → 가중치 줄임 오분류된 학습 데이터 → 가중치 높임
 - 2) 1)을 <u>M</u>번 반복함.
 - 이때 L_i 를 i 번째 learner라고 하면 learner는 $L = \sum_{i=1}^M L_i$ 이 됨.
- 이처럼 추가적(addictive)으로 개선되는 방법을 boosting이라 함.

비장 Ensemble Learning 9/30

전향적 모델링(Forward stagewise modeling)

■ 알고리즘

$$1. \quad f_0(\underline{x}) = \beta_0$$

- 2. m=1부터 M까지
 - a. $\sum_{i=1}^n L[y_i,f_{m-1}(x_i)+\beta b(x_i,\gamma)]$ 를 최소화 하고 최소화한 β 와 γ 를 (β_m,γ_m) 으로 표기함. 이때 L은 손실함수임.
 - b. $f_m(\mathbf{x}) = f_{m-1}(\mathbf{x}) + \beta_m b(\mathbf{x}, \mathbf{\gamma}_m)$ 으로 최신화함.
- 이때 $b(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{\gamma}_m)$ 는
 - 로지스틱 회귀 : $b(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{\gamma}) = (1 + \exp(-\boldsymbol{x}^T \boldsymbol{\gamma}))^{-1}$
 - 선형회귀모형 : $b(\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{\gamma}) = x_{im}$

10/30

전향적 모델링(Forward stagewise modeling)

■ 만약 손실함수가 제곱오차 손실함수라면,

$$\begin{split} \sum_{i=1}^n & L(y_i, \boldsymbol{f}_{m-1}(\boldsymbol{x}_i) + \beta b(\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{\gamma})) = \sum_{i=1}^n (y_i - \boldsymbol{f}_{m-1}(\boldsymbol{x}_i) - \beta b(\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{\gamma}))^2 \\ &= \sum_{i=1}^n (r_i - \beta b(\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{\gamma}))^2 \end{split}$$

• 이때 회귀모형을 가정하면 $b(x_i,\gamma)=x_{im}$ 이 되며 $m=j\;(j=1,...,M)$ 일 때 β_jx_{ij} 로 회귀하는 것은 M번 반복하면 $f_M(x)=\beta_0+\beta_1x_1+\beta_2x_2+\cdots+\beta_Mx_M$ 이 되는데 이는 일반적인 OLS와 다름.

비장 Ensemble Learning 11/30

4가지 손실함수에 대한 최소 f의 기댓값

손실함수	Cost	미분	f^*
제곱오차	$(y_i - f(\boldsymbol{x}_i))^2$	$y_i\!-\!f(\!\boldsymbol{x}_i)$	$E(y m{x}_i)$
절대오차	$ y_i - f(\boldsymbol{x}_i) $	$\mathrm{sign} y_i - f(\pmb{x}_i) $	$\mathrm{median}(y \boldsymbol{x}_i)$
지수	$\exp(-y_i f(x))$	$-\overset{\sim}{y_{i}}exp(-\overset{\sim}{y_{i}}f(\boldsymbol{x}_{i}))$	$\frac{1}{2}log\frac{\pi_i}{1-\pi_i}$
로짓	$\log(1 + \exp(-y_i f(\boldsymbol{x}_i)))$	$y_i - \pi_i$	$\frac{1}{2}log\frac{\pi_i}{1-\pi_i}$

- 지수와 로짓은 이항분류를 위한 손실함수이며 $\stackrel{\sim}{y_i}=\{-1,1\},\ y_i=\{0,1\},$ $\pi_i=(1+e^{-2f(x_i)})$ 이 됨. 로짓 손실함수의 증감이 지수보다는 좀 더 선형임.
- 제곱오차와 절대오차는 일반적으로 실수 자료에 대한 회귀에 쓰임.

ll장 Ensemble Learning 12/30

4가지 손실함수에 대한 최소 f의 기댓값

■ 지수 손실함수에 대한 *f**

$$L = \exp(-\tilde{y}f)$$
이므로 $\frac{\partial L}{\partial f} = -\tilde{y} \exp(-\tilde{y}f)$ 이고
$$E(-\tilde{y}exp(-\tilde{y}f)|\mathbf{x}_i) = -\exp(-f)P(\tilde{y}=1|\mathbf{x}_i) + \exp(f)P(\tilde{y}=-1|\mathbf{x}_i)$$
이므로
$$E(\frac{\partial L}{\partial f}) = 0 \text{ 인 해는 } f^* = \frac{1}{2}log\frac{P(\tilde{y}=1|\mathbf{x}_i)}{P(\tilde{y}=-1|\mathbf{x}_i)}$$
이 됨.

그러므로 $P(\hat{y}=1|x_i) > 0.5$ (즉, $f^*(x_i) > 0$)이면 범주는 1로 예측하게 됨.

13/30

4가지 손실함수에 대한 최소 f의 기댓값

■ 로짓 손실함수에 대한 f*

로지스틱 회귀에서는
$$p_i = P(\tilde{y} = 1 | \mathbf{x}_i) = \frac{1}{1 + e^{-2f(\mathbf{x}_i)}}$$
임. 이때 $f(\mathbf{x}_i) = \frac{1}{2} \mathbf{w}^T \mathbf{x}_i$ 임. $y = (\tilde{y} + 1)/2$ 로 변환하면 $\tilde{y} = 1$ 일 때 $y = 1$, $\tilde{y} = -1$ 일 때 $y = 0$ 이 됨.

로그우도함수는

$$l = y \log p_i + (1 - y) \log(1 - p_i)$$
 (11.1)

이때 $p_i = (1 + e^{-2f(x_i)})^{-1}$ 이므로 위 식을 정리하면 $l = -\log(1 + e^{-2yf(x_i)})$ 이 됨.

따라서 손실함수는 $-l = L = \log(1 + e^{-2yf(x_i)})$ 이 되며 이는 로짓 손실함수와 같음.

11장 Ensemble Learning 14/30

- 지수손실함수를 이용한 전향적모델링의 전형적인 응용임.
- AdaBoost의 손실함수

$$\sum_{i=1}^{n} \exp(-y_i (f_{m-1}(\mathbf{x}_i) + \beta b(\mathbf{x}_i, \mathbf{\gamma}))) = \sum_{i=1}^{n} w_i^{(m)} \exp(-\beta y_i b(\mathbf{x}_i, \mathbf{\gamma}))$$
(11.2)

이때 $y_i \in \{-1,1\}$, $w_i = \exp(-y_i f_{m-1}(x_i))$ 임.

- $f_{m-1}(x_i)$ 는 (m-1) 번째 단계에서 계산된 classifier로 $y_i f_{m-1}(x_i)$ 가 음의 방향으로 클수록 $w_i^{(m)}$ 가 커지게 됨.
- 전단계인 (m-1)번째 단계에서 예측오차가 큰 학습 데이터에 가중치 부여
 - ightharpoonup 현단계에서 큰 가중치를 제대로 분류하도록 오차를 최소화 하는 ho와 ho를 추정하게 됨.

11장 Ensemble Learning 15/30

■ 추정

 $\beta > 0$ 을 고정시키고 AdaBoost의 손실함수를 최소로 하는 $b(\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{\gamma})$ 를 구하면

$$L = \sum_{i=1}^{n} w_i^{(m)} \exp(-\beta y_i b(\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{\gamma}))$$

$$= \sum_{y_i=b(\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{\gamma})} w_i^{(m)} e^{-\beta} + \sum_{y_i \neq b(\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{\gamma})} w_i^{(m)} e^{\beta}$$

$$= (e^{\beta} - e^{-\beta}) \sum_{i=1}^{n} w_i^{(m)} I(y_i \neq b(\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{\gamma})) + e^{-\beta} \sum_{i=1}^{n} w_i^{(m)}$$
(11.3)

즉, $\sum_{i=1}^{n} w_i^{(m)} I(y_i \neq b(x_i, \gamma))$ 를 최소화 하는 것이 되며 w_i^m 가 주어져 있으므로 $b(x_i, \gamma)$ 는 남은 강이를 가지 보리나면 나라지지를 하기를 이용하여 그하다

 $b(\pmb{x}_i,\pmb{\gamma})$ 는 낮은 깊이를 가진 분류나무나 로지스틱 회귀를 이용하여 구하며 이를 $b_m(\pmb{x}_i,\pmb{\gamma})$ 이라 하고 (11.3)을 최소화 하는 β 를 구하면

ll장 Ensemble Learning 16/30

■ 추정(계속)

$$\beta_{m} = \frac{1}{2} log \frac{1 - e_{m}}{e_{m}}, \ e_{m} = \frac{\sum_{i=1}^{n} w_{i}^{(m)} I(y_{i} \neq b_{m}(\boldsymbol{x}_{i}, \boldsymbol{\gamma}))}{\sum_{i=1}^{n} w_{i}^{(m)}}$$
(11.4)

$$f_m(\pmb{x}_i) = f_{m-1}(\pmb{x}_i) + eta_m b_m(\pmb{x}_i,\pmb{\gamma})$$
이므로 $w_i^{(m+1)} = w_i^{(m)} e^{eta_m y_i b_m(\pmb{x}_i,\pmb{\gamma})}$ 이 되며

$$y_i b_m(\pmb{x}_i, \gamma) = 2\,I(y_i \neq b(\pmb{x}_i, \pmb{\gamma})) - 1\,\mathsf{o}|\mathbf{므로} \quad w_i^{(m+1)} = w_i^{(m)} e^{2\beta_m I(y_i \neq b(\pmb{x}_i, \pmb{\gamma}))} e^{-\beta_m}$$
임.

이때 e^{-eta_m} 는 모든 학습 데이터에 부여된 값이므로 $w_i^{(m+1)} = w_i^{(m)} e^{eta_m I(y_i
eq b(x_i, \gamma))}$ 임.

ll장 Ensemble Learning 17/30

■ 알고리즘

- 1. $f_0(\underline{x}) = 0$ 로 설정함($w_i^{(0)} = 1/n, i = 1,2,...,n$)
- 2. m=1 부터 M까지
 - a. $\sum_{i=1}^n w_i^{(m)} I(y_i \neq b(\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{\gamma}))$ 를 최소화하는 β_m 와 $b_m(\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{\gamma})$ 를 구함.
 - b. (11.4)에서 정의된 eta_m 과 e_m 을 구한 후 $lpha_m=2eta_m$ 으로 놓음.
 - c. $w_i^{(m+1)} = w_i^{(m)} \exp(\alpha_m I(y_i \neq b_m(\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{\gamma}))$ 를 계산.
- 3. $b_m(x_i, \gamma)$ 으로 x_i 에 대응하는 목표변수의 범주를 -1 또는 1로 예측함.

18/30

분석 전 고려할 사항들

- 1. 자료의 타입에 민감한가?
 - : 자료의 타입은 실수, 명명형, 범주형 등이 있음.
- 2. 결측 자료에 민감한가?
- 3. 자료의 이상치에 민감한가?
 - : 손실함수가 제곱오차일 경우 민감함.
- 4. 자료의 표준화가 필요한가?
 - : 특성변수의 scale 문제 때문임. 하지만 변환은 정보의 손실 또는 왜곡을 초래해 해석에 문제를 일으킬 수 있음.
- 5. 해석의 용이성
- 6. 성능

ll장 Ensemble Learning 19/30

Learning 방법의 특성들의 비교

특성	로지스틱	KNN	LDA	SVM	의사결정 나무	최소제곱 선형모형	Neural network
자료 type 민감성	상	상	상	상	♦	상	상
결측 자료 영향	상	중	상	상	Oh	상	상
이상치 민감성	상	하	상	상	ö l	상	상
선형 변환	불필요	불필요	불필요	불필요	불필요	불필요	필요
해석의 용이성	용이	난해	난해	난해	용이	용이	매우난해
성능	높음	중간	중간	높음	중하	중간	높음

- 주어진 자료에 적절한 분석 도구를 선택해야 함.
- 분석자료의 준비과정이 필요 없는 off-the-shelf 분석 방법은 의사결정나무임.
- Gradient Boosted method (GBM)은 의사결정나무의 예측성능을 높임.

ll장 Ensemble Learning 20/30

- 전향적 모델링의 응용임.
- 의사결정나무
 - 의사결정나무에서 $b(x,\gamma)=\sum_{j=1}^J\gamma_jI(x\in R_j)$ 이고 이때 $\{\gamma_j,R_j\},\ j=1,2,...,J$ 이며 R_j 는 노드 γ_j 에 만들어진 영역임.
 - 불순도 측도를 이용하여 R_j 를 top-down 형태로 결정하고 회귀나무는 R_j 에 포함된 y_i 들의 평균을 추정치로 분류나무는 R_j 안에 가장 많은 범주를 추정치로 함.

11장 Ensemble Learning 21/30

- 의사결정나무(계속)
 - 그런데 회귀나무에서 주로 사용하는 제곱오차나 절대오차 손실함수 등으로

$$\sum_{i=1}^{n} L(y_i, \sum_{j=1}^{J} \gamma_j I(x_i \in R_j))$$
 (11.5)

를 최소로 하는 γ_j , R_j 를 구하는 것은 어려움.

11장 Ensemble Learning 22/30

- $lacksymbol{\bullet}$ 일반적인 $f(oldsymbol{x}_i)$
 - 손실함수가 미분 가능하다고 가정하면

$$\sum_{i=1}^{n} L(y_i, f(x_i))$$
 (11.6)

를 최소화 하는 $f(x_i)$ 를 구하게 됨.

- (11.6)에 기울기 하강법을 적용하면

$$\begin{split} f_{m}(\boldsymbol{x}_{i}) &= f_{m-1}(\boldsymbol{x}_{i}) - \eta_{m} \frac{\partial L(y_{i}, f(\boldsymbol{x}_{i}))}{\partial f(\boldsymbol{x}_{i})} |_{f(\boldsymbol{x}_{i} = f_{m-1}(\boldsymbol{x}_{i}))} \\ &= f_{m-1}(\underline{x_{i}}) - \eta_{m} g_{im} \end{split} \tag{11.7}$$

이 되고 여기서
$$i=1,2,...,n$$
 이고 $g_{im}=\left.rac{\partial L(y_i,f(m{x}_i))}{\partial f(m{x}_i)}|_{f(m{x}_i=f_{m-1}(m{x}_i))}$ 임.

ll장 Ensemble Learning 23/30

- 일반적인 $f(x_i)$ (계속)
 - (11.6)의 $f(x_i)$ 에 $f_m(x_i)$ 를 대입하면

$$\sum_{i=1}^{n} L(y_i, f_{m-1}(\underline{x_i}) - \eta_m g_{im})$$
 (11.8)

이 됨. 전향적 모델링에서 $\sum_{i=1}^n L[y_i, f_{m-1}(\boldsymbol{x}_i) + \beta b(\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{\gamma})]$ 의

$$\beta_m = \eta_m, \ b(\mathbf{x}_i, \mathbf{\gamma}_m) = g_{im}$$
이 됨을 알 수 있음.

- (11.5)를 최소화 하는 γ_j , R_j
 - -(11.7)의 g_{im} 을 구한 후,

$$\sum_{i=1}^{n} (-g_{im} - \sum_{j=1}^{J} \gamma_{jm} I(\mathbf{x}_{i} \in R_{jm}))^{2}$$
 (11.9)

을 최소화 하는 γ_{jm} 을 산출함. R_{jm} 은 의사결정나무의 불순도 측도 이용해 추정.

ll장 Ensemble Learning 24/30

- (11.5)를 최소화 하는 γ_j , R_j (계속)
 - (II.9)는 (J-1)개의 더미변수를 가진 일반적인 회귀모형의 손실함수이며 γ_{jm} 은 최소제곱 추정치가 됨. g_{im} 이 기울기이기 때문에 gradient boosting으로 불림.
 - η_m 은 적절한 손실함수 L에 의해 정의된 (11.8)에 의해

$$\sum_{i=1}^{n} L(y_i, f_{m-1}(\underline{x_i}) + \eta_m \sum_{j=1}^{J} \hat{\gamma}_{jm} I(\boldsymbol{x}_i \boldsymbol{\in} R_{jm}))$$

을 최소화 하는 η_m 을 구함. 이때 $\hat{\gamma}_{jm}$ 은 (11.9)에 의한 최소제곱추정치임.

(11.8)에서 가장 많이 사용되는 손실함수를 정리하면 다음 표와 같음.

11장 Ensemble Learning 25/30

■ 손실함수와 기울기

도구	Loss	$-\partial \mathbf{L}/\partial \mathbf{f}(x_i)$	비고
회귀	$\sum_{i=1}^n (y_i - (f \boldsymbol{x}_i))^2$	$y_i\!-\!f(\pmb{x}_i)$	제곱오차
	$\sum_{i=1}^n \! y_i\!-\!f(\boldsymbol{x}_i) $	$sign y_i - f(\pmb{x}_i) $	절대오차
	$\begin{aligned} &(y_i - f(\boldsymbol{x}_i))^2 & \text{if } & y_i - f(\boldsymbol{x}_i) < \delta \\ &2\delta y_i - f(\boldsymbol{x}_i) - \delta^2 & \text{if } & y_i - f(\boldsymbol{x}_i) \geq \delta \end{aligned}$	$\begin{aligned} y_i - f(\boldsymbol{x}_i) & \text{ if } & y_i - f(\boldsymbol{x}_i) < \delta \\ \delta. & & \delta sign y_i - f(\boldsymbol{x}_i) & \text{ if } & y_i - f(\boldsymbol{x}_i) \ge \delta \end{aligned}$	후버손실
분류	$-\sum_{k=1}^{K} \mathbf{I}(y_{i}{\in}g_{k}){\log p_{k}(\boldsymbol{x}_{i})}^{*}$		Deviance loss
	$=\!\!-\sum_{i=1}^{K}\! I\!(y_{i}\!\!\in\!\!g_{k})\!f_{k}(\boldsymbol{x}_{i})$	$\frac{\partial L}{\partial f(\underline{x_i})} = I(y_i {\in} g_k) - p_k(\boldsymbol{x}_i)$	=음의 다항분포
	$+\log(\sum_{k=1}^K e^{f_k(\boldsymbol{x}_i)})$		우도함수

*
$$p_k(\underline{x}) = e^{f_k(x)} / \sum_{k=1}^K e^{f_k(x)}$$
, g_k 는 k 번째 그룹

ll장 Ensemble Learning 26/30

Gradient Tree Boosting

■ Gradient tree boosting 알고리즘

- 1. 초기치 $\sum_{i=1}^n L(y_i,\gamma)$ 를 최소화하는 $f_0(\underline{x})=\gamma$
- 2. m=1 부터 M 까지
 - a. $g_{im} = -\left[\frac{\partial L(y_i, f({m x}_i))}{\partial f({m x}_i)}\right]_{f=f_{m-1}}, \ i=1,2,...,n$
 - b. $\sum_{i=1}^n (-g_{im} \sum_{j=1}^J \gamma_{jm} I(x_i \in R_{jm}))^2$ 를 최소화하는 $\hat{\gamma}_{jm}$ 을 구함. 이때 R_{jm} 은 의사결정나무의 불순도측도에 의해 결정된 J개의 서로 배반인 영역.
 - c. $\sum_{i=1}^n (y_i, f_{m-1}(x_i) + \eta_m \sum_{j=1}^J \hat{\gamma}_{jm} I(x_i \in R_{jm}))$ 을 최소화 하는 η_m 을 구함.
 - d. $f_m(\mathbf{x}_i) = f_{m-1}(\mathbf{x}_i) + \hat{\eta_m} \sum_{j=1}^J \hat{\gamma}_{jm} I(\mathbf{x}_i \in R_{jm})$ 으로 업데이트.
- 3. $\hat{f}(\boldsymbol{x}_i) = f_M(\boldsymbol{x}_i)$

ll장 Ensemble Learning 27/30

Gradient Tree Boosting

- 알고리즘에서는 /를 고정했지만 반복에 의존하도록 설정해도 됨.
- 총 범주가 K일 때, Gradient tree boosting은 2-a-2-d = K번 반복하여 $f_k(x_i), k=1,...,K$ 를 구함.
- $f_M(\underline{x_i})$ 는 class 숫자만큼 K개가 산출되어 $p_k(x_i) = \frac{e^{f_k(x_i)}}{\displaystyle\sum_{k=1}^K e^{f_k(x_i)}}$ 에 의해 범주 k에 속할 확률을 예측 가능.
- GBM 알고리즘에 사용된 의사결정나무의 크기인 J는 일반적으로 $4 \le J \le 8$.

11장 Ensemble Learning 28/30

04 GBM의 해석

- 덧셈 방식의 boosting에 의한 의사결정 나무는 별도의 해석도구가 필요함.
 - 1) 상대중요도(relative importance)
 - 회귀

GBM에서는 나무회귀를 M번 반복하므로 특성변수 별로 줄어든 오차제곱합의 평균을 구한 후 평균이 가장 큰 변수를 100으로 놓고 나머지 변수의 상대 중요도를 구함.

- 분류

나머지는 회귀와 동일하며 오차제곱합 대신 information gain을 이용함.

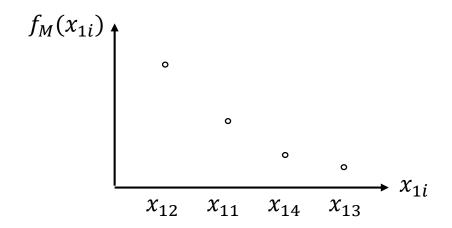
11장 Ensemble Learning 29/30

04 GBM의 해석

- 2) 부분의존플롯(partial dependence plot)
 - 선형회귀모형에서의 회귀계수와 같은 역할을 함
 - $oldsymbol{-}$ 관심 있는 특성변수의 다양한 값에 대해 $f_{M}(oldsymbol{x}_{i})$ 을 그림.
 - 예를 들어 X_1 변수가 관심변수라면,

 X_1 은 x축, $f_M(x_i)$ 은 y축으로 한 그래프를 그림.

만약 4개의 관측치가 존재한다면,



ll장 Ensemble Learning 30/30

Q & A