TRƯỜNG CNTT & TRUYỀN THÔNG KHOA KHOA HỌC MÁY TÍNH

PHƯƠNG PHÁP TẬP HỢP MÔ HÌNH ENSEMBLE-BASED METHODS

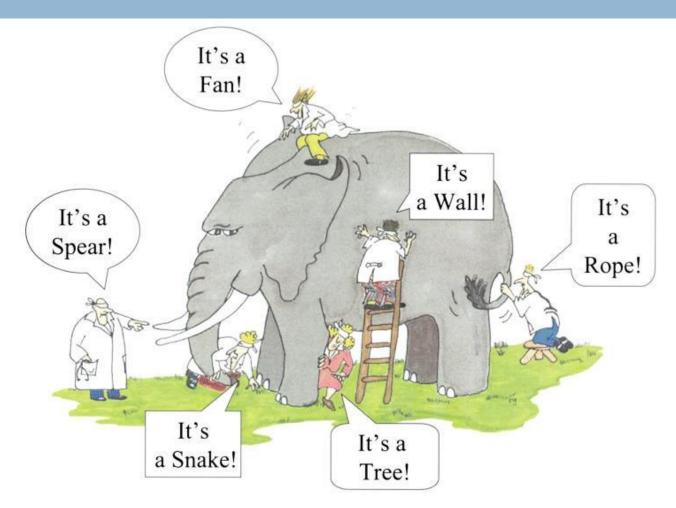
Giáo viên giảng dạy:

TS. TRÀN NGUYỄN MINH THƯ

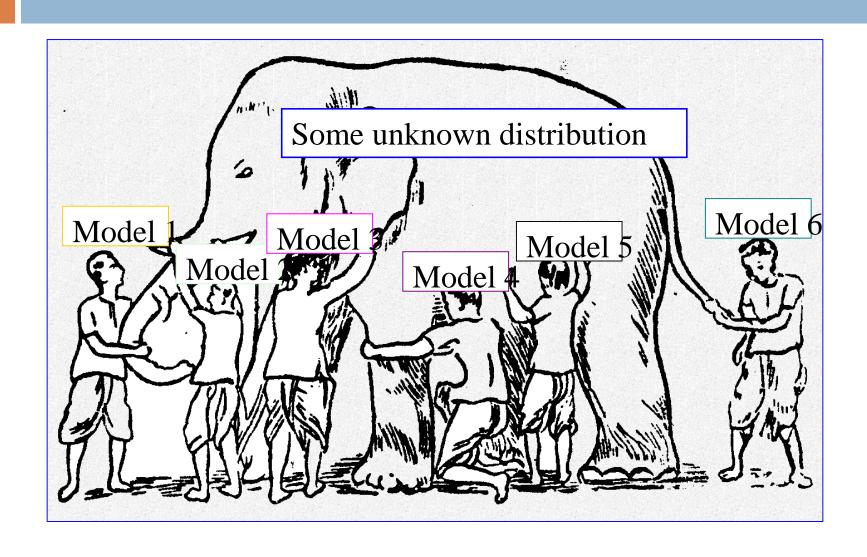
tnmthu@cit.ctu.edu.vn

Nội dung

- □ Giới thiệu về phương pháp tập hợp mô hình
- □ Tương quan giữa Bias và Variance
- □ Bagging, Random forests, Boosting
- □ Kết luận và hướng phát triển



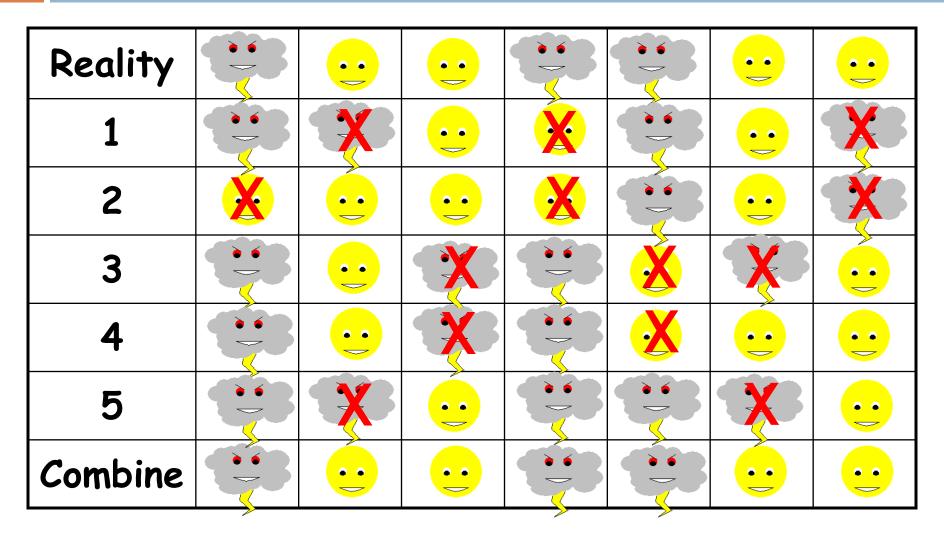
https://miro.medium.com/max/1400/1*R-1jRqX1jT2x5ciVYq02og.png



Phương pháp tập hợp mô hình kết hợp nhiều mô hình cơ sở dựa trên tập học nhằm cải thiện độ chính xác của giải thuật dự đoán.

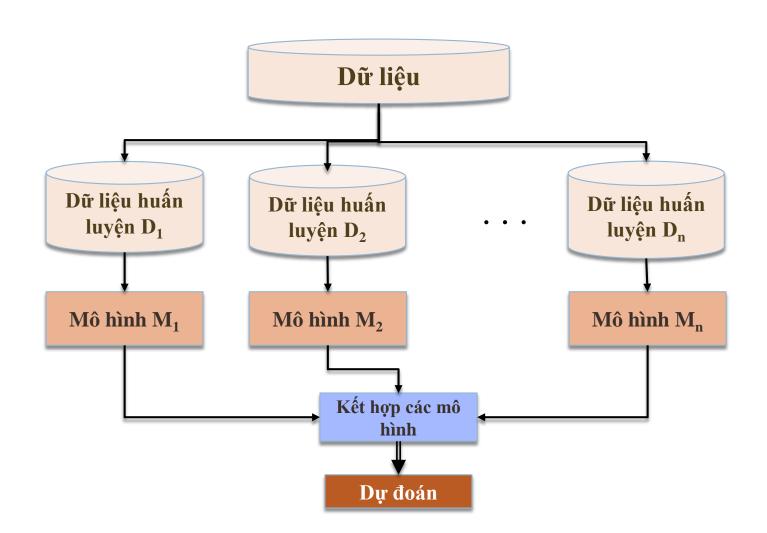
□ **Kết hợp các mô hình phân loại yếu** (weak learner/classifier) thành một mô hình phân loại mạnh (strong classifier)

Ví dụ: Đưa ra dự đoán dựa vào 5 mô hình



Cho kết quả tốt, tuy nhiên không thể diễn dịch kết quả sinh ra

Ung dụng thành công trong nhiều lĩnh vực như tìm kiếm thông tin, nhận dạng, phân tích dữ liệu,..

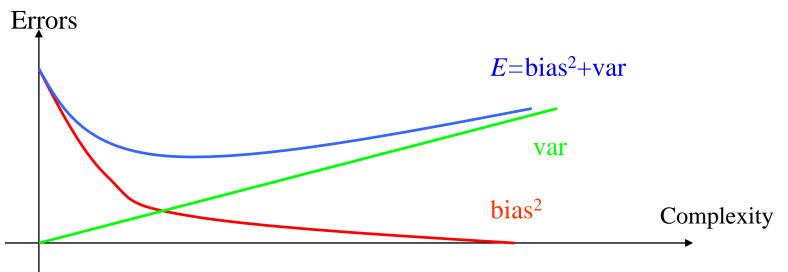


- Phương pháp ensemble-based
 - Xây dựng tập hợp các mô hình cơ sở dựa trên tập học
 - Tăng hiệu quả của mô hình dựa trên cơ sở giảm lỗi bias/variance
 - Giải thuật cơ sở cho các mô hình con: cây quyết định, SVM, naive Bayes, ...
- Một số giải thuật:
 - Bagging (Breiman, 1996)
 - Boosting (Freund & Schapire, 1995)
 - Random forests (Breiman, 2001)

Khi phân tích thành phần lỗi của giải thuật học, Breiman đã chỉ ra lỗi của giải thuật (E) gồm 2 thành phần là Bias và Variance

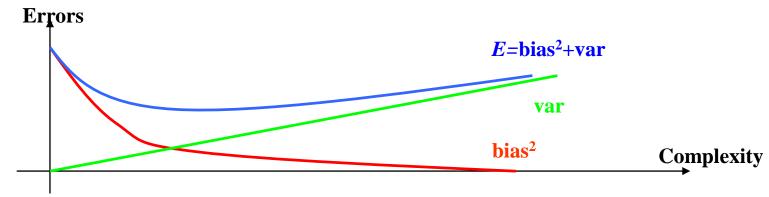
$$E = bias^2 + var$$

- bias : lỗi của mô hình thành phần lỗi độc lập với mẫu dữ liệu học
- variance : thành phần lỗi do biến động liên quan đến sự ngẫu nhiên của tập học



Bias và variance

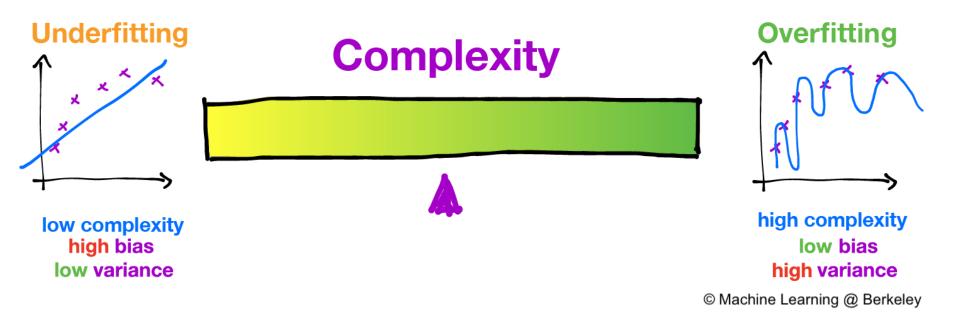
- "Underfitting": mô hình là quá "đơn giản" để đại diện cho tất cả đặc điểm của dữ liệu học
 - Bias cao và variance (phương sai) thấp
 - Lỗi quá trình huấn luyện và kiểm tra đều cao



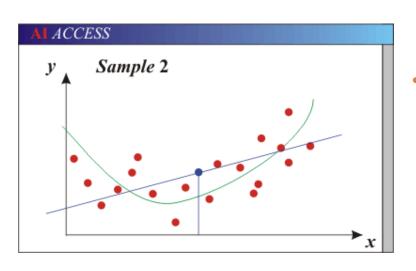
- "Overfitting": mô hình là quá "phức tạp" và phù hợp với duy nhất đặc điểm của dữ liệu đang học, không thích hợp khi gặp dữ liệu nhiễu.
 - Bias thấp và variance (phương sai) cao
 - Lỗi quá trình huấn luyện thấp và kiểm tra lỗi cao

Bias và variance

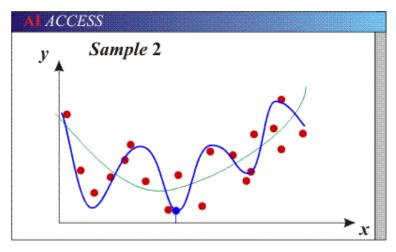
- □ "Underfitting học không thuộc bài"
- □ "Overfitting học vẹt":



Bias và variance



Các mô hình không chính xác vì có **quá ít tham số** - lỗi Bias lớn (mô hình không đủ linh hoạt)



Các mô hình không chính xác vì có **quá nhiều tham số -** *lỗi variance lớn* (quá nhạy với mẫu học)

- □ Về bản chất, các phương pháp tập hợp mô hình thường làm **giảm lỗi bias và/hoặc variance** của các giải thuật máy học.
- Lỗi *bias* là lỗi liên quan đến mô hình (bộ phân lớp/dự đoán) mà không liên quan đến dữ liệu được dùng để huấn luyện
- □ Lỗi *variance* là lỗi do tính biến thiên của mô hình so với tính ngẫu nhiên của các mẫu dữ liệu học (data samples).

Averaging technique

- averaging technique
- xây dựng tập hợp các mô hình cơ sở độc lập nhau
- kết hợp sự phân loại của các mô hình
- giảm variance
- bagging và random forests

Boosting technique

- xây dựng tập hợp các mô hình cơ sở tuần tự
- Tập trung cải tiến lỗi sinh ra từ các mô hình trước
- giảm bias
- AdaBoost và Arcing

Averaging technique

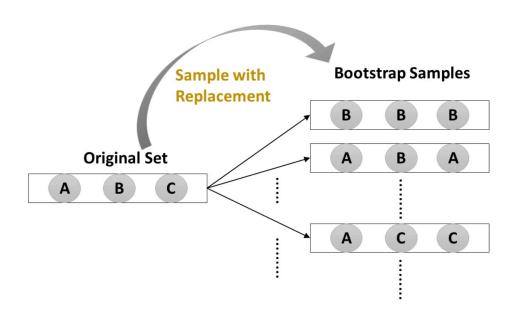
Averaging technique - Bagging (Breiman, 1996)

- Bootstrap AGGregatING (Breiman, 1996)
 - Bootstrap???
 - Từ tập dữ liệu **D** ban đầu có **m** phần tử, người ta thực hiện lấy mẫu có hoàn lại **m** phần tử từ tập **D**, thu được tập **B** (gọi là bootstrap)

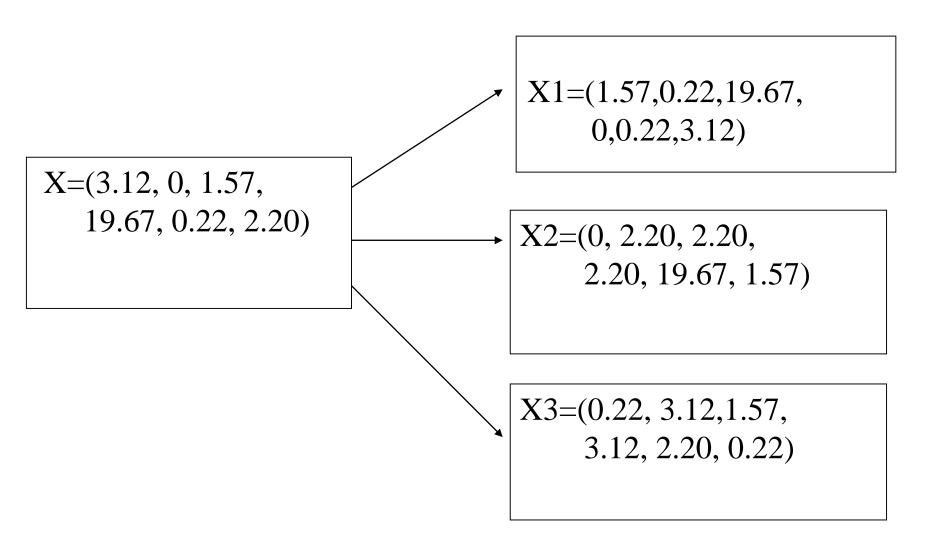
X=(3.12, 0, 1.57, 19.67, 0.22, 2.20)

Averaging technique - Bagging (Breiman, 1996)

- Bootstrap AGGregatING (Breiman, 1996)
 - Bootstrap???



Boostrap - Từ tập dữ liệu D ban đầu có m phần tử, người ta thực hiện lấy mẫu có hoàn lại m phần tử từ tập D, thu được tập B (gọi là bootstrap)

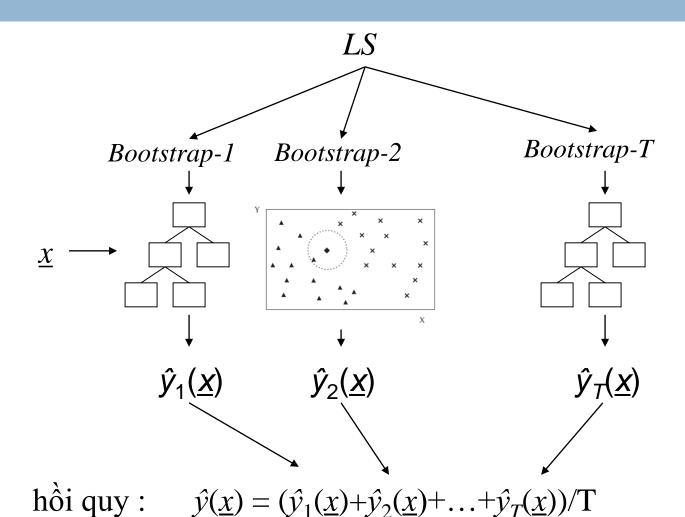


Boostrap – lấy mẫu có hoàn lại

Original Data	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Bagging (Round 1)	7	8	10	8	2	5	10	10	5	9
Bagging (Round 2)	1	4	9	1	2	3	2	7	3	2
Bagging (Round 3)	1	8	5	10	5	5	9	6	3	7

- Mỗi mẫu được lấy có xác suất 1/N
- □ Với mỗi mẫu không được chọn sau N lần,
 thì xác suất là (1 1/N)^N (Khi N lớn thì xác suất này gần bằng 1/e)
- □ Với mỗi mẫu được chọn, sau N lần thì xác suất là 1 1/e = 0.632 => Lấy mẫu Bootstrap chứa 63% dữ liệu gốc

Bagging (Breiman, 1996)



phân loại : $\hat{y}(\underline{x}) = \text{bình chọn số đông } \{\hat{y}_1(\underline{x}), \dots, \hat{y}_T(\underline{x})\}$

21

Bagging (Breiman, 1996)

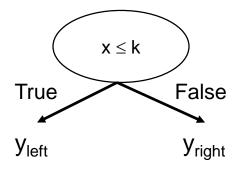
Bootstrap AGGregatING

- từ tập học LS (learning set) có N phần tử
- xây dựng tập hợp T mô hình cơ sở độc lập nhau
- mô hình thứ i được xây dựng trên tập mẫu bootstrap
- 1 bootstrap : lấy mẫu N phần tử có hoàn lại từ tập LS
- khi phân loại : sử dụng luật bình chọn số đông (majority vote)
- hồi quy: tính giá trị trung bình của dự đoán của các mô hình

Xét tập dữ liệu sau với thuộc tính "x" và nhãn dự đoán "y"

X	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5	0.6	0.7	0.8	0.9	1
у	1	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	1

- Nhãn dự đoán dựa vào luật:
 - \blacksquare x<=k hay x>k
 - Diễm phân hoạch dựa trên giá trị entropy



Bagging Round 1:

X	0.1	0.2	0.2	0.3	0.4	0.4	0.5	0.6	0.9	0.9
у	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1

$$x \le 0.35 \Rightarrow y = 1$$

 $x > 0.35 \Rightarrow y = -1$

							-					
	Baggir	ng Rour	nd 1:									
	X	0.1	0.2	0.2	0.3	0.4	0.4	0.5	0.6	0.9	0.9	$x <= 0.35 \Rightarrow y = 1$
	У	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	$x > 0.35 \implies y = -1$
_	Baggir	ng Rour	nd 2:									
	X	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5	0.5	0.9	1	1	1	$x <= 0.7 \Rightarrow y = 1$
	у	1	1	1	-1	-1	-1	1	1	1	1	$x > 0.7 \implies y = 1$
	Baggir	ng Rour	nd 3:									
	X	0.1	0.2	0.3	0.4	0.4	0.5	0.7	0.7	8.0	0.9	$x <= 0.35 \implies y = 1$
	у	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	1	1	$x > 0.35 \implies y = -1$
	Baggir	ng Rour	nd 4:									
	X	0.1	0.1	0.2	0.4	0.4	0.5	0.5	0.7	8.0	0.9	$x <= 0.3 \Rightarrow y = 1$
	у	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	1	1	$x > 0.3 \implies y = -1$
		_										
Bagging Round 5:												
	X	0.1	0.1	0.2	0.5	0.6	0.6	0.6	1	1	1	$x <= 0.35 \implies y = 1$
	у	1	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	$x > 0.35 \implies y = -1$

						-					
Baggir	ng Roun	nd 6:									
Х	0.2	0.4	0.5	0.6	0.7	0.7	0.7	8.0	0.9	1	$x <= 0.75 \rightarrow y = -1$
У	1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	$x > 0.75 \Rightarrow y = 1$
_											•
Baggir	ng Roun	nd 7:									
X	0.1	0.4	0.4	0.6	0.7	8.0	0.9	0.9	0.9	1	$x <= 0.75 \Rightarrow y = -1$
У	1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1	1	$x > 0.75 \implies y = 1$
_											
Baggir	ng Roun	nd 8:									
X	0.1	0.2	0.5	0.5	0.5	0.7	0.7	0.8	0.9	1	$x \le 0.75 \Rightarrow y = -1$
у	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	$x > 0.75 \implies y = 1$
										_	•
Baggir	ng Roun	nd 9:									
X	0.1	0.3	0.4	0.4	0.6	0.7	0.7	0.8	1	1	$x <= 0.75 \Rightarrow y = -1$
У	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	$x > 0.75 \implies y = 1$
										-	!
Baggir	Bagging Round 10:										
X	0.1	0.1	0.1	0.1	0.3	0.3	8.0	8.0	0.9	0.9	$x <= 0.05 \Rightarrow y = 1$
	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	$x > 0.05 \rightarrow v = 1$

□ Kết quả tổng của 10 lần lặp:

Round	Split Point	Left Class	Right Class
1	0.35	1	-1
2	0.7	1	1
3	0.35	1	-1
4	0.3	1	-1
5	0.35	1	-1
6	0.75	-1	1
7	0.75	-1	1
8	0.75	-1	1
9	0.75	-1	1
10	0.05	1	1

 Sử dụng "majority vote" để xác định lớp của bộ phân loại tổng hợp

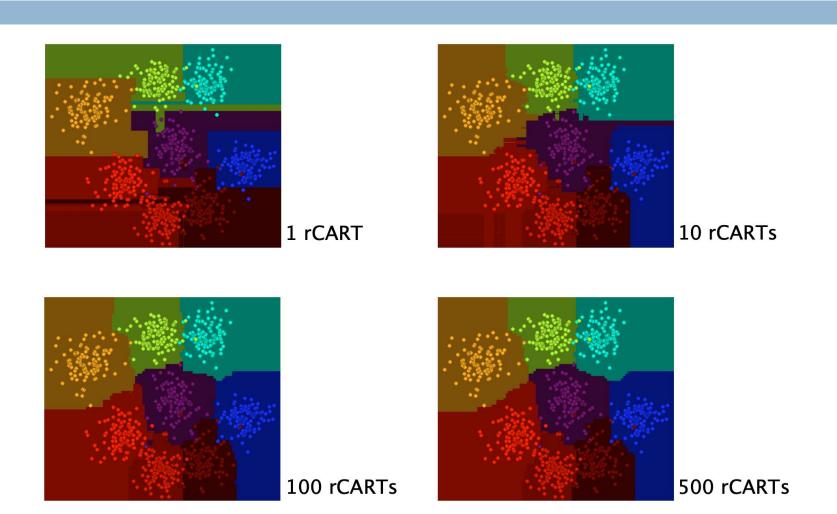
Round	Split Point	Left Class	Right Class
1	0.35	1	-1
2	0.7	1	1
3	0.35	1	-1
4	0.3	1	-1
5	0.35	1	-1
6	0.75	-1	1
7	0.75	-1	1
8	0.75	-1	1
9	0.75	-1	1
10	0.05	1	1

Round	x=0.1	x=0.2	x=0.3	x=0.4	x=0.5	x=0.6	x=0.7	x=0.8	x=0.9	x=1.0
1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1
2	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
3	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1
4	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1
5	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1
6	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	1	1	1
7	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	1	1	1
8	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	1	1	1
9	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	1	1	1
10	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
Sum	2	2	2	-6	-6	-6	-6	2	2	2
Sign	1	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	1

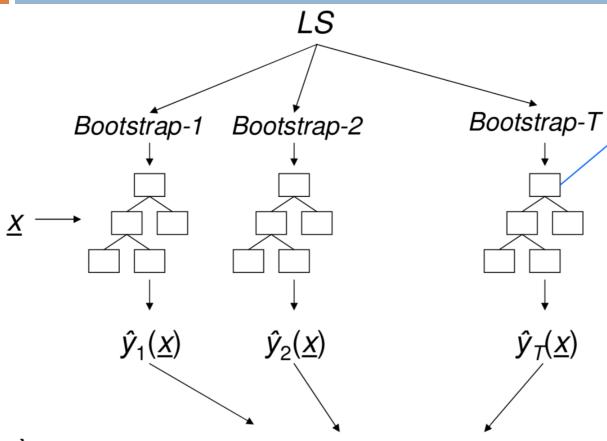
Predicted

Class

- từ tập học LS (learning set) có N phần tử
- xây dựng tập hợp T mô hình cơ sở độc lập nhau
- mô hình thứ i được xây dựng trên tập mẫu bootstrap, chú ý
- Tại nút trong, chọn ngẫu nhiên n' thuộc tính (n'<<n) và tính toán phân hoạch tốt nhất dựa trên n' thuộc tính này
- Cây được xây dựng đến độ sâu tối đa, không cắt nhánh
- 1 bootstrap : lấy mẫu N phần tử có hoàn lại từ tập LS
- khi phân loại : sử dụng luật bình chọn số đông (majority vote)
- hồi quy: tính giá trị trung bình của dự đoán của các mô hình



https://perso.math.univ-toulouse.fr/motimo/files/2013/07/random-forest.pdf



Nút trong: chọn ngẫu nhiên n' thuộc tính và tính toán phân hoạch tốt nhất dựa trên n' thuộc tính này

Chú ý: xây dựng cây không cắt nhánh

hồi quy : $\hat{y}(\underline{x}) = (\hat{y}_1(\underline{x}) + \hat{y}_2(\underline{x}) + \dots + \hat{y}_T(\underline{x}))/T$

phân loại : $\hat{y}(\underline{x}) = \text{bình chọn số đông } \{\hat{y}_1(\underline{x}), \dots, \hat{y}_T(\underline{x})\}$

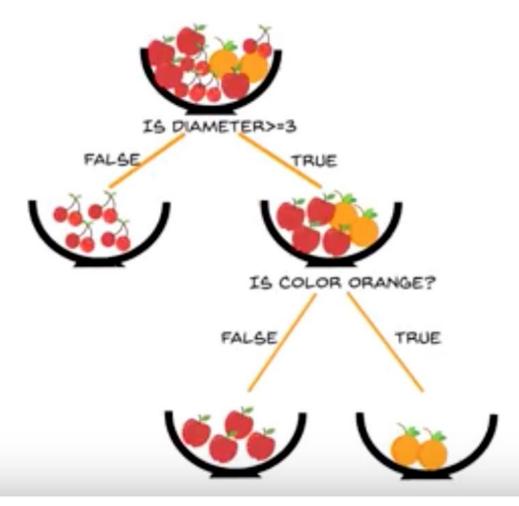
11 31

Diameter	Color	Grows in summer	Shape	Label
3	orange	yes	circle	Orange
1	red	yes	circle	Cherry
•••	•••	•••	•••	••••



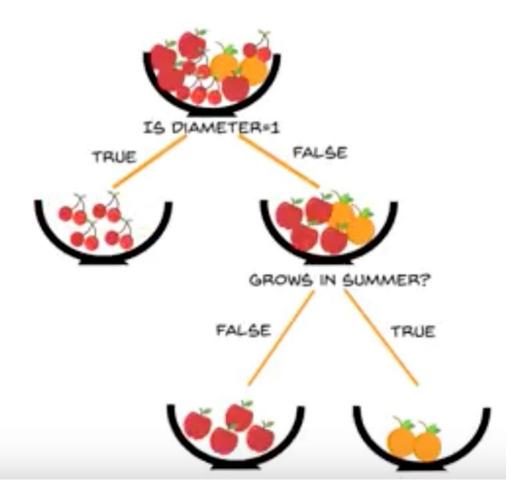
DIAMETER = 3 COLOUR = ORANGE GROWS IN SUMMER = YES SHAPE = CIRCLE

LET THIS BE TREE 1



LET THIS BE TREE 2 IS COLOR=RED FALSE TRUE IS SHAPE == CIRCLE? FALSE TRUE

LET THIS BE TREE 3





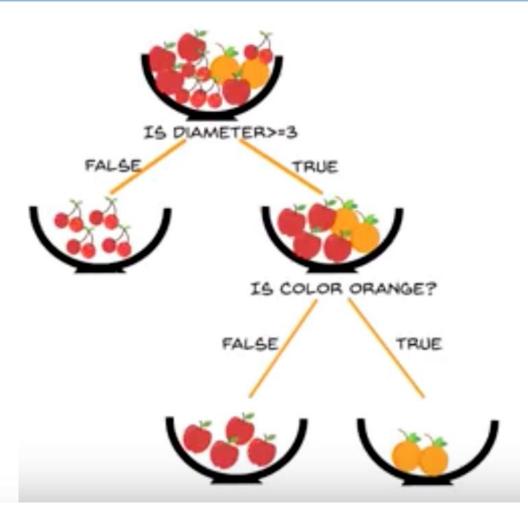
DIAMETER = 3 COLOUR = ORANGE GROWS IN SUMMER = YES SHAPE = CIRCLE

Random forests (Breiman, 2001)

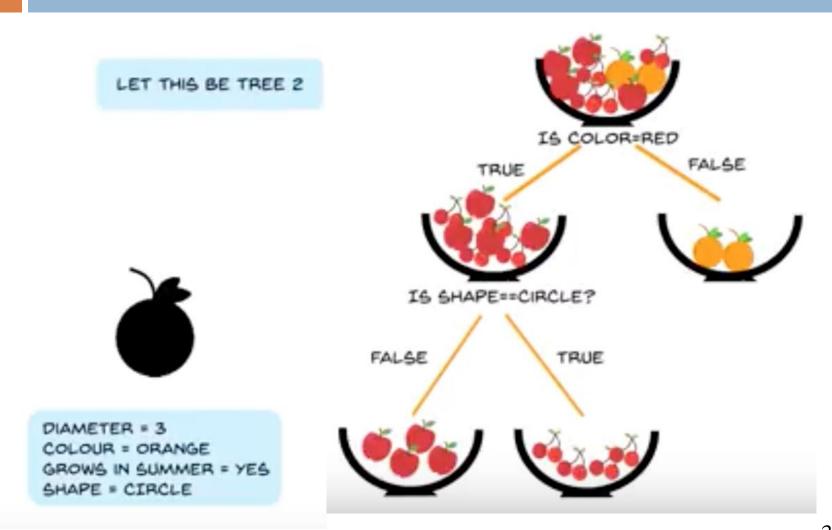
LET THIS BE TREE 1



DIAMETER = 3 COLOUR = ORANGE GROWS IN SUMMER = YES SHAPE = CIRCLE



Random forests (Breiman, 2001)

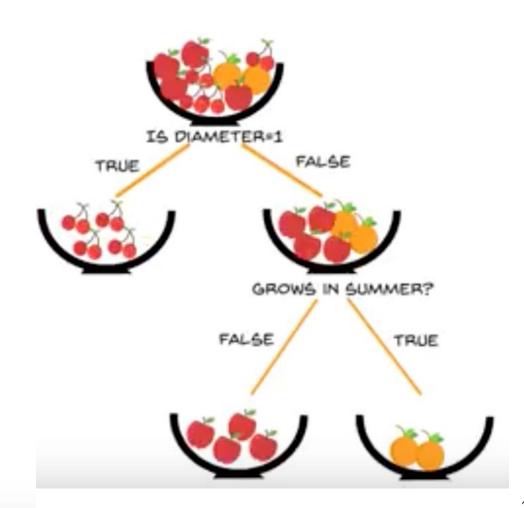


Random forests (Breiman, 2001)

LET THIS BE TREE 3



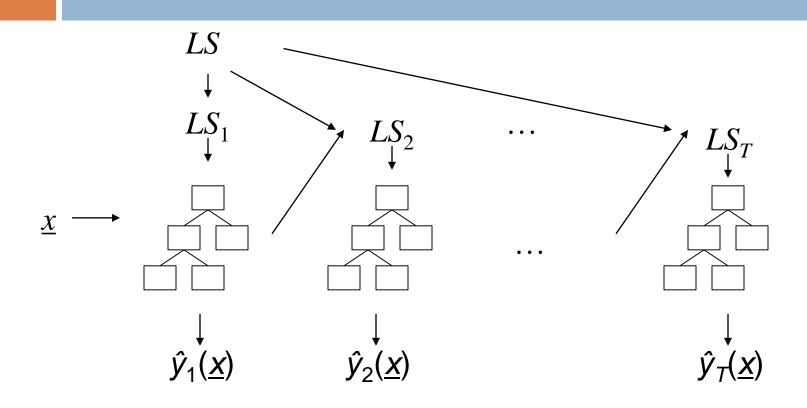
DIAMETER = 3 COLOUR = ORANGE GROWS IN SUMMER = YES SHAPE = CIRCLE



boosting technique

Boosting

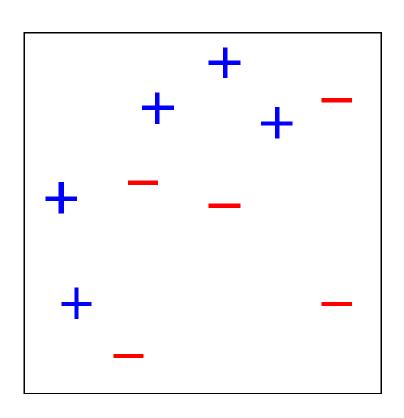
- từ tập học LS có N phần tử
- xây dựng tập hợp T mô hình cơ sở tuần tự
- mô hình thứ i được xây dựng trên tập mẫu lấy từ LS, tập trung vào các phần tử bị phân loại sai bởi mô hình thứ i-1 trước đó
- khi phân loại : sử dụng majority vote có trọng số
- hồi quy: tính giá trị trung bình của dự đoán của các mô hình có sử dụng trọng số

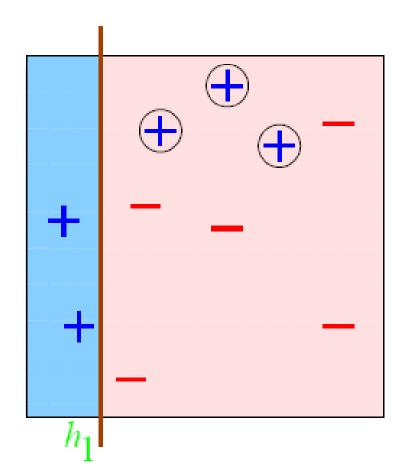


hồi quy :
$$\hat{y}(\underline{x}) = b_1.\hat{y}_1(\underline{x}) + b_2.\hat{y}_2(\underline{x}) + ... + b_T.\hat{y}_T(\underline{x})$$

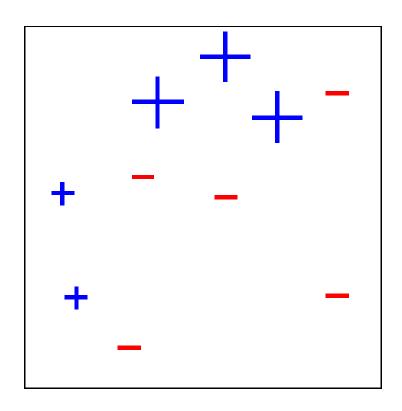
phân loại : $\hat{y}(\underline{x})$ = bình chọn số đông $\{\hat{y}_1(\underline{x}),...,\hat{y}_T(\underline{x})\}$ với các trọng số tương ứng $\{b_1,b_2,...,b_T\}$

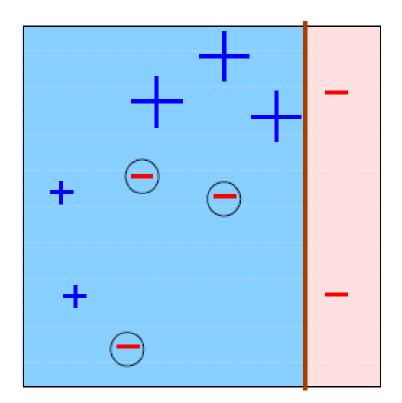
- Giới thiệu về Ensemble-based
- **Bagging, Boosting**
- kết luận và hướng phát triển



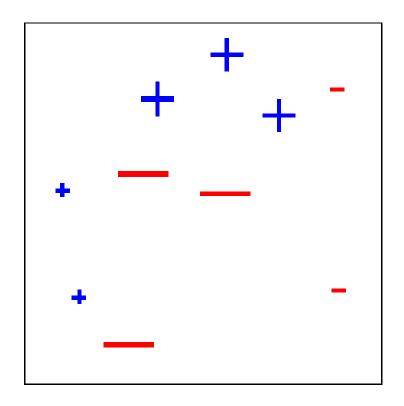


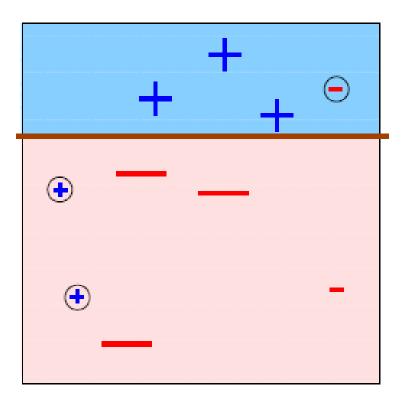
- Giới thiệu về Ensemble-based
- Bagging, Boosting
- kết luận và hướng phát triển



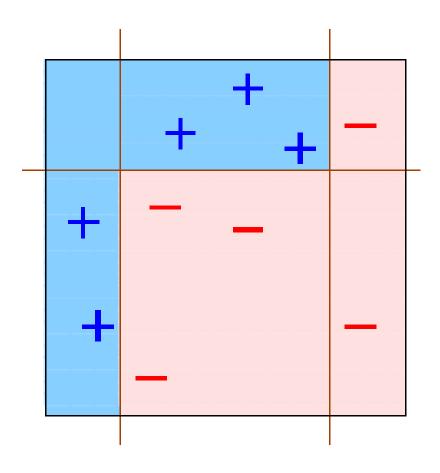


- Giới thiệu về Ensemble-based
- Bagging, Boosting
- kết luận và hướng phát triển





- Giới thiệu về Ensemble-based
- **Bagging, Boosting**
- kết luận và hướng phát triển



Nội dung

- □ Giới thiệu về Ensemble-based
- □ Bagging, Boosting
- □ Kết luận và hướng phát triển

Phương pháp ensemble-based

- cải thiện rất tốt hiệu quả các phương pháp học thông thường như cây quyết định, naïve Bayes, SVM, etc.
 - dựa trên cơ sở bias/variance
 - xây dựng tập hợp các mô hình cơ sở dựa trên tập học
 - kết hợp các mô hình khi phân loại cho độ chính xác cao
 - kết quả rất khó diễn dịch, ví dụ như 1 rừng gồm hàng trăm cây quyết định

Ensemble-based

- phương pháp ensemble-based
 - giải quyết các vấn đề về phân loại, hồi quy, gom nhóm, etc.
 - cho kết quả tốt, tuy nhiên không thể dịch được kết quả sinh ra
 - được ứng dụng thành công trong hầu hết các lãnh vực tìm kiếm thông tin, nhận dạng, phân tích dữ liệu, etc.

Hướng phát triển

- học trên dữ liệu không cân bằng
- diễn dịch kết quả sinh ra
- kiểm chứng sự hợp lệ của phương pháp

Python

- □ sklearn.ensemble.BaggingRegressor
- □ sklearn.ensemble.BaggingClassifier
- □ sklearn.ensemble.RandomForestRegressor
- □ sklearn.ensemble.RandomForestClassifier
- □ sklearn.ensemble. AdaBoostClassifier
- sklearn.ensemble.AdaBoostRegressor¶

The Cond