머신러닝 톺아보기 세션

7주차. 앙상블 학습과 랜덤 포레스트

유선호

Copyright ⓒ SeonHoYoo

0 CONTEXT

1. 앙상블 학습
2. 투표식 분류기
3. 배깅과 페이스팅
4. 랜덤 패치와 랜덤 서브스페이스
5. 랜덤 포레스트
6. 부스팅

Copyright ⓒ SeonHoYoo

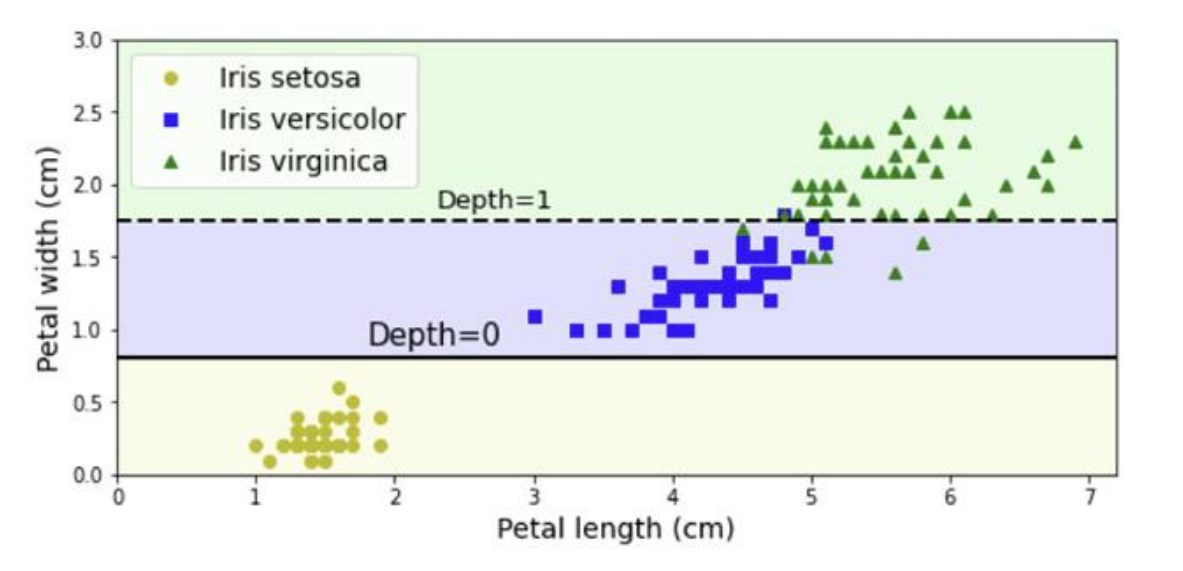
결정트리 단점 – 6주차 자료

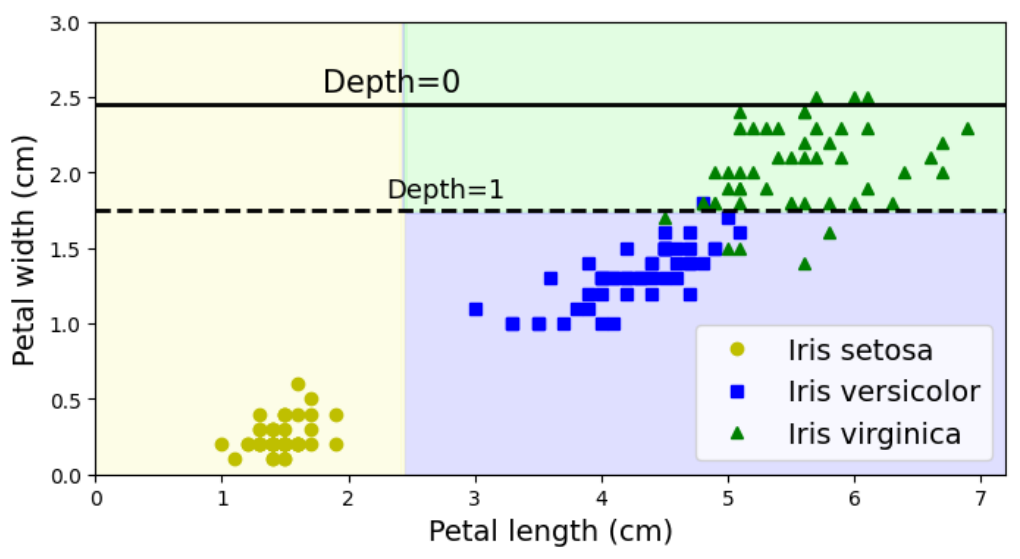
2. 높은 분산

훈련 데이터의 작은 변화에도 매우 민감함

```
tree_clf_tweaked = DecisionTreeClassifier(max_depth=2, random_state=40)
tree_clf_tweaked.fit(X_iris, y_iris)
```

random_state를 지정하지 않으면서 동일한 모델을 훈련시키면 다른 결과가 나온다.





높은 분산 문제는 여러 개의 결정트리를 동시에 훈련시킨 후 평균값을 활용하는 랜덤 포레스트 모델을 이용하면 해결할 수 있다.

WeTIE

Copyright ⓒ SeonHoYoo

1 앙상블 학습

앙상블 학습

여러 개의 모델을 훈련시킨 결과를 이용하여 기법

배깅 기법과 부스팅 기법

배깅 기법: 여러 개의 예측기를 독립적으로 학습시킨 후 모든 예측기들의 예측값들의 평균값을 최종 모델의 예측값으로 사용한다.

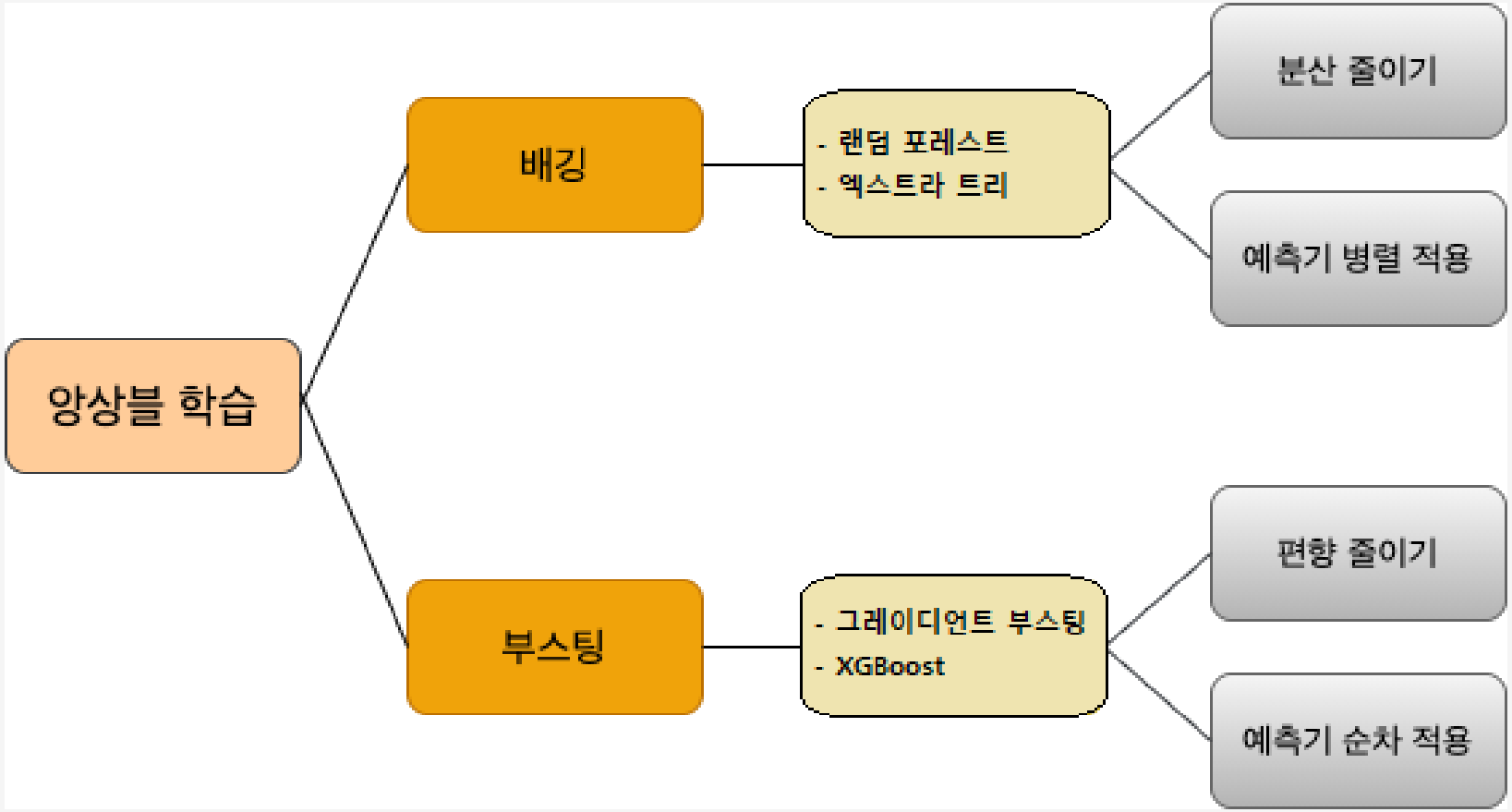
적은 분산을 갖는 모델을 구현한다.

부스팅 기법: 여러 개의 예측기를 순차적으로 훈련시킨 결과를 예측값으로 사용하여 보다 적은 편향을 갖는 모델을 구현한다.

Copyright ⓒ SeonHoYoo

1 앙상블 학습

앙상블 학습

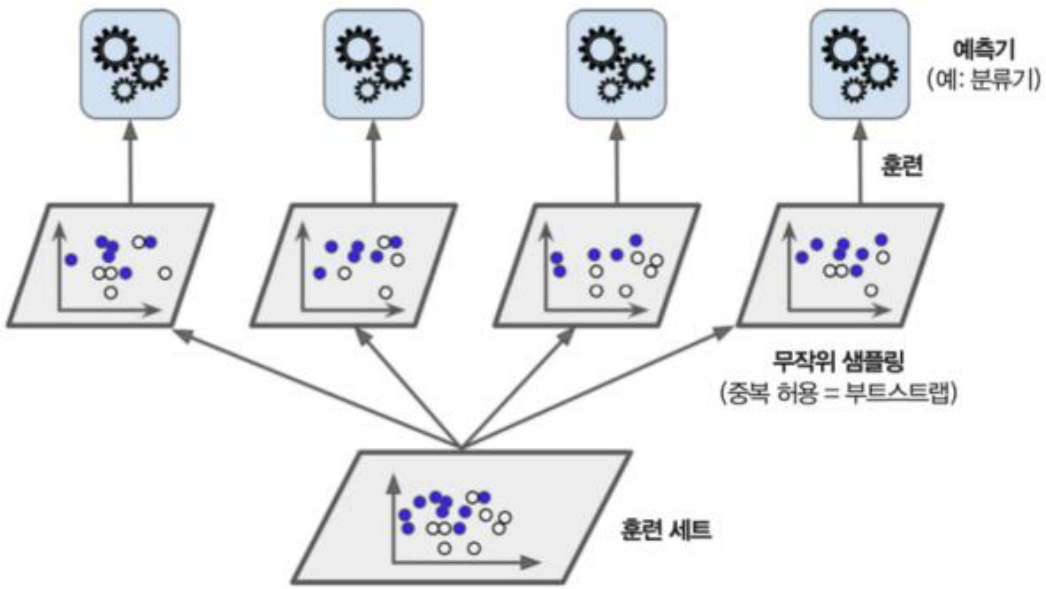


WeTIE

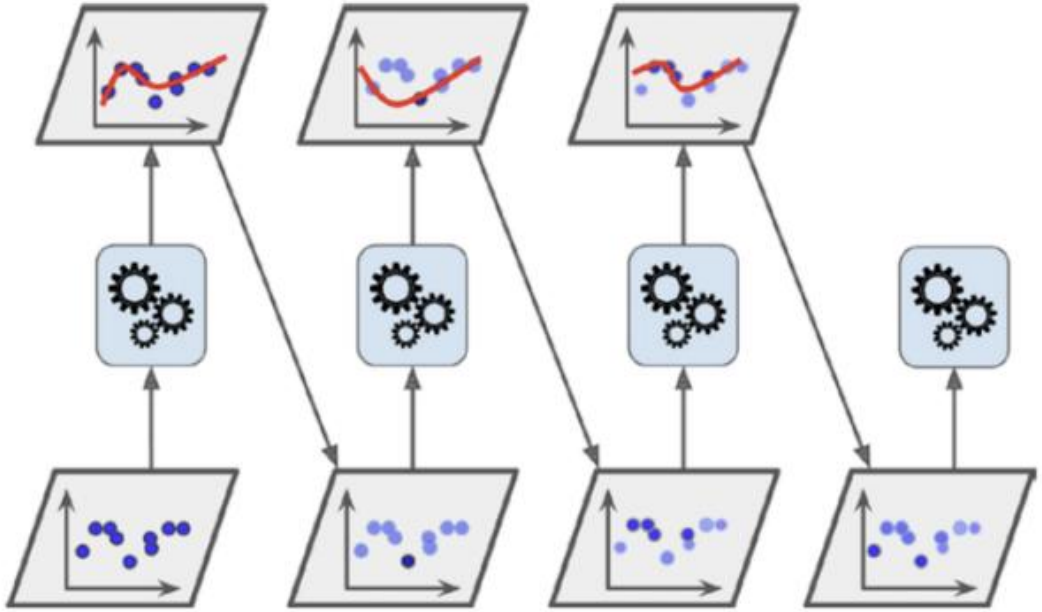
Copyright ⓒ SeonHoYoo

1 앙상블 학습

앙상블 학습



배깅



부스팅

Copyright ⓒ SeonHoYoo

WeTIE

1 앙상블 학습

캐글(Kaggle)과 앙상블 학습

캐글(Kaggle) 경진대회에서 가장 좋은 성능을 내는 3개의 모델은 다음과 같이 모두 앙상블 학습 모델이다.

- XGBoost

- 랜덤 포레스트

- 그레디언트 부스팅

앙상블 학습 모델은 특히 표 형식으로 저장될 수 있는 정형 데이터의 분석에 유용하다.

이미지, 오디오, 동영상, 자연어 등 비정형 데이터에 대한 분석은 딥러닝 기법이 좋은 성능을 보인다.

그럼에도 앙상블 학습 기법을 딥러닝 모델에 적용하여 모델의 성능을 끌어올릴 수 있다.

Copyright ⓒ SeonHoYoo

1 앙상블 학습

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 발생하며, 분산이 크면 과대적합 발생

Copyright ⓒ SeonHoYoo

1 앙상블 학습

편향과 분산의 트레이드오프

편향과 분산의 트레이드오프: 편향과 분산을 동시에 좋아지게 할 수는 없음

예제: 훈련셋 크기

훈련셋 크게: 편향은 커지고, 분산은 작아짐

훈련셋 크게: 편향은 작아지고, 분산은 커짐

예제: 특성 개수

특성 개수 작게: 편향은 커지고, 분산은 작아짐

특성 개수 크게: 편향을 작아지고, 분산은 커짐

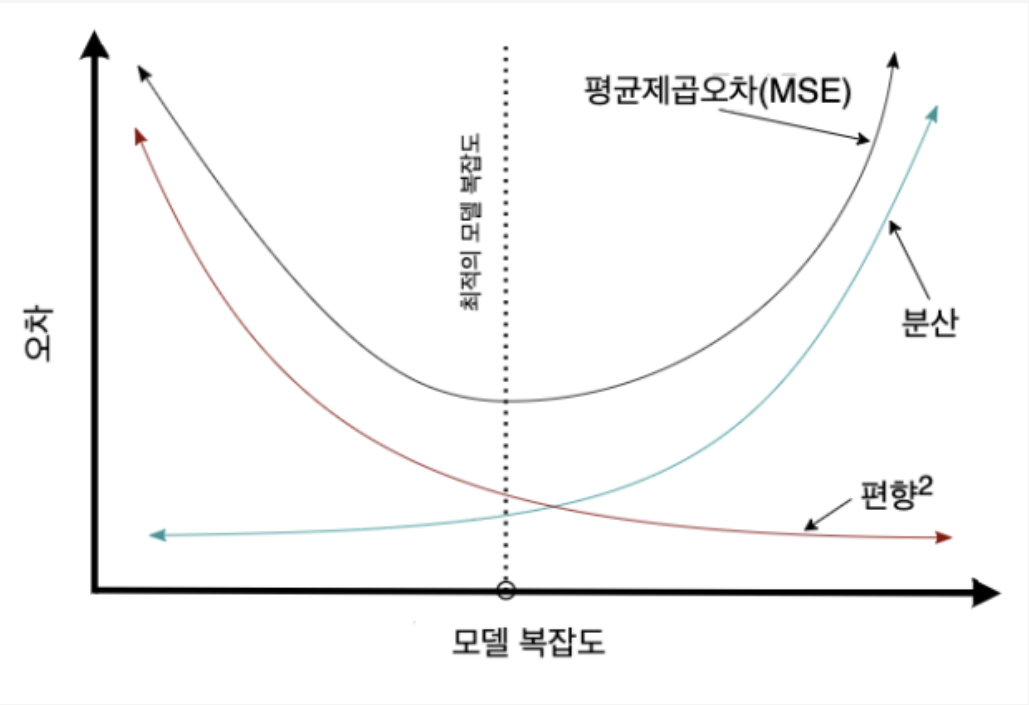
Copyright ⓒ SeonHoYoo

1 앙상블 학습

모델 복잡도, 편향, 분산의 관계

회귀모델의 평균제곱오차는 편향의 제곱과 분산의 합으로 근사됨

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



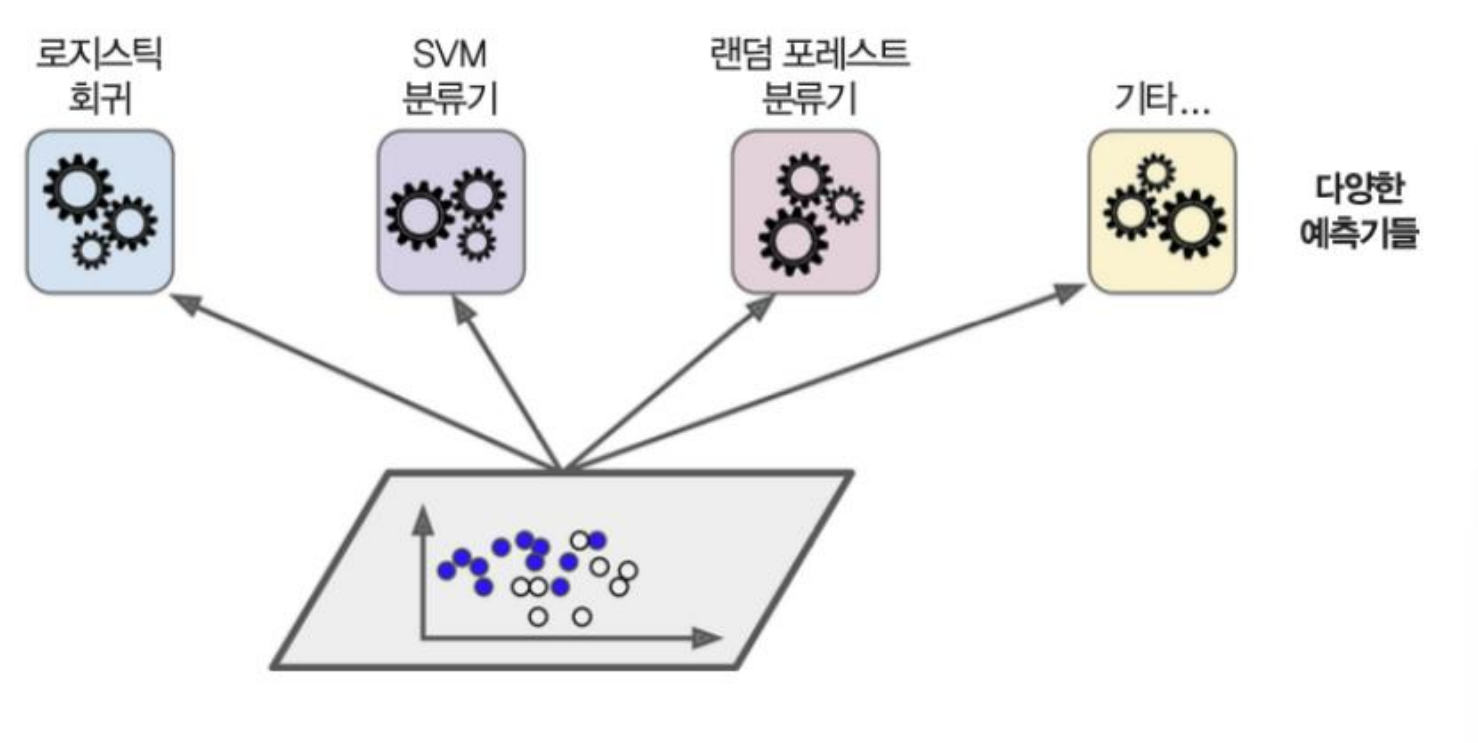
Copyright ⓒ SeonHoYoo

WeTIE

2 투표식 분류기

투표식 분류기

동일한 훈련셋에 대해 여러 종류의 분류기를 이용하여 앙상블 학습을 적용한 후 직접 또는 간접 투표를 통해 예측값을 결정

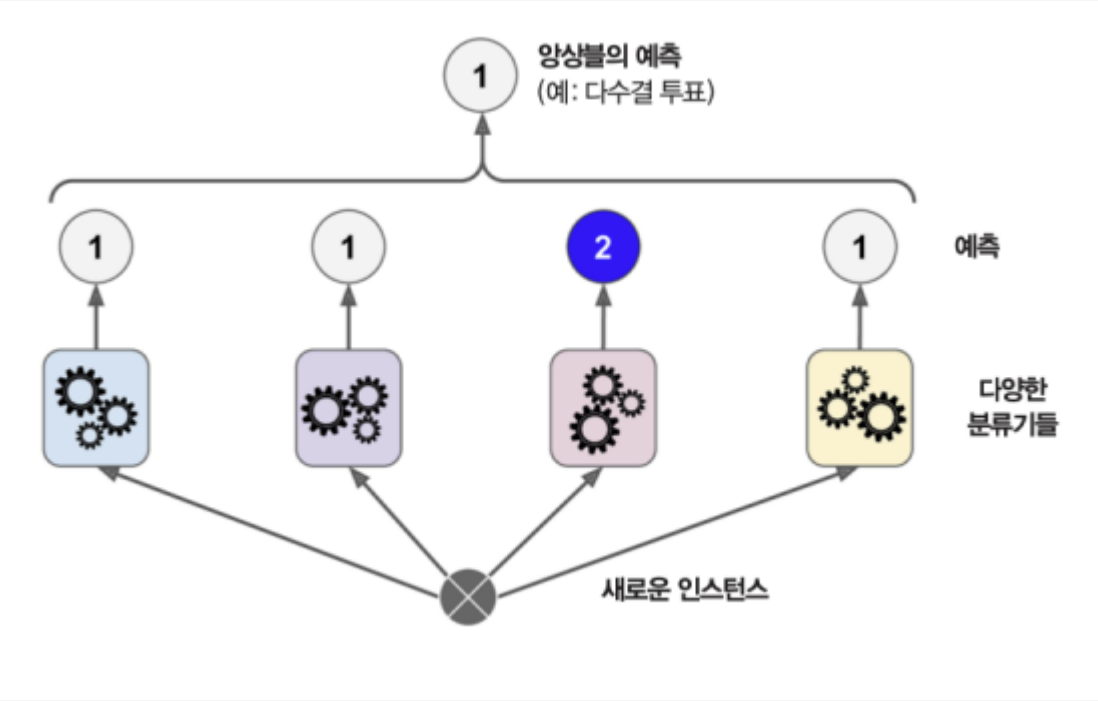


Copyright ⓒ SeonHoYoo

2 투표식 분류기

직접투표

앙상블에 포함된 예측기들의 예측값들의 다수로 결정



Copyright ⓒ SeonHoYoo

WeTIE

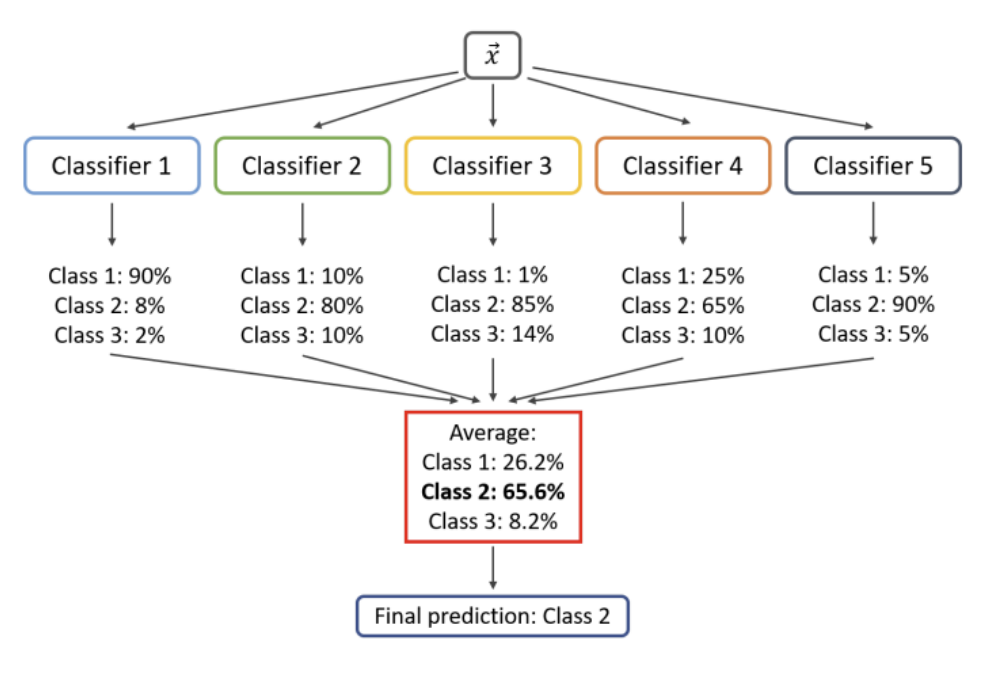
2 투표식 분류기

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 성능이 좋음



Copyright ⓒ SeonHoYoo

WeTIE

2 투표식 분류기

직접투표 vs. 간접투표

분류기 다섯개의 예측 확률이 아래와 같은 경우, 직접 투표 방식과 간접 투표 방식의 결과가 다르다.

직접 투표: 클래스 3으로 예측

간접 투표: 클래스 1로 예측

분류기	클래스1 예측 확률	클래스2 예측 확률	클래스3 예측 확률
분류기1	90%	8%	2%
분류기2	40%	7%	53%
분류기3	45%	9%	46%
분류기4	30%	20%	50%
분류기5	44%	16%	40%
합	249%	60%	191%

Copyright ⓒ SeonHoYoo

2 투표식 분류기

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 누적분포함수 활용

```
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 반환값.
    """
    return 1 - binom.cdf(int(n*0.4999), n, p)
```

WeTIE

Copyright ⓒ SeonHoYoo

2 투표식 분류기

투표식 분류기의 확률적 근거

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

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

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

ensemble_win_proba(1000, 0.51)	ensemble_win_proba(10000, 0.51)	ensemble_win_proba(10, 0.8)
0.7467502275563249	0.9777976478701103	0.9936306176

주의사항: 앙상블 학습에 포함된 각각의 모델이 서로 독립인 것을 전제로 한다.

동일한 데이터를 사용할 경우 독립성이 보장되지 않으며, 성능 하락이 발생할 수 있다.

독립성을 높이기 위해 다른 알고리즘을 사용하는 여러 모델을 사용해야 한다.

Copyright ⓒ SeonHoYoo

2 투표식 분류기

투표식 분류기 예제

voting='hard' 또는 voting='soft' : 직접 또는 간접 투표 방식 지정 하이퍼파라미터, 기본값은 'hard'

주의: SVC 모델 지정할 때, probability = True 사용해야 predict_proba() 메서드 지원

```
voting_clf = VotingClassifier(
    estimators=[
        ('lr', LogisticRegression(random_state=42)),
        ('rf', RandomForestClassifier(random_state=42)),
        ('svc', SVC(random_state=42))
    ]
)
```

Copyright ⓒ SeonHoYoo

3 배깅과 페이스팅

배깅과 페이스팅

여러 개의 동일 모델을 하나의 훈련셋의 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

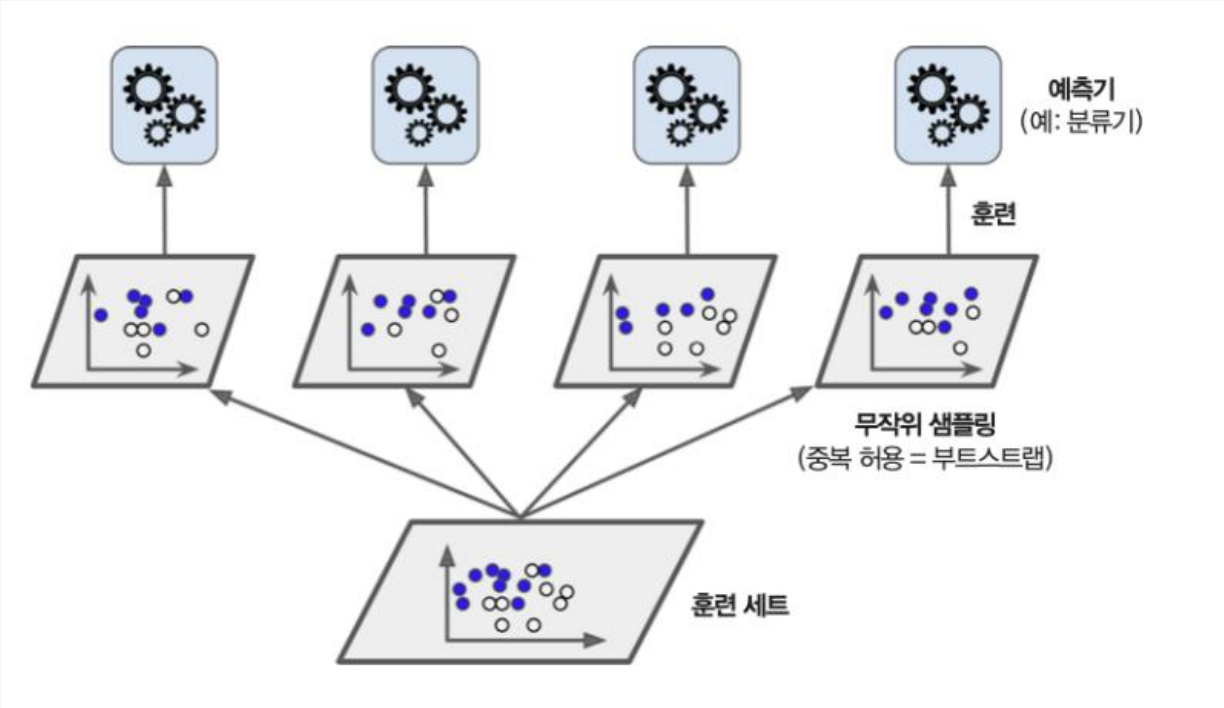
Copyright ⓒ SeonHoYoo

3 배깅과 페이스팅

배깅

배깅(bagging): bootstrap aggregation의 줄임말

부트스트래핑: 통계에서 중복허용 리샘플링을 의미함



Copyright ⓒ SeonHoYoo

3 배깅과 페이스팅

예측값

분류 모델: 직접 투표 방식 사용. 즉, 수집된 예측값들 중에서 최빈값을 선택

회귀 모델: 수집된 예측값들의 평균값 선택

Copyright ⓒ SeonHoYoo

3 배깅과 페이스팅

배깅/페이스팅 방식으로 훈련된 모델의 편향과 분산

개별 예측기의 경우에 비해 편향은 조금 커지거나 비슷하지만, 분산은 줄어든다.

배깅이 표본 샘플링의 다양성을 보다 많이 추가하기 때문이다.

배깅이 과대적합의 위험성을 줄여주어, 배깅 방식이 기본으로 사용된다.

개별 예측기: 배깅/페이스팅 방식으로 학습하면 전체 훈련셋을 대상으로 학습한 경우에 비해 편향이 커짐, 과소적합 위험성이 커짐

Copyright ⓒ SeonHoYoo

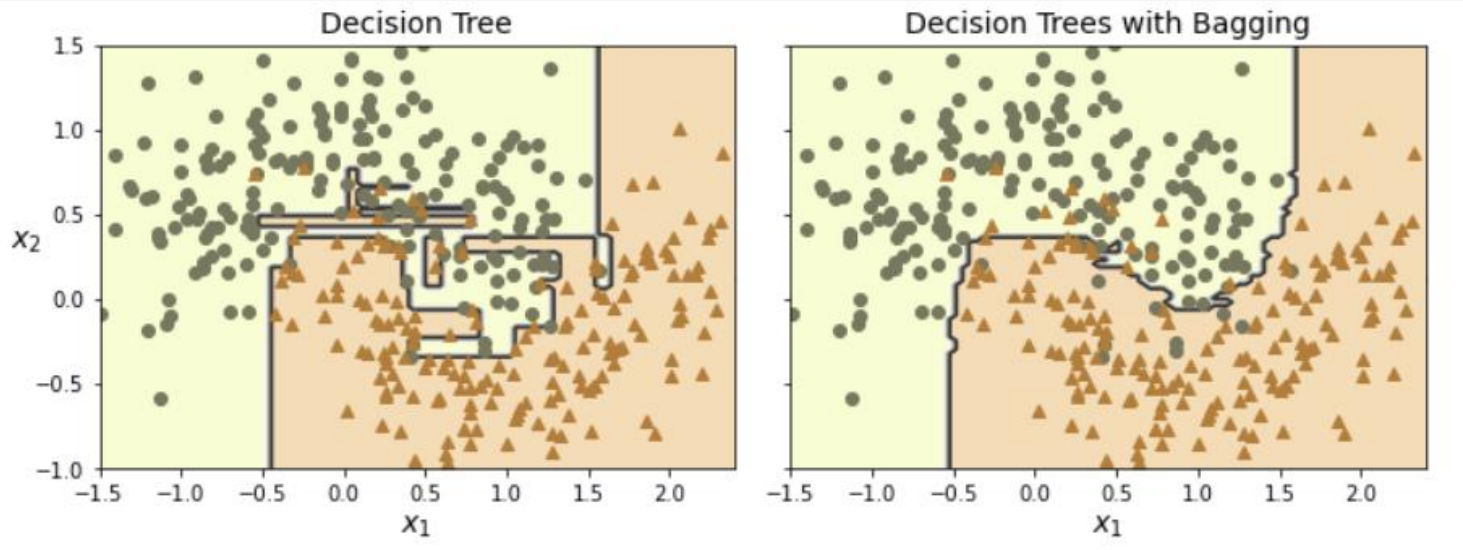
3 배깅과 페이스팅

사이킷런의 배깅/페이스팅

왼쪽 그림: 규제 없는 결정 트리 모델, 훈련셋에 과대적합됨

오른쪽 그림: 규제 max_samples = 100을 사용하는 결정트리 500개 + 배깅방식

```
BaggingClassifier(DecisionTreeClassifier(),
                  n_estimators=500,
                  max_samples=100, random_state=42)
```



WeTIE

Copyright ⓒ SeonHoYoo

3 배깅과 페이스팅

OOB 평가

oob(out-of-bag) 샘플: 배깅 모델에 포함된 예측기로부터 선택되지 않은 훈련 샘플, 평균적으로 훈련셋의 약 37%

oob 평가: 각각의 샘플에 대해 해당 샘플을 훈련에 사용하지 않은 모델들의 예측값을 이용하여 앙상블 학습 모델을 검증하는 기법

Copyright ⓒ SeonHoYoo

3 배깅과 페이스팅

OOB 평가

예제

6개의 훈련 샘플로 구성된 훈련셋에 대해 5개의 결정트리 모델을 배깅 기법으로 적용

표에 사용된 점수는 중복으로 뽑힌 횟수

각 샘플은 위치 인덱스로 구분

	훈련 샘플(총 6개)	OOB 평가 샘플
결정트리1	1, 1, 0, 2, 1, 1	2번
결정트리2	3, 0, 1, 0, 2, 0	1번, 3번, 5번
결정트리3	0, 1, 3, 1, 0, 1	0번, 4번
결정트리4	0, 0, 2, 0, 2, 2	0번, 1번, 3번
결정트리5	2, 0, 0, 1, 3, 0	1번, 2번, 5번

앙상블 학습에 사용된 모델

0번 샘플: 결정트리3, 결정트리4
1번 샘플: 결정트리2, 결정트리4, 결정트리5
2번 샘플: 결정트리1, 결정트리5
3번 샘플: 결정트리2, 결정트리4
4번 샘플: 결정트리3
5번 샘플: 결정트리2, 결정트리5

Copyright ⓒ SeonHoYoo

WeTIE

3 배깅과 페이스팅

OOB 평가

예제: BaggingClassifier를 이용한 oob 평가

BaggingClassifier의 oob_score = True 옵션

훈련 종료 후 oob 평가 자동 실행

평가점수는 oob_score_ 속성에 저장

테스트세트에 대한 정확도와 비슷한 결과가 나옴

```
BaggingClassifier(DecisionTreeClassifier(),
                  n_estimators=500,
                  oob_score=True, random_state=42)
```

Copyright ⓒ SeonHoYoo

4 랜덤 패치와 랜덤 서브스페이스

랜덤 패치와 랜덤 서브스페이스

BaggingClassifier는 특성에 대한 샘플링 기능 지원: max_features, bootstrap_features

이미지 등 매우 높은 차원의 데이터셋을 다룰 때 유용

더 다양한 예측기를 만들며, 편향이 커지지만 분산은 낮아짐

Copyright ⓒ SeonHoYoo

4 랜덤 패치와 랜덤 서브스페이스

max_features

학습에 사용할 특성 수 지정

특성 선택은 무작위

정수의 경우: 지정된 수만큼 특성 선택

부동소수점인 경우: 지정된 비율만큼 특성 선택

max_samples와 유사 기능 수행

Copyright ⓒ SeonHoYoo

4 랜덤 패치와 랜덤 서브스페이스

bootstrap_features

학습에 사용할 특성을 선택할 때 중복 허용 여부 지정

기본값은 False로 중복을 허용하지 않음

Bootstrap과 유사 기능 수행

Copyright ⓒ SeonHoYoo

4 랜덤 패치와 랜덤 서브스페이스

랜덤 패치 기법

훈련 샘플과 훈련 특성 모두를 대상으로 중복을 허용하며 임의의 샘플 수와 임의의 특성 수 만큼을 샘플링해서 학습하는 기법

```
BaggingClassifier(DecisionTreeClassifier(), n_estimators=500,
                  max_samples=0.75, bootstrap=True,
                  max_features=0.5, bootstrap_features=True,
                  random_state=42)
```

Copyright ⓒ SeonHoYoo

4 랜덤 패치와 랜덤 서브스페이스

랜덤 서브스페이스 기법

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

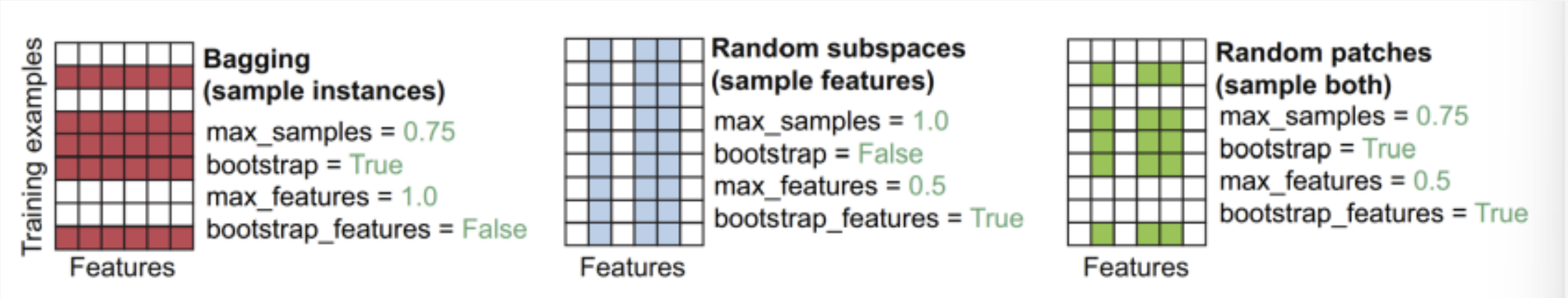
샘플에 대해: bootstrap = False이고, max_samples = 1.0

특성에 대해: bootstrap_features = True 또는 max_features는 1.0보다 작게

```
BaggingClassifier(DecisionTreeClassifier(), n_estimators=500,
                  max_samples=1.0, bootstrap=False,
                  max_features=0.5, bootstrap_features=True,
                  random_state=42)
```

Copyright ⓒ SeonHoYoo

4 랜덤 패치와 랜덤 서브스페이스



Copyright ⓒ SeonHoYoo

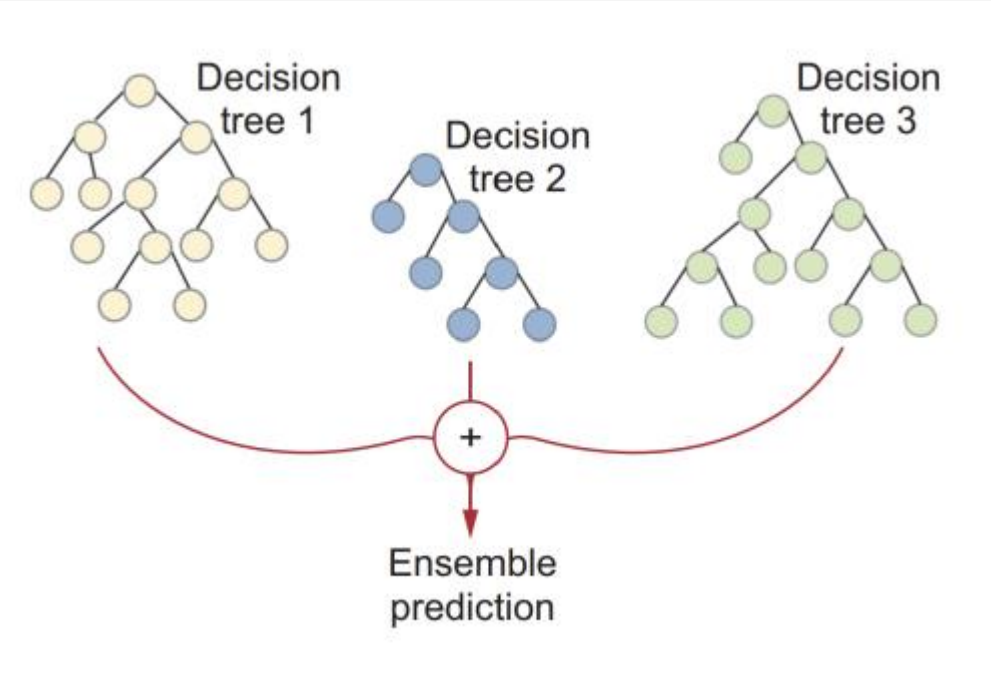
5 랜덤 포레스트

랜덤 포레스트

배깅/페이스팅 방법을 적용한 결정트리의 앙상블을 최적화한 모델

분류 용도: RandomForestClassifier

회귀 용도: RandomForestRegressor




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

```
BaggingClassifier(DecisionTreeClassifier(max_features="sqrt",
                                         max_leaf_nodes=16),
                  n_estimators=500,
                  n_jobs=-1, random_state=42)
```

WeTIE

Copyright ⓒ SeonHoYoo

5 랜덤 포레스트

랜덤 포레스트 하이퍼파라미터

BaggingClassifier와 DecisionTreeClassifier의 옵션을 거의 모두 가짐

max_features = 'auto'가 RandomForestClassifier의 기본값임, 특성 선택에 무작위성이 사용됨

선택되는 특성 수: 약 $\sqrt{}$(전체 특성 수)

결정트리에 비해 편향은 크고, 분산은 낮게

Copyright ⓒ SeonHoYoo

5 랜덤 포레스트

엑스트라 트리

익스트라 랜덤 트리(extremely randomized tree) 앙상블이라고 불림

무작위로 선택된 일부 특성에 대해 특성 임계값도 무작위로 몇 개 선택한 후 그 중에서 최적 선택

일반적인 랜덤포레스트보다 속도가 훨씬 빠름

이 방식을 사용하면 편향은 늘고, 분산은 줄어듦

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

Copyright ⓒ SeonHoYoo

5 랜덤 포레스트

특성 중요도

해당 특성을 사용한 마디가 평균적으로 불순도를 얼마나 감소시키는지를 측정

즉, 불순도를 많이 줄이는 특성(feature)은 그만큼 중요도가 커짐

사이킷런의 RandomForestClassifier

특성별 상대적 중요도를 측정해서 중요도의 전체 합이 1이 되도록 함

feature_importances_ 속성에 저장됨

Copyright ⓒ SeonHoYoo

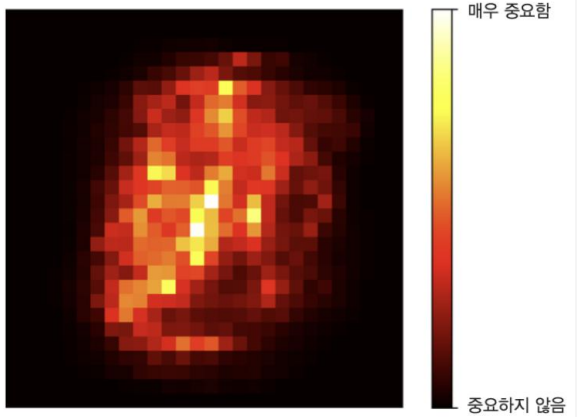
5 랜덤 포레스트

특성 중요도

예제: 붓꽃 데이터셋

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

예제: MNIST



Copyright ⓒ SeonHoYoo

6 부스팅

부스팅

부스팅(boosting): 성능이 약한 모델을 순차적으로 보다 강한 성능의 모델로 만들어 가는 기법

순차적으로 이전 학습기의 결과를 바탕으로 예측값의 정확도를 조금씩 높혀감 (편향을 줄여나감)

부스팅 기법을 사용하는 대표적인 모델

- 에이다부스트(AdaBoost)
- 그레디언트 부스팅(Gradient Boosting)
- XGBoost

Copyright ⓒ SeonHoYoo

6 부스팅

그레디언트 부스팅

이전 모델에 의해 생성된 잔차를 보정하도록 새로운 예측기 훈련

잔차: 예측값과 실제값 사이의 오차

모델은 결정트리 사용

결정트리 모델을 연속적으로 훈련시킴

분류 모델: GradientBoostingClassifier

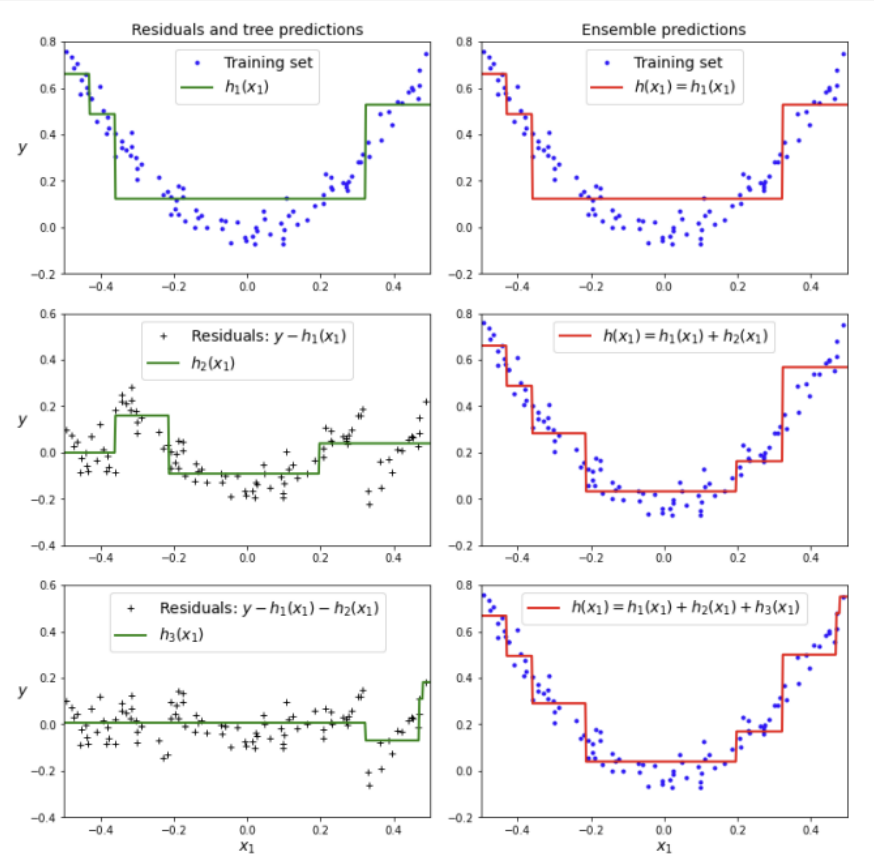
회귀 모델: GradientBoostingRegressor

Copyright ⓒ SeonHoYoo

6 부스팅

그레디언트 부스팅

```
gbrt = GradientBoostingRegressor(max_depth=2, n_estimators=3, learning_rate=1.0, random_state=42)
```



Copyright ⓒ SeonHoYoo

WeTIE

6 부스팅

학습률과 수축 규제

learning_rate

훈련된 결정 트리 모델 각각이 최종 예측값을 계산할 때의 기여도 결정

경사하강법의 학습률과 다르지만 최종 모델에 수렴하는 속도를 조절한다는 차원에서 동일한 기능 수행

수축 규제

훈련에 사용되는 각 모델의 기여도를 줄이는 방식으로 훈련 규제

학습률을 낮게 정하면 많은 수의 결정트리가 필요하지만 성능은 일반적으로 좋아짐

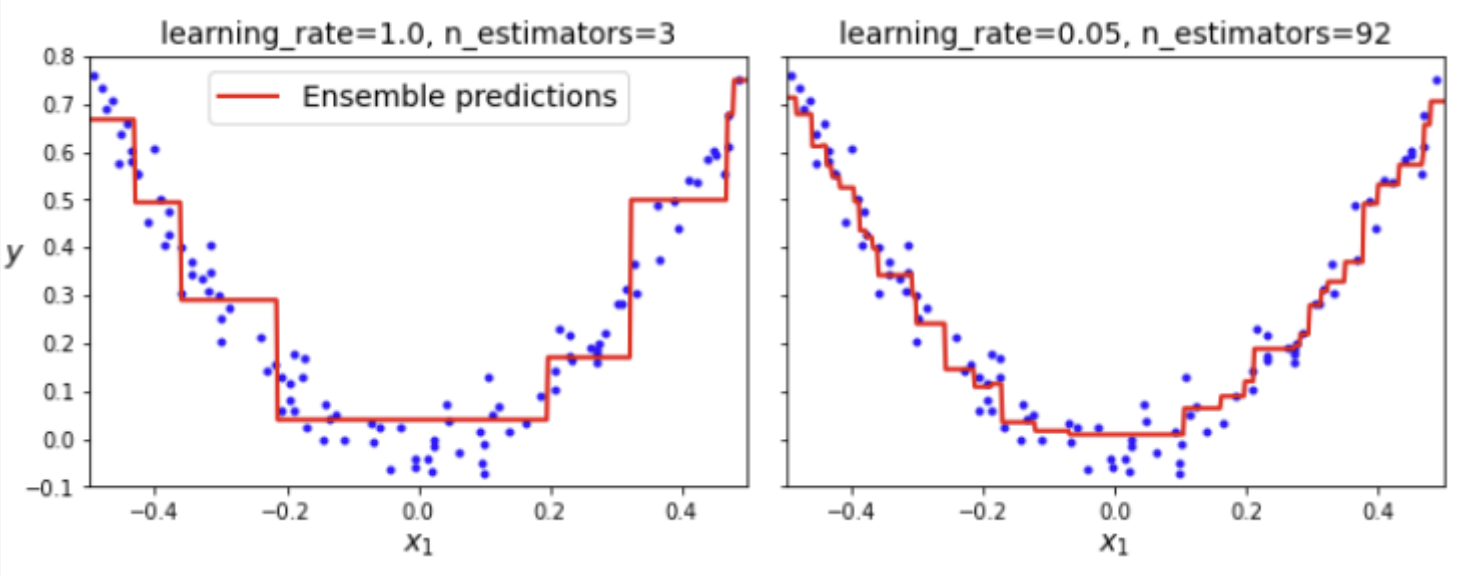
Copyright ⓒ SeonHoYoo

6 부스팅

수축 규제

왼쪽: 학습률 = 1, 3개의 결정트리 학습, 과소적합

오른쪽: 학습률 = 0.05, 92개의 결정트리 학습, 적절한 모델 생성



Copyright ⓒ SeonHoYoo

WeTIE

6 부스팅

조기 종료

n_iter_no_change 하이퍼파라미터: 조기 종료 기법 지원

원래 500번 연속 결정트리를 훈련시켜야 하지만 검증셋에 대해 연속적으로 10번 제대로 개선되지 못하는 경우 훈련 자동 종료

```
GradientBoostingRegressor(max_depth=2,
                          learning_rate=0.05,
                          n_estimators=500,
                          n_iter_no_change=10, random_state=42)
```

n_iter_no_change = None이 기본값이지만 임의의 정수로 지정되면 10% 정도의 검증셋을 매 결정트리 훈련마다 사용

tol = 0.0001 허용오차 이하로 성능이 변하지 않는 경우 좋아지지 않는다고 판단

Copyright ⓒ SeonHoYoo

6 부스팅

확률적 그레디언트 부스팅

subsample 하이퍼파라미터

각 결정트리가 훈련에 사용할 훈련 샘플의 비율을 지정하여 학습

기본값은 1

subsample = 0.25 등 비율을 지정하면 지정한 비율만큼만 훈련에 사용

훈련 속도 빨라짐

편향이 높아지지만, 분산이 낮아짐

Copyright ⓒ SeonHoYoo

6 부스팅

히스토그램 그레디언트 부스팅

대용량 데이터셋을 이용하여 훈련해야 하는 경우 사용

훈련 샘플의 특성값을 max_bins 개의 구간으로 분류

모델의 정확도는 떨어지며, 경우에 따라 과대적합을 방지하는 규제 역할 수행, 과소적합 발생 가능

HistGradientBoostRegressor: 회귀 모델

HistGradientBoostingClassifier: 분류 모델

GradientBoostingRegressor, GradientBoostingClassifier 등과 유사하게 작동

Copyright ⓒ SeonHoYoo

6 부스팅

XGBoost

Extreme Gradient Boosting

그레디언트 부스팅과의 차이점

결정트리 학습에 사용되는 노드 분할을 통해 낮춰야 하는 비용함수가 다름

불순도 대신 mse, logloss 등 모델 훈련의 목적에 맞는 손실 함수 사용

생성되는 결정트리의 복잡도가 비용함수에 포함되어 최종적으로 생성되는 모델에 사용되는 결정트리의 복잡도를 가능한 낮추도록 유도

빠른 속도, 확장성

결측치 포함 데이터 처리 가능

사이킷런 라이브러리에 포함되지 않아 pip 또는 conda를 이용하여 설치해야 함 (구글 코랩에선 이미 설치됨) – pip install xgboost

XGBRegressor, XGBClassifier 모델 지원

Copyright ⓒ SeonHoYoo

E.O.D

7주차. 앙상블 학습과 랜덤 포레스트

Copyright ⓒ SeonHoYoo