

第17章:不平衡数据问题及组合模型

《Python数据科学:技术详解与商业实践》

讲师:Ben

自我介绍

- 天善商业智能和大数据社区 讲师 -Ben
- 天善社区 ID Ben_Chang
- https://www.hellobi.com 学习过程中有任何相关的问题都可以提到技术社区数据挖掘版块。



主要内容

- 集成学习概述
 - 装袋法 (Bagging)
 - 提升 (boosting)
- 随机森林
- Adaboost算法
- 提升树、GBDT和XGBoost
- 偏差(Bias)-方差(Variance)权衡与集成方法

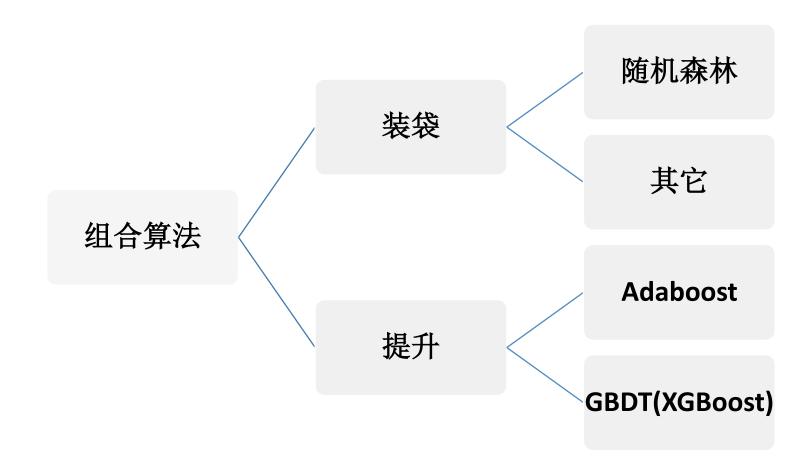




1集成学习概述

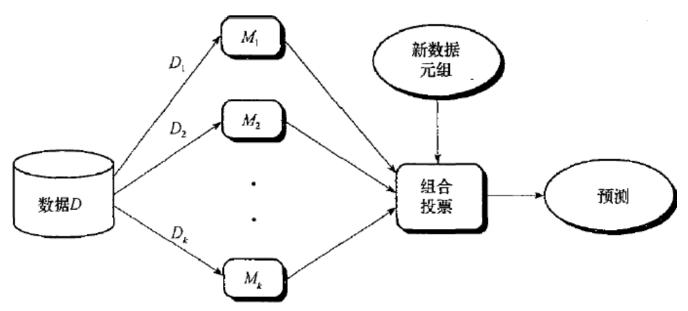
提升分类器准确率的组合方法

■ 组合方法包括:装袋 (bagging) 和提升 (boosting)





装袋(Bagging)

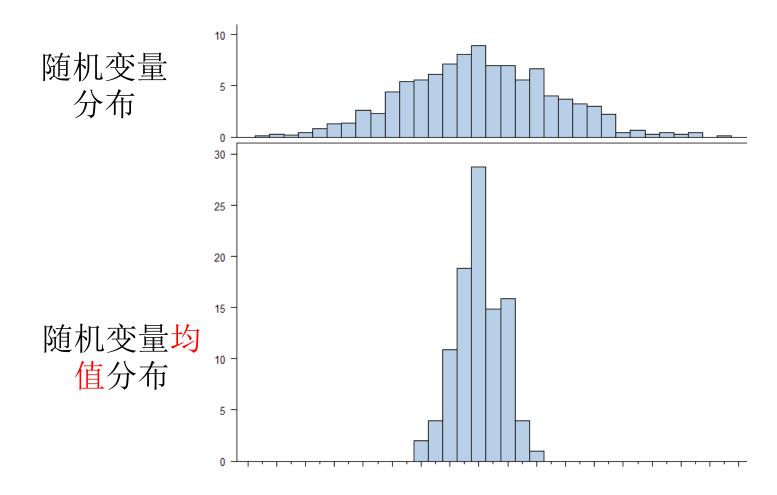


- ✓ 从样本集中重采样(有重复的)选出n个样本
- ✓ 在所有属性上,对这n个样本建立分类器(ID3、C4.5、CART、SVM、Logistic回归等)
- ✓ 重复以上两步m次,即获得了m个分类器
- ✓ 将数据放在这m个分类器上,最后根据这m个分类器的投票 结果,决定数据属于哪一类



袋装算法的优势

- 准确率明显高于组合中任何单个的分类器
- 对于较大的噪音,表现不至于很差,并且具有鲁棒性
- 不容易过度拟合





袋装的效果

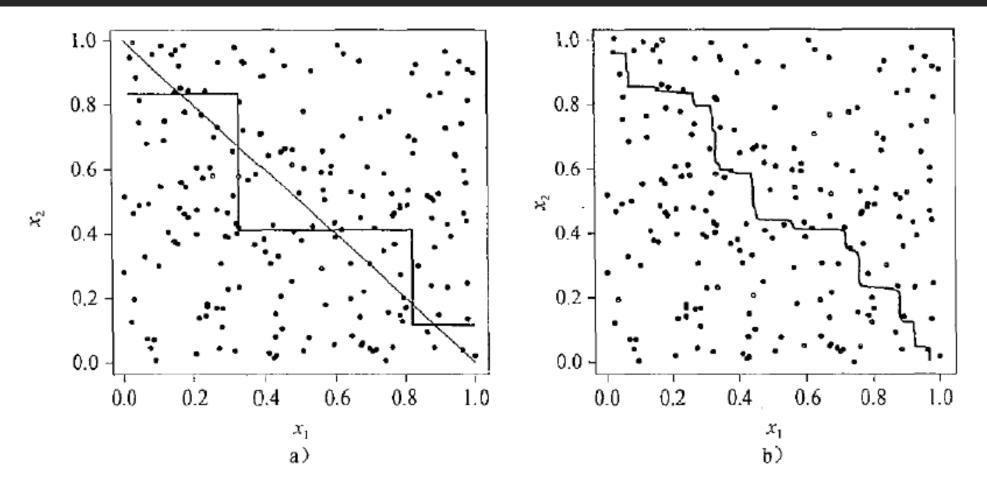
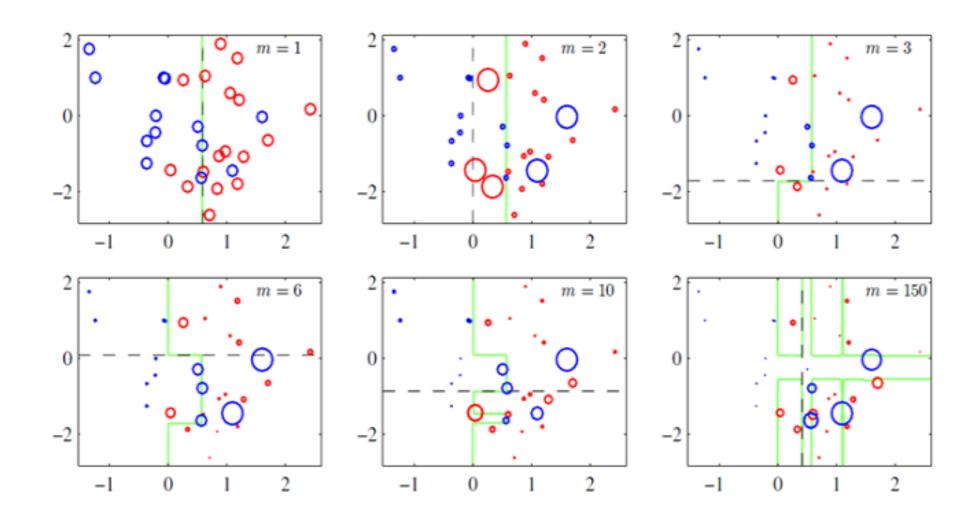


图 8.22 一个线性可分问题(即实际的决策边界是一条直线)的决策边界: a)单棵决策树; b)决策树的组合分类器。决策树努力近似线性边界。组合分类器更接近于真实的边界。取自 Seni 和 Elder [SE10]



提升(boosting)算法思想

Boosting的过程,绿色的线表示目前取得的模型(模型是由前m次得到的模型合并得到的),虚线表示当前这次模型。每次分类的时候,会更关注分错的数据,上图中,红色和蓝色的点就是数据,点越大表示权重越高。





提升算法的优缺点

- 可以获得比bagging更快的收敛速度
- 容易过度拟合





2随机森林

随机森林(Random Forest)算法

- 是用装袋法在行列上进行随机抽样
- 由很多决策树分类器组合而成(因而称为"森林")
- 单个的决策树分类器用随机方法构成。首先,学习集是从原训练 集中通过有放回抽样得到的自助样本。其次,参与构建该决策树 的变量也是随机抽出,参与变量数通常大大小于可用变量数。
- 单个决策树在产生学习集和确定参与变量后,使用CART算法计算, 不剪枝
- 最后分类结果取决于各个决策树分类器简单多数选举



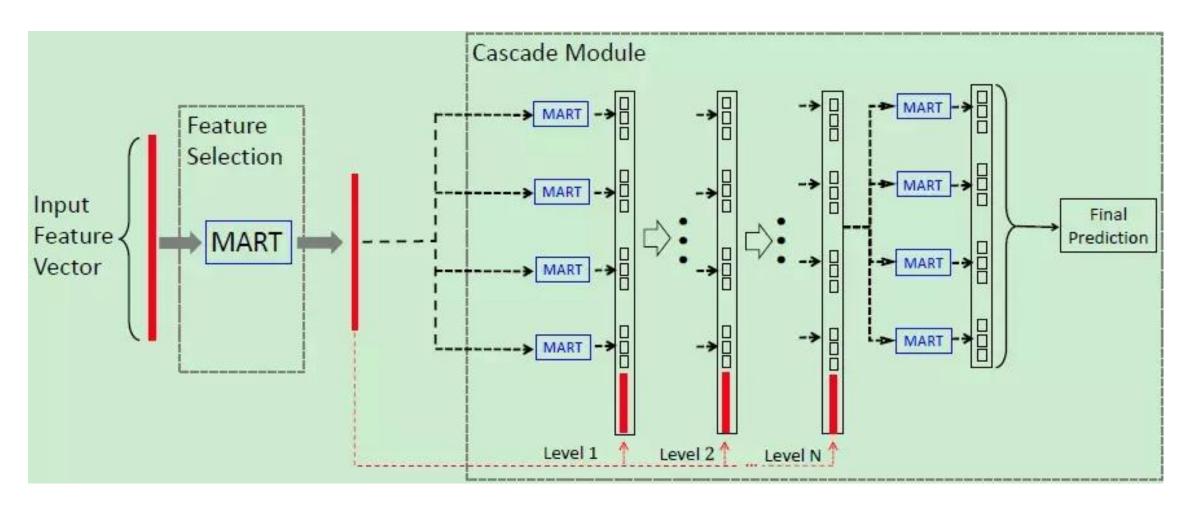
随机森林算法优点

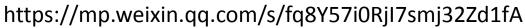
- 准确率可以和神经网络媲美, 比逻辑回归高
- 对错误和离群点更加鲁棒性
- 决策树容易过度拟合的问题会随着森林规模 而削弱
- 在大数据情况下速度快, 性能好



深度随机森林

• 周志华团队和蚂蚁金服合作: 用分布式深度森林算法检测套现欺诈









3 Adaboost算法

Adaboost算法

对于二分类问题,给定训练样本 $\{(x_i,y_i)|i=1,2,\cdots,N\}$, $y_i \in \{-1,+1\}$ 。AdaBoost训练若干棵分类树 $G_m(x)$,每棵分类树都是个弱分类器,这些弱分类器线性加权组合在一起构成一个强分类器 $f(x) = \sum_{m=1}^{M} \alpha_m G_m(x)$ 。 算法步骤:

- 1.初始时每个样本赋予相同的权重 $w_{1i} = \frac{1}{N}$
- 2.进行M轮迭代,第m轮迭代产生一个弱分类器 $G_m(x)$
 - (1)采用使分类错误率最低的方法找到最佳的切分点,形成弱

分类器
$$G_m(x): x \to \{-1, +1\}$$

(2)计算 $G_m(x)$ 在所有样本上的分类错误率

$$e_m = \sum_{i=1}^N w_{mi} I(G_m(x_i) \neq y_i)$$



Adaboost算法

即分类错误率 e_m 是 $G_m(x)$ 误分样本的权重之和。

(3)计算 $G_m(x)$ 的权重 α_m 。

$$\alpha_m = \frac{1}{2} log \frac{1 - e_m}{e_m}$$

 $e_m < \frac{1}{2}$ 时 $\alpha_m > 0$,且 e_m 越小 α_m 越大,即分类错误类越小的弱分类器在最终的分类器 f(x)中权重越大。

(4)更新每一个样本的权重。在下一轮迭代中

$$w_{m+1,i} = \frac{w_{mi}}{Z} exp\left(-\alpha_m y_i G_m(x_i)\right)$$

Z是归一化因子,确保所有样本的权重之和为1。样本i被错误分类时 $y_i G_m(x_i) < 0$,此时 $w_{m+1,i} > w_{mi}$,即被错误分类的样本在下次迭代时得到更高的权重。

3.最终的分类器
$$G(x) = sign(f(x)) = sign\left(\sum_{m=1}^{M} \alpha_m G_m(x)\right)$$



举例

· 给定下列训练样本, 试用AdaBoost算法学习一个强分类器。

```
序号 1 2 3 4 5 6 7 8 9 10 X 0 1 2 3 4 5 6 7 8 9 Y 1 1 1 -1 -1 -1 1 1 1 -1
```



• 初始化训练数据的权值分布

•
$$W_{1i} = 0.1$$
 $D_1 = (w_{11}, w_{12}\Lambda \ w_{1i}\Lambda \ , w_{1N}), \ w_{1i} = \frac{1}{N}, \ i = 1, 2, \Lambda \ , N$



- 对于m=1
- 在权值分布为**D1**的训练数据上,阈值v取2.5时误 差率最低,故基本分类器为:

$$G_1(x) = \begin{cases} 1, & x < 2.5 \\ -1, & x > 2.5 \end{cases}$$



- G1(x)在训练数据集上的误差率e1=P(G1(xi)≠yi) = 0.3
- 计算G1的系数:

$$\alpha_1 = \frac{1}{2} \log \frac{1 - e_1}{e_1} = 0.4236$$

- $f_1(x) = 0.4236*G_1(x)$
- 分类器 $sign(f_1(x))$ 在训练数据集上有3个误分类点。



• 更新训练数据的权值分布:

$$D_{m+1} = (w_{m+1,1}, w_{m+1,2} \Lambda \ w_{m+1,i} \Lambda , w_{m+1,N}),$$

$$w_{m+i} = \frac{w_{mi}}{7} \exp(-\alpha_m y_i G_m(x_i)), i = 1, 2, \Lambda , N$$

- $w_{m+i} = \frac{w_{mi}}{Z} \exp(-\alpha_m y_i G_m(x_i)), i = 1,2,\Lambda, N$ D₂=(0.0715, 0.0715, 0.0715, 0.0715, 0.0715, 0.1666, 0.1666, 0.1666, 0.0715)
 - 计算D2, 是为下一个基本分类器使用
- $f_1(x) = 0.4236*G_1(x)$
- 分类器 $sign(f_1(x))$ 在训练数据集上有3个误分类点。



- 对于m=2
- 在权值分布为D2的训练数据上,阈值v取8.5时误 差率最低,故基本分类器为:

$$G_2(x) = \begin{cases} 1, & x < 8.5 \\ -1, & x > 8.5 \end{cases}$$



- G2(x)在训练数据集上的误差率e2=P(G2(xi)≠yi) = 0.2143(0.0715*3)
- 计算G2的系数:

$$\alpha_2 = \frac{1}{2} \log \frac{1 - e_2}{e_2} = 0.6496$$



• 更新训练数据的权值分布:

$$D_{m+1} = (w_{m+1,1}, w_{m+1,2} \Lambda \ w_{m+1,i} \Lambda , w_{m+1,N}),$$

$$w_{m+i} = \frac{w_{mi}}{Z} \exp(-\alpha_m y_i G_m(x_i)), i = 1,2,\Lambda, N$$

- D3=(0.0455, 0.0455, 0.0455, 0.1667, 0.1667, 0.01667, 0.1060, 0.1060, 0.1060, 0.0455)
- f2(x)=0.4236G1(x) + 0.6496G2(x)
- · 分类器sign(f2(x))在训练数据集上有3个误分类点。



- 对于m=3
- 在权值分布为D3的训练数据上,阈值v取5.5时误 差率最低,故基本分类器为:

$$G_3(x) = \begin{cases} 1, & x > 5.5 \\ -1, & x < 5.5 \end{cases}$$



- G3(x)在训练数据集上的误差率e3=P(G3(xi)≠yi) = 0.1820(0.0455*4)
- 计算G3的系数:

$$\alpha_3 = \frac{1}{2} \log \frac{1 - e_3}{e_3} = 0.7514$$



• 更新训练数据的权值分布:

$$D_{m+1} = (w_{m+1,1}, w_{m+1,2} \Lambda \ w_{m+1,i} \Lambda , w_{m+1,N}),$$

$$w_{m+i} = \frac{w_{mi}}{Z_m} \exp(-\alpha_m y_i G_m(x_i)), i = 1,2,\Lambda , N$$

- D4=(0.125, 0.125, 0.125, 0.102, 0.102, 0.102, 0.065, 0.065, 0.065, 0.125)
- f3(x)=0.4236G1(x) + 0.6496G2(x)+0.7514G3(x)
- 分类器sign(f3(x))在训练数据集上有0个误分类点。





4 提升树与梯度提升树(GBDT)

以Y为连续变量为例,演示提升树

$$f_{M}(x) = \sum_{m=1}^{M} T(x; \Theta_{m})$$

其中, $T(x; Θ_m)$ 表示决策树; $Θ_m$ 为决策树的参数;M 为树的个数.

提升树得迭代算法:

$$f_m(x) = f_{m-1}(x) + T(x; \Theta_m)$$

$$\hat{\Theta}_m = \arg\min_{\Theta_m} \sum_{i=1}^N L(y_i, f_{m-1}(x_i) + T(x_i; \Theta_m))$$



表 8.2 训练数据表

x_{i}	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
y_i	5.56	5.70	5.91	6.40	6.80	7.05	8.90	8.70	9.00	9.05

解 按照算法 8.3, 第 1 步求 $f_1(x)$ 即回归树 $T_1(x)$. 首先通过以下优化问题:

$$\min_{s} \left[\min_{c_1} \sum_{x_i \in R_1} (y_i - c_1)^2 + \min_{c_2} \sum_{x_i \in R_2} (y_i - c_2)^2 \right]$$

求解训练数据的切分点 s:

$$R_1 = \{x \mid x \le s\}$$
, $R_2 = \{x \mid x > s\}$

容易求得在 R_1 , R_2 内部使平方损失误差达到最小值的 c_1 , c_2 为

$$c_1 = \frac{1}{N_1} \sum_{x_i \in R_1} y_i$$
, $c_2 = \frac{1}{N_2} \sum_{x_i \in R_2} y_i$

这里 N_1 , N_2 是 R_1 , R_2 的样本点数.



求训练数据的切分点. 根据所给数据, 考虑如下切分点:

1.5, 2.5, 3.5, 4.5, 5.5, 6.5, 7.5, 8.5, 9.5

对各切分点,不难求出相应的 R_1 , R_2 , c_1 , c_2 及

$$m(s) = \min_{c_1} \sum_{x_i \in R_1} (y_i - c_1)^2 + \min_{c_2} \sum_{x_i \in R_2} (y_i - c_2)^2$$

例如,当s=1.5时, $R_1=\{1\}$, $R_2=\{2,3,\cdots,10\}$, $c_1=5.56$, $c_2=7.50$,

$$m(s) = \min_{c_1} \sum_{x_i \in R_1} (y_i - c_1)^2 + \min_{c_2} \sum_{x_i \in R_2} (y_i - c_2)^2 = 0 + 15.72 = 15.72$$



表	8.3	计算数据:	#
100	0.3	N 94 9X 1/0 4	ρe

<i>s</i>	1.5	2,5	3.5	4.5	5.5	6.5	7.5	8.5	9.5
m(s)	15.72	12.07	8.36	5.78	3.91	1.93	8.01	11.73	15.74

由表 8.3 可知, 当s=6.5时 m(s) 达到最小值, 此时 $R_1=\{1,2,\cdots,6\}$, $R_2=\{7,8,9,10\}$, $c_1=6.24$, $c_2=8.91$,所以回归树 $T_1(x)$ 为

$$T_1(x) = \begin{cases} 6.24, & x < 6.5 \\ 8.91, & x \ge 6.5 \end{cases}$$
$$f_1(x) = T_1(x)$$

用 $f_1(x)$ 拟合训练数据的残差见表 8.4, 表中 $r_{2i} = y_i - f_1(x_i)$, $i = 1, 2, \dots, 10$.

表 8.4 残差表

x_{l}	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
r ₂₁	-0.68	-0.54	-0.33	0.16	0.56	0.81	-0.01	-0.21	0.09	0.14



用 $f_i(x)$ 拟合训练数据的平方损失误差:

$$L(y, f_1(x)) = \sum_{i=1}^{10} (y_i - f_1(x_i))^2 = 1.93$$

第 2 步求 $T_2(x)$. 方法与求 $T_1(x)$ 一样,只是拟合的数据是表 8.4 的残差. 可以得到:

$$T_2(x) = \begin{cases} -0.52, & x < 3.5 \\ 0.22, & x \ge 3.5 \end{cases}$$

$$f_2(x) = f_1(x) + T_2(x) = \begin{cases} 5.72, & x < 3.5 \\ 6.46, & 3.5 \le x < 6.5 \\ 9.13, & x \ge 6.5 \end{cases}$$



用 $f_2(x)$ 拟合训练数据的平方损失误差是

$$L(y, f_2(x)) = \sum_{i=1}^{10} (y_i - f_2(x_i))^2 = 0.79$$

继续求得

$$T_3(x) = \begin{cases} 0.15, & x < 6.5 \\ -0.22, & x \ge 6.5 \end{cases} \qquad L(y, f_3(x)) = 0.47,$$

$$T_4(x) = \begin{cases} -0.16, & x < 4.5 \\ 0.11, & x \ge 4.5 \end{cases} \qquad L(y, f_4(x)) = 0.30,$$

$$T_5(x) = \begin{cases} 0.07, & x < 6.5 \\ -0.11, & x \ge 6.5 \end{cases} \qquad L(y, f_5(x)) = 0.23,$$

$$T_6(x) = \begin{cases} -0.15, & x < 2.5 \\ 0.04, & x \ge 2.5 \end{cases}$$



^{*}本例摘自:李航,统计学习方法,清华大学出版社,2012

$$f_6(x) = f_5(x) + T_6(x) = T_1(x) + \dots + T_5(x) + T_6(x)$$

$$= \begin{cases} 5.63, & x < 2.5 \\ 5.82, & 2.5 \le x < 3.5 \end{cases}$$

$$= \begin{cases} 6.56, & 3.5 \le x < 4.5 \\ 6.83, & 4.5 \le x < 6.5 \\ 8.95, & x \ge 6.5 \end{cases}$$

用 $f_6(x)$ 拟合训练数据的平方损失误差是

$$L(y, f_6(x)) = \sum_{i=1}^{10} (y_i - f_6(x_i))^2 = 0.17$$

假设此时已满足误差要求,那么 $f(x) = f_6(x)$ 即为所求提升树.



GBDT (Bradient Boosting Decision Tree)

BoostedTree是把boost思想用在树的生长上面,即子节点的预测值 $y^{(t)}$ 是在父节点的预测值 $y^{(t-1)}$ 的基础上前进一小步。如果把boost思想用在森林的扩展上面就是GBDT,即第t轮迭代的预测值依赖于第t-1轮的预测结果:

$$\hat{y}_i^{(t)} = \sum_{k=1}^t f_k(x_i) = \hat{y}_i^{(t-1)} + f_t(x_i)$$

其中f(x)表示一棵决策树,第t轮迭代生成一棵树 f_t ,第t轮迭对样本 x_i 的预测值等于第t-1轮迭代对 x_i 的预测值加上 f_t 对 x_i 的预测值。核心问题是: f_t 取多少才能使 $\hat{y}_i^{(t)} = \hat{y}_i^{(t-1)} + f_t(x_i)$ 尽可能地接近真实值 y_i 呢?这变为一个优化问题:

$$\underset{f_t(x_i)}{arg \ min} \ loss(y_i, \hat{y}_i^{(t-1)} + f_t(x_i))$$



二阶泰勒展开式
$$f(x + \Delta x) \simeq f(x) + f'(x)\Delta x + \frac{1}{2}f''(x)\Delta x^2$$

用 $loss(y_i, \hat{y}_i^{(t-1)} + f_t(x_i))$ 类比上式的 $f(x + \Delta x)$, $loss(y_i, \hat{y}_i^{(t-1)})$ 类比

于f(x), $\hat{y}_i^{(t-1)}$ 类比于x, $f_t(x_i)$ 类比于 Δx , y_i 是已知常量。

令
$$g_i = \frac{\partial loss(y_i, \hat{y}_i^{(t-1)})}{\partial \hat{y}_i^{(t-1)}}, h_i = \frac{\partial^2 loss(y_i, \hat{y}_i^{(t-1)})}{\partial \hat{y}_i^{(t-1)^2}}$$
得

$$loss(y_i, \hat{y}_i^{(t-1)} + f_t(x_i)) = loss(y_i, \hat{y}_i^{(t-1)}) + g_i f_t(x_i) + \frac{1}{2} h_i f_t^2(x_i)$$

二次函数在

$$f_t(x_i) = -\frac{g_i}{h_i} \tag{2}$$

处取得极小值,这与牛顿法的结论是一样的,GBDT中的Gradient就是从此而来。

 $f_t(x_i)$ 确定之后就可以采用上文讲到过的回归树或Boosted回归树来拟合 $f_t(x_i)$ 。



损失函数 loss 有多种取法, 当取平方误差时

$$loss(y_i, \hat{y}_i^{(t-1)}) = (\hat{y}_i^{(t-1)} - y_i)^2$$

此时 $g_i = 2(\hat{y}_i^{(t-1)} - y_i), h_i = 2$

从而 $f_t(x_i) = -\frac{g_i}{h_i} = y_i - \hat{y}_i^{(t-1)}$,所以很多地方把GBDT叫做基于残差的训练方法就是基于平方误差推导出来的。

例如 $y_i = 10$,第1次迭代采用普通的回归树得到 $y_i^{(1)} = f_1(x_i) = 8$ 。第2次迭代时我们构造一棵回归树使得 $f_2(x_i)$ 尽可能逼近于10 - 8 = 2,假设训练得到 $f_2(x_i) = 3$,那第2次迭代结束后我们对 y_i 的预测值就是 $\hat{y}_i = y_i^{(2)} = y_i^{(1)} + f_2(x_i) = 11$ 。第3次迭代构造回归树时使得 $f_3(x_i)$ 尽可能逼近于10 - 11 = -1。依此类推。



例如 $y_i = 10$, λ 取0.1。第1次迭代采用普通的回归树得到 $f_1(x_i) = 8$, $y_i^{(1)} = 0 + 0.1 * f_1(x_i) = 0.8$ 。第2次迭代时我们构造一棵回归树使得 $f_2(x_i)$ 尽可能逼近于10 - 0.8 = 9.2,假设训练得到 $f_2(x_i) = 7$,那第2次迭代结束后我们对 y_i 的预测值就是 $\hat{y}_i = y_i^{(2)} = y_i^{(1)} + 0.1 * f_2(x_i) = 0.8 + 0.1 * 7 = 1.5$ 。第3次迭代构造回归树时使得 $f_3(x_i)$ 尽可能逼近于10 - 1.5 = 8.5。依此类推。



算法	试验20次R2平均值	参数设置	训练耗时/秒
RegressionTree	0.939656	J=400,epsilon=0.001	0.059
BoostedTree	0.948220	J=400,epsilon=0.001,shrinkage=0.25,bagging=0.5	0.083
GBDT	0.956198	J=6,M=40,epsilon=0.001,shrinkage=0.1	2.202

Table 2: 各种回归树效果对比

$$R2 = \frac{Var(y) - MES(y, \hat{y})}{Var(y)} = 1 - \frac{\sum_{i} (y_i - \hat{y}_i)^2}{\sum_{i} (y_i - \bar{y}_i)^2}$$

训练数据

200条数据取自:

math.pow(x-50,2)+300*np.random.rand()

测试数据

200条数据取自:

math.pow(x-50,2)



对于二分类问题, $y \in \{0,1\}$,设 $P_+ = p(y = 1), P_- = p(y = 0)$,则伯努力试验的似然函数为 $P_+^y P_-^{1-y}$,转化为对数似 $\chi_y \ln P_+ + (1-y) \ln P_-$,极大化对数似然等价于

$$min - ylnP_{+} - (1 - y)lnP_{-}$$
 (3)

而 $-ylnP_+ - (1-y)lnP_-$ 正好就是交叉熵。

GBDT是回归树,它的输出是任意实数 $f(x) \in [-\infty, +\infty]$,如果把f(x)传给一个logistic函数就可以实现二分类。

$$P_{+} = \frac{1}{1 + e^{-f(x)}}, P_{-} = \frac{1}{1 + e^{f(x)}}$$
(4)

把(4)式代入(3)式得



$$\min \ loss = yln(1 + e^{-f(x)}) + (1 - y)ln(1 + e^{f}(x))$$
 (5)
$$\frac{\partial loss}{\partial f} = \frac{-y}{1 + e^{-f(x)}} e^{-f(x)} + \frac{1 - y}{1 + e^{f(x)}} e^{f(x)}$$

$$= \frac{-y}{1 + e^{f(x)}} + \frac{1 - y}{1 + e^{-f(x)}} = -yP_{-} + (1 - y)P_{+} = P_{+} - y$$

$$\frac{\partial^{2} loss}{\partial f^{2}} = \frac{\partial P_{+} - y}{\partial f} = \frac{\partial P_{+}}{\partial f}$$

$$= \frac{e^{-f(x)}}{(1 + e^{-f(x)})^{2}} = \frac{1}{(1 + e^{f(x)})(1 + e^{-f(x)})} = P_{+}P_{-}$$

$$\text{由}(2)$$
 $\text{由}(2)$ \text



XGBoost

在GBDT的基础上自剪枝的决策树

GBDT每次新建的树并没有力图构建一个最合理的新树。Xgboost则希望新加入的树是最优的。 其每次建树是在最优化以下的目标函数:



误差函数: 我们的模型有多 拟合数据.

正则化项: 惩罚复杂模型

连续被变量时的损失函数为:

$$L(\theta) = \sum_i (y_i - \hat{y}_i)^2$$

二分类被变量时的损失函数为:

$$L(heta) = \sum_{i} [y_i \ln(1 + e^{-\hat{y_i}}) + (1 - y_i) \ln(1 + e^{\hat{y_i}})]$$

正则项

$$\Omega(f_t) = \gamma T + \frac{1}{2} \lambda \sum_{j=1}^T w_j^2$$
 where $\sum_{j=1}^T w_j^2$

通过加法模型的泰勒展开:
$$Obj = -\frac{1}{2}\sum_{j=1}^{T}\frac{G_j^2}{H_j+\lambda} + \gamma T$$
 等价于 CART的 剪枝策略:
$$Gain = \frac{1}{2}[\frac{G_L^2}{H_L+\lambda} + \frac{G_R^2}{H_R+\lambda} - \frac{(G_L+G_R)^2}{H_L+H_R+\lambda}] - \gamma$$

右子树分数

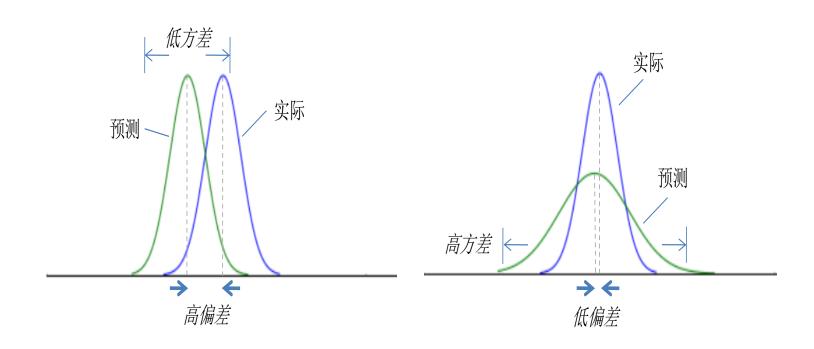
详细算法介绍参见:http://xgboost.readthedocs.io/en/latest/model.html





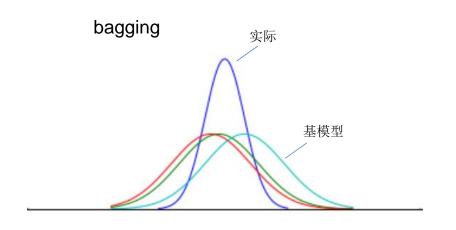
5 偏差(Bias)-方差(Variance)权衡与 集成方法

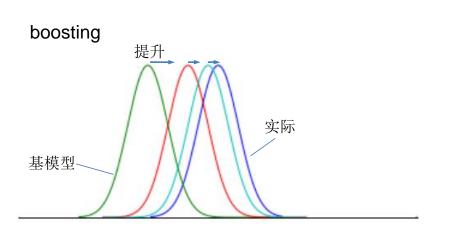
偏差-方差权衡





bagging与boosting的直观理解







更多商业智能BI和大数据精品视频尽在 www.hellobi.com



















BI、商业智能 数据挖掘 大数据 数据分析师 Python R语言 机器学习 深度学习 人工智能 Hadoop Hive Tableau BIFE FTI 数据科学家 **PowerBI**

