앙상블

주어진 데이터를 여러개의 서로 다른 예측 모형을 생성한 후,
이러한 예측 모형의 결과를 종합하여 하나의 최종 예측 결과를 도출

데이터관점에서는, 아래와 같습니다.
빨강이냐 파랑이를 분류하는 이진분류 상황을 가정하겠습니다.
각 모델들의 예측값들이 있을 겁니다.
예측값들을 하나로 모은 다음에,
회귀가 목적이라 연속형 변수라면 평균을, 분류 문제면 다수결로 결과를 도출하는 것이
앙상블 입니다!

SVM	KNN	의사결정 나무	앙상블
			평균/다수결
1	1	1	1
0	1	0	0
1	0	1	1
0	1	0	0
1	0	0	0

배깅

배깅의 뜻은 Boostrap aggregation입니다.
즉, boostrap(=복원추출 사용한 표본추출 방법)을 aggregate(통합)하는 것이죠.
그냥 붓스트랩을 여러번 해서, 여러 훈련 세트를 만들고
각각의 훈련세트에 모델을 적용해서 그 결과 값을 평균 냄으로써, 분산을 줄이는 기법입니다.
각 훈련세트는 독립적입니다.

단일 훈련자료로부터 반복하여 표본들을 샘플링해 B개의 다른 붓스트랩 된 훈련 자료를 생성합니다.
B개의 훈련 자료를 사용하여 예측모델을 B개 만들고 그 예측 결과들을 평균을 냅니다.
이는 통계학적으로 분산을 낮춰주는 효과가 있습니다.

의사결정 나무는 높은 분산이 문제가 됩니다. (트리 분할이 데이터에 크게 의존하여 훈련 데이터의 작은 변화가 결정 로직에 큰 변화를 가져온다 = 불안정하다)

따라서, 의사결정나무에 배깅을 적용하면, B개의 붓스트랩 표본이 생성이 되고, 각 훈련셋트에 대해 의사결정 나무를 만들고 그 결과 값을 평균을 내게 됩니다.
결국, 의사결정나무의 단점인 높은 분산이 줄어들게 되어 성능이 향상됩니다.

부스팅

배깅과 유사하지만, 붓스트랩 표본을 구성하는 재표본 과정에서
분류가 잘못된 데이터에 더 큰 가중치/확률을 부여하여 표본을 추출

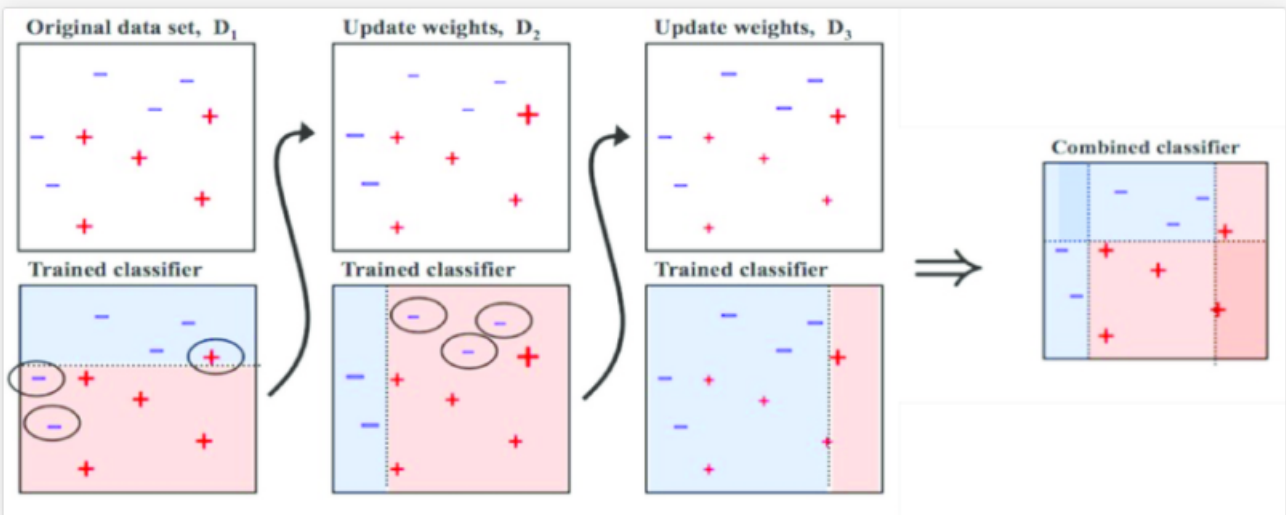
즉, 부스팅은 붓스트랩 샘플링을 통해 훈련 세트를 한 번 뽑고 트리를 만듭니다.
그 트리에서!!!!잘못 분류된 데이터를 봅니다.(더 정확히는 잔차를 봅니다.)
그리고 그 잔차를 줄이는 방향으로 2번째 뽑히는 데이터에 가중치/확률을 부여합니다.
이런식으로 계~~~~속 반복하는게 부스팅입니다.
한 스텝에서 계속 개선되어지니까, 학습속도가 당연히 느립니다.

부스팅의 핵심 키워드 2개는
잘못된 데이터(잔차), 더 큰 가중치/확률 입니다!

ensemble boosting - Adaboost

Adaboost는 앙상블 부스팅에서 가장 대표적인 방법 중 하나입니다. 어떻게 보면 제일 단순하면서도 강력한 알고리즘이죠.

Adaboost는 Adaptive Boosting으로서 이전 분류기가 틀린 부분을 adaptive하게 바꾸어가며 잘못 분류되는 데이터에 집중하도록 하는 것입니다.



출처: Medium (Boosting and Bagging explained with examples)

+와 -로 구성된 데이터셋을 분류하는 문제입니다.

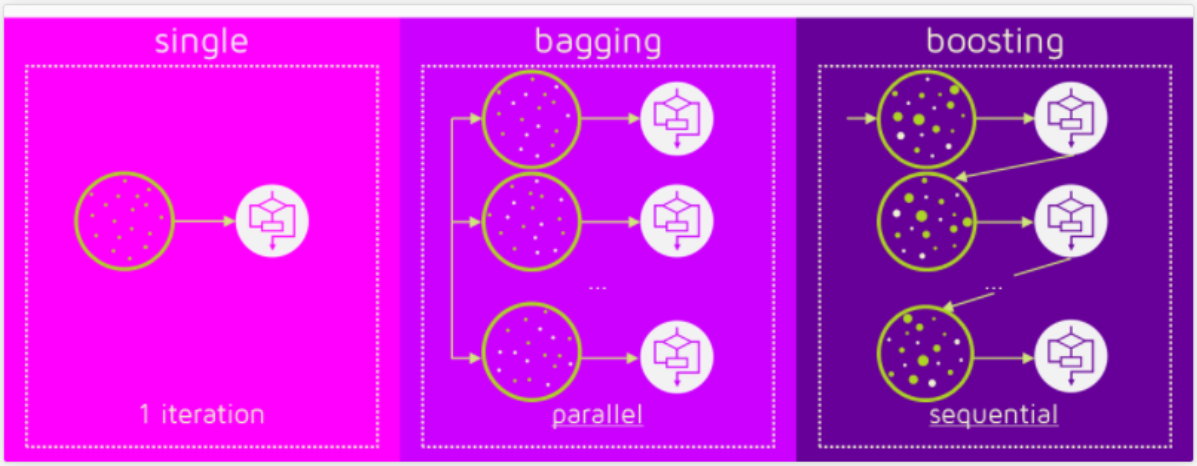
D1에서는 2/5 지점을 횡단하는 구분선으로 데이터를 나누어주었습니다. 하지만 위쪽의 +는 잘못 분류가 되었고, 아래쪽의 두 -도 잘못 분류되었습니다. 잘못 분류가 된 데이터는 가중치를 높여주고, 잘 분류된 데이터는 가중치를 낮추어 줍니다.

D2를 보면 D1에서 잘 분류된 데이터는 크기가 작아졌고(가중치가 낮아졌고) 잘못 분류된 데이터는 크기가 커졌습니다.(가중치가 커졌습니다.) 분류가 잘못된 데이터에 가중치를 부여해주는 이유는 다음 모델에서 더 집중해 분류하기 위함입니다. D2에서는 오른쪽 세 개의 -가 잘못 분류되었습니다.

따라서 D3에서는 세 개의 -의 가중치가 커졌습니다. 맨 처음 모델에서 가중치를 부여한 +와 -는 D2에서는 잘 분류가 되었기 때문에 D3에서는 가중치가 다시 작아졌습니다.

D1, D2, D3의 Classifier를 합쳐 최종 Classifier를 구할 수 있습니다. 최종 Classfier는 +와 -를 정확하게 구분해줍니다.

배깅과 부스팅 차이



출처: swallow.github.io

위 그림에서 나타내는 바와 같이 배깅은 병렬로 학습하는 반면, 부스팅은 순차적으로 학습합니다. 한번 학습이 끝난 후 결과에 따라 가중치를 부여합니다. 그렇게 부여된 가중치가 다음 모델의 결과 예측에 영향을 줍니다.

오답에 대해서는 높은 가중치를 부여하고, 정답에 대해서는 낮은 가중치를 부여합니다. 따라서 오답을 정답으로 맞추기 위해 오답에 더 집중할 수 있게 되는 것입니다.

부스팅은 배깅에 비해 error가 적습니다. 즉, 성능이 좋습니다. 하지만 속도가 느리고 오버 피팅이 될 가능성이 있습니다. 그렇다면 실제 사용할 때는 배깅과 부스팅 중 어떤 것을 선택해야 할까요? 상황에 따라 다르다고 할 수 있습니다. 개별 결정 트리의 낮은 성능이 문제라면 부스팅이 적합하고, 오버 피팅이 문제라면 배깅이 적합합니다.

References

Reference1: Medium (Ensemble Learning - Bagging and Boosting)

랜덤포레스트

여러개의 의사결정나무를 결합하기 때문에, 해석·설명이 어렵다.

배깅의 일종입니다. 배깅과 다른 점은, '설명변수'도 무작위로 선택한다는 것 입니다.
즉, 설명변수를 무작위로 선택함으로써, 트리의 다양성을 확보하여 모형간의 상관관계를 줄이고자 하는 것 입니다.
(decorrelate)
예를 들어, 1번째 샘플링에서는 변수가 a~e까지 5개가 선택되고 이를 기반으로 의사결정나무를 만듭니다.
2번째 샘플링에서는 변수가 c,w,z 3개가 선택되고 이를 기반으로 의사결정나무를 만듭니다.
3번째 샘플링에서는 변수가 a, u, v, b 4개가 선택되고 이를 기반으로 의사결정나무를 만듭니다.

이런식으로 여러개의, 서로 상관관계가 없는 트리를 막~~~~~만들어 내서
결과를 평균(회귀분석. 예측)내거나 다수결(분류)의 원칙으로 하나의 최종 결과를 보여주게 됩니다.