BI-VZD lecture 3 handout 28. února 2022
Please report any problems, suggestions etc. in GitLab.
File version: 28. února 2022 09:26.

Co bude v dnešní přednášce

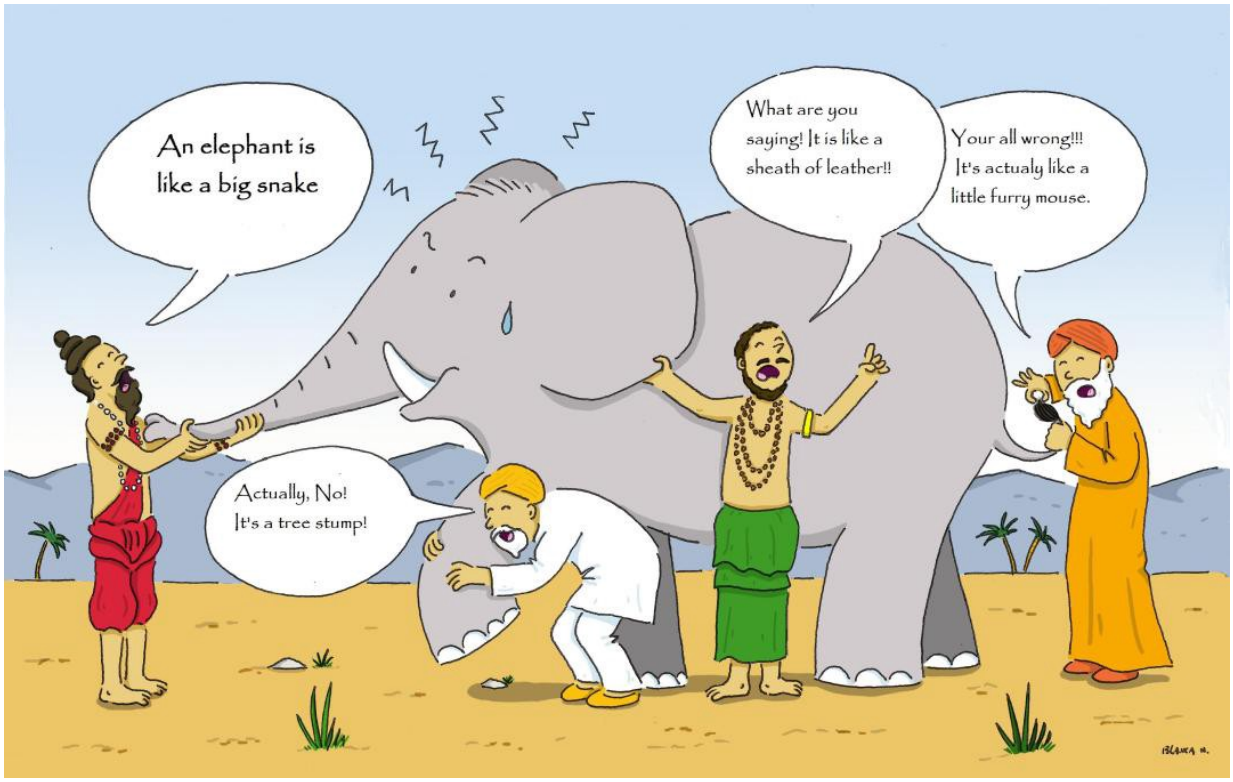
- ensemble metody – základní myšlenka
- Bagging - náhodné lesy
- Boosting - AdaBoost

1 Ensamble metody obecně

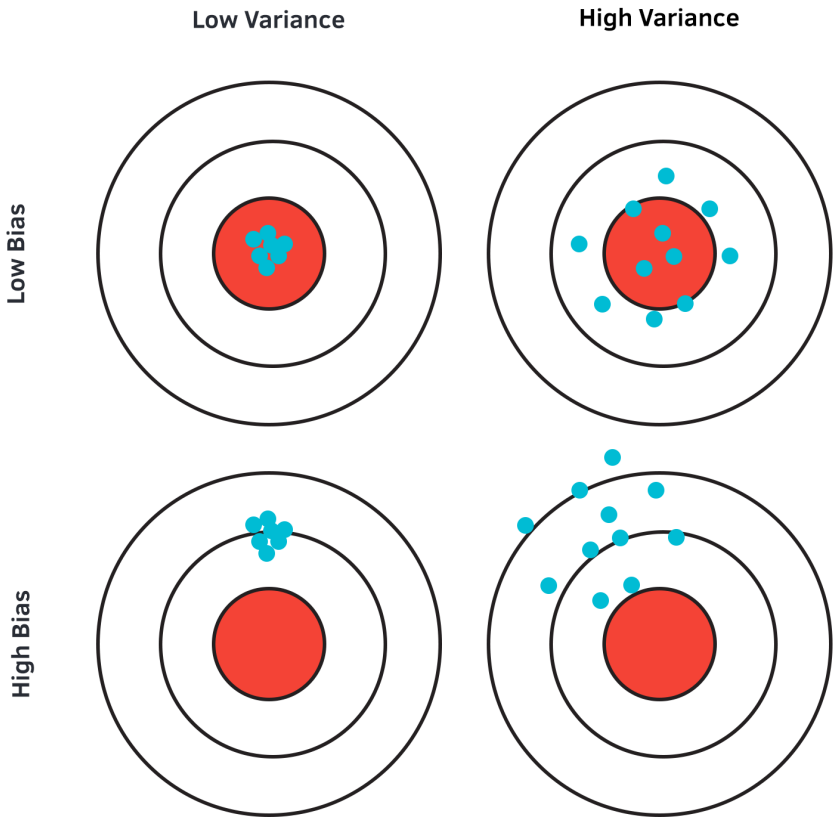
Ensamble metody: základní myšlenka

- Základní myšlenka spočívá v tom, že namísto jednoho modelu (např. rozhodovacího stromu) použijeme **více modelů** a jejich predikce nějakým způsobem zkombinujeme do finálního rozhodnutí.
- My si ukážeme dva nejobvyklejší způsoby: **Bagging = bootstrap aggregating** a **Boosting**.
- Každý z těchto dvou přístupů si ilustrujeme na nejznámějších reprezentantech, které navíc spočívají ve skládání rozhodovacích stromů, které už známe z minulé přednášky.
- Tyto dva reprezentanti jsou **Náhodné lesy** (angl. **Random Forest**) a **AdaBoost**.

Proč ensemble metoda funguje?

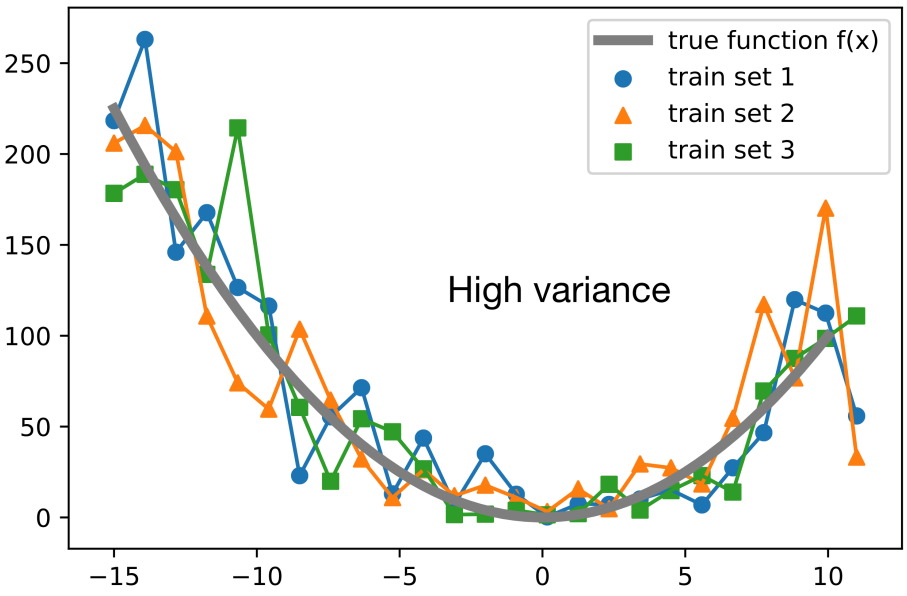


Proč ensemble metoda funguje?



Bias-Variance Tradeoff

Proč ensemble metoda funguje?



2 Bagging: náhodné lesy

Náhodný les pro klasifikaci: základní myšlenka

Pro jednoduchost předpokládejme, že máme binární klasifikační problém, tj. rozhodujeme jestli $Y = 0$ nebo $Y = 1$.

1. Ze vstupního trénovacího datasetu $\mathcal{D}$ vytvoříme n datasetů $\mathcal{D}_1, \ldots, \mathcal{D}_n$ stejně velkých jako $\mathcal{D}$ pomocí metody **bootstrap**, neboli (středoškolsky) pomocí výběru *s opakováním*.

2. Na každém datasetu $\mathcal{D}_i$ naučíme rozhodovací strom tak, jak jsme si předvedli v minulé přednášce. Může být málo hluboký, klidně hloubky (parametr `max_depth`) dva nebo tři (používá se i hloubka jedna). Označme tyto stromy $T_1, \ldots, T_n$.

3. Každý datový bod (tj. řádek z tabulky s daty $\mathcal{D}$) proženeme všemi stromy $T_1, \ldots, T_n$ a od každého z nich si uložíme rozhodnutí $Y_1, \ldots, Y_n$.

4. Všechny tyto stromy $T_1, \ldots, T_n$ tvoří **náhodný les** a jeho finální rozhodnutí o hodnotě Y je dané většinovým rozhodnutím stromů, je-li např. v množině $\{Y_1, \ldots, Y_n\}$ více jedniček než nul, je predikce náhodného lesa $Y = 1$.

Bootstrap

Ukážeme si, jak funguje *bootstrap* na jednoduchém příkladu a našem datasetu:

`id`	rýmička	pohlaví	$> 39°$C	vstal(a)?	věk
1	ano	muž	ne	ne	65
2	ne	žena	ano	ano	34
3	ne	muž	ne	ano	72
4	ano	žena	ano	ne	20
5	ano	muž	ne	ano	45

Chceme-li vytvořit „bootstrapem“ dataset velikosti pět, pětkrát si **náhodně vybereme řádek s tabulky** s tím, že se řádky v našem výběru **mohou opakovat**. Vybereme-li např. řádky s `id` 1,4,3,3,1, dostaneme dataset

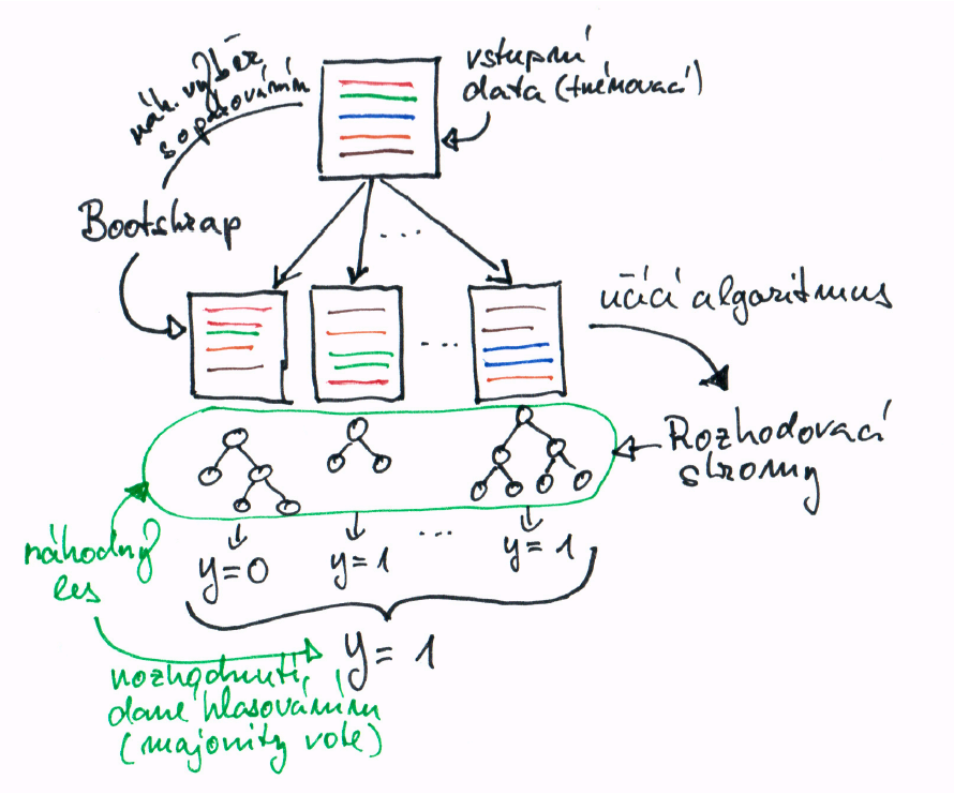
`id`	rýmička	pohlaví	$> 39°$C	vstal(a)?	věk
1	ano	muž	ne	ne	65
2	ne	žena	ano	ano	34
3	ne	muž	ne	ano	72
1	ano	muž	ne	ne	65
3	ne	muž	ne	ano	72

Bootstrap

Ted' musíme vytvořit rozhodovací strom, který vezme v úvahu pouze omezenou podmnožinu proměnných. Příznaky mohou být vybrány náhodně. Přičemž u velkých datastetu počet příznaků v stromu je **druhá odmocnina** počtu příznaků v původním datasetu plus-minus autobus pro každý krok.

`id`	rýmička	pohlaví	$> 39°$C	vstal(a)?	věk
1	ano	muž	ne	ne	65
2	ne	žena	ano	ano	34
3	ne	muž	ne	ano	72
1	ano	muž	ne	ne	65
3	ne	muž	ne	ano	72

Náhodný les pro klasifikaci: základní myšlenka na obrázku



Poznámky (1/2)

- Základními parametry metod `RandomForestClassifier` a `RandomForestRegressor` v `sklearn` jsou:
  - `n_estimators`: určuje počet stromů v náhodném lese,
  - `max_depth`: určuje maximální hloubku stromů v lese (je lepší použít nízkou hodnotu).
- Tyto metody mají také mnoho shodných parametrů s analogickými metodami pro jednoduché rozhodovací stromy; tyto parametry se přenáší na jednotlivé stromy v náhodném lese.
- V případě regresního problému (spojité Y) se postupuje opět analogicky jako u regresních rozhodovacích stromů: predikce náhodného lesa se bere jako průměr z predikcí jednotlivých stromů lesa.

Poznámky (2/2)

- U ensemble metod, které skládají rozhodnutí z více modelů, je důležité, aby jednotlivé modely nebyly stejné ale naopak co nejpestřejší.
- Toho se většinou docílí nějakým druhem „randomizace“; v případě náhodných lesů je tento náhodný prvek daný bootstrap metodou pro generování jednotlivých trénovacích datasetů.
- Jak jsme si řekli, rozhodovací stromy jsou velice citlivé na změny v trénovacích datech, a tak stačí odlišnost datasetů daná bootstrapem, abychom získávali velice odlišné rozhodovací stromy.
- Přestože mohou být jednotlivé stromy sami o sobě slabé modely (podmodelům v ensemble metodách se říká *weak learners*), jejich kolektivní rozhodování dává až překvapivě dobré výsledky.
- Náhodné lesy jsou na rozdíl od rozhodovacích stromů velice robustní a poměrně odolné vůči přeučení. Bohužel ale ztrácejí jejich jednoduchost a snadnou interpretovatelnost.

3 Boosting

Rozhodovací stromy s `sample_weight` (1/2)

- Abychom mohli vysvětlit, jak funguje algoritmus AdaBoost, potřebujeme pochopit použití vážených dat u rozhodovacích stromů.
- V řeči `sklearn` se jedná o použití parametru `sample_weight` v metodě `.fit(X,y,sample_weight)` tříd `DecisionTreeClassifier` a `DecisionTreeRegresor`.
- Pokud máme v trénovacích datech N dat (řádků v tabulce, poloangl. „samplů“), je proměnná `sample_weight` pole $[w_0, w_1, \ldots, w_{N-1}]$ vah jednotlivých bodů, obvykle **znormovaných na jedničku**, tj.

$$\sum_{i=0}^{N-1} w_i = 1.$$

Rozhodovací stromy s `sample_weight` (2/2)

- Při učení stromu se váhy projeví v kroku, ve kterém se počítá informační zisk (resp. Gini index)

$$H(\mathcal{D}) - t_L H(\mathcal{D}_L) - t_R H(\mathcal{D}_R)$$

  kde $t_L = \frac{\#\mathcal{D}_L}{\#\mathcal{D}}$ a $t_R = \frac{\#\mathcal{D}_R}{\#\mathcal{D}}$.
- Konkrétně se přepočítá hodnota t_L a t_R, tedy velikosti množin dat vzniklých rozdělením $\mathcal{D}$: Hodnota t_L je rovna součtu vah bodů, které spadají do $\mathcal{D}_L$, poděleném sumou vah všech bodů z $\mathcal{D}$. Analogicky pro t_R.
- Jsou-li např. v $\mathcal{D}_L$ body z řádků s indexy $3, 10, 15, 25$ a v $\mathcal{D}$ body s indexy $3, 10, 15, 17, 21, 25$, je hodnota

$$t_L = \frac{w_3 + w_{10} + w_{15} + w_{25}}{w_3 + w_{10} + w_{15} + w_{17} + w_{21} + w_{25}}$$

Výsledkem použití vah je to, že strom se učí tak, aby správně predikoval zejména datové body s vyšší vahou. (Toto si rozmyslete!)

AdaBoost (Adaptive Boosting): základní myšlenka

- Stejně jako při Baggingu konstruujeme více modelů (opět uvažujeme rozhodovací stromy, i když AdaBoost může používat i jiné typy modelů) a finální rozhodnutí je (váženou) kompozicí rozhodnutí jednotlivých modelů.
- Na rozdíl od Baggingu ale při Boostingu nejsou tyto modely nezávislé, ale jsou seřazené a každý další je ovlivněn těmi předchozími.
- Tento vliv je při AdaBoostu realizován pomocí vah datových bodů: **Při konstrukci $n$tého stromu je zvýšena váha těm bodům, které předchozí $(n-1)$tý strom klasifikoval špatně.**
- Takovýmito změnami vah je zajištěno, že se další model soustředí více na ty datové body, se kterými si předchozí modely neporadily.
- Přibližně takto funguje Boosting obecně, my si dále ukážeme konkrétní implementaci této myšlenky známou jako algoritmus AdaBoost [Freund, Schapire (1997)].

AdaBoost (Adaptive Boosting): popis algoritmu (1/3)

- Na začátku máme dataset $\mathcal{D}$ s N datovými body.
- Pro jednoduchost opět uvažujeme binární klasifikaci. Existují ale i modifikace algoritmu pro více než dvě třídy a i pro regresi.
- Počet zkonstruovaných stromů je zadán uživatelem v parametru `n_estimators`.

AdaBoost:

1. Nastavme váhy rovnoměrně, tedy $w_i = \frac{1}{N}$ a položme $m = 1$.
2. Pokud $m \leq$ `n_estimators`, naučme strom $T^{(m)}$ na datech $\mathcal{D}$ s váhami w_i.
3. Do proměnné $e^{(m)}$ uložme součet vah těch bodů z $\mathcal{D}$, které jsou špatně klasifikované stromem $T^{(m)}$.
4. Pokud je $e^{(m)} = 0$ nebo $e^{(m)} \geq \frac{1}{2}$, skončeme.

AdaBoost (Adaptive Boosting): popis algoritmu (2/3)

5. Pro stromem $T^{(m)}$ špatně klasifikované body nastavme nové váhy

$$w_i \leftarrow \frac{1 - e^{(m)}}{e^{(m)}} w_i.$$

   Díky předpokladu $0 < e^{(m)} < 1/2$ je faktor $\frac{1-e^{(m)}}{e^{(m)}}$ větší než jedna a váhy těchto bodů se zvyšují!

6. Znormalizujme váhy tak, aby jejich součet byl jedna.
7. Zvětšeme m o jedna a vraťme se do bodu 2.

Výsledkem algoritmu je tedy až `n_estimators` rozhodovacích stromů $T^{(1)}, T^{(2)}, \ldots$

AdaBoost (Adaptive Boosting): popis algoritmu (3/3)

Abychom určili rozhodnutí tohoto modelu pro nějaký datový bod x, postupujeme následovně:

1. Každému stromu $T^{(m)}$ přiřadíme váhu

$$w_T^{(m)} = \texttt{learning\_rate} \cdot \log \frac{1 - e^{(m)}}{e^{(m)}},$$

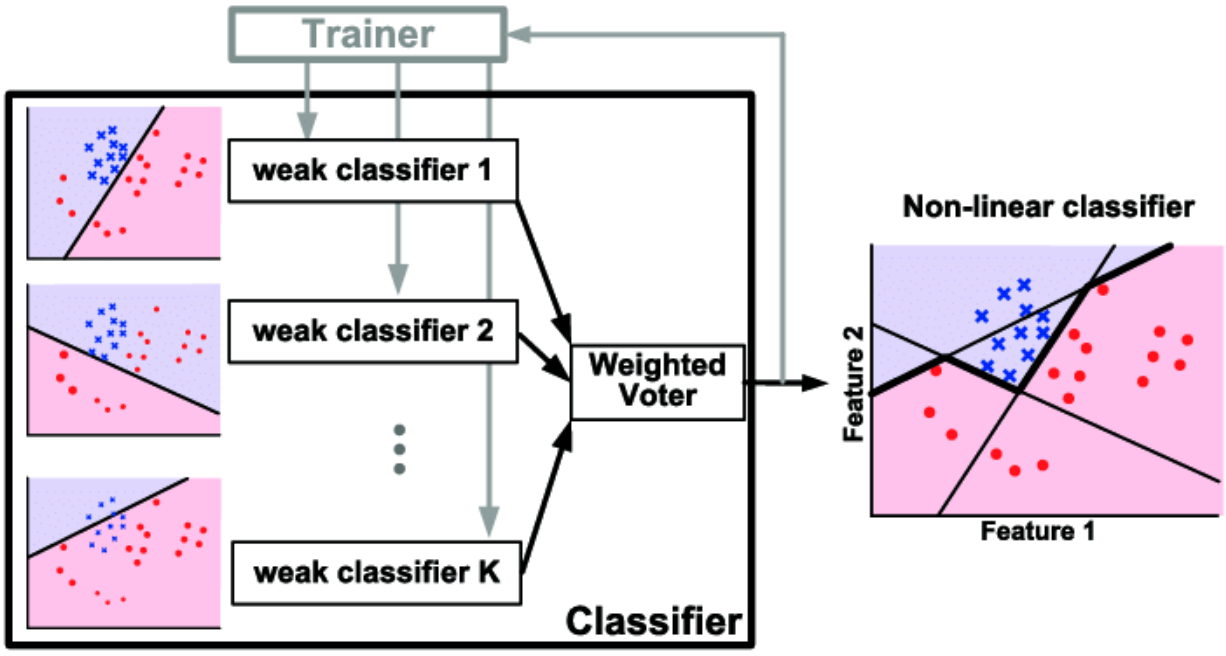
   kde $e^{(m)}$ je číslo z kroku 4 výše a `learning_rate` je parametr zadaný uživatelem.

2. Sečti váhy $w_T^{(m)}$ všech stromů, které pro x predikují $Y = 1$ a to samé udělej pro stromy predikující $Y = 0$.
3. Rozhodni se pro tu z možností, pro kterou je součet vah vyšší.

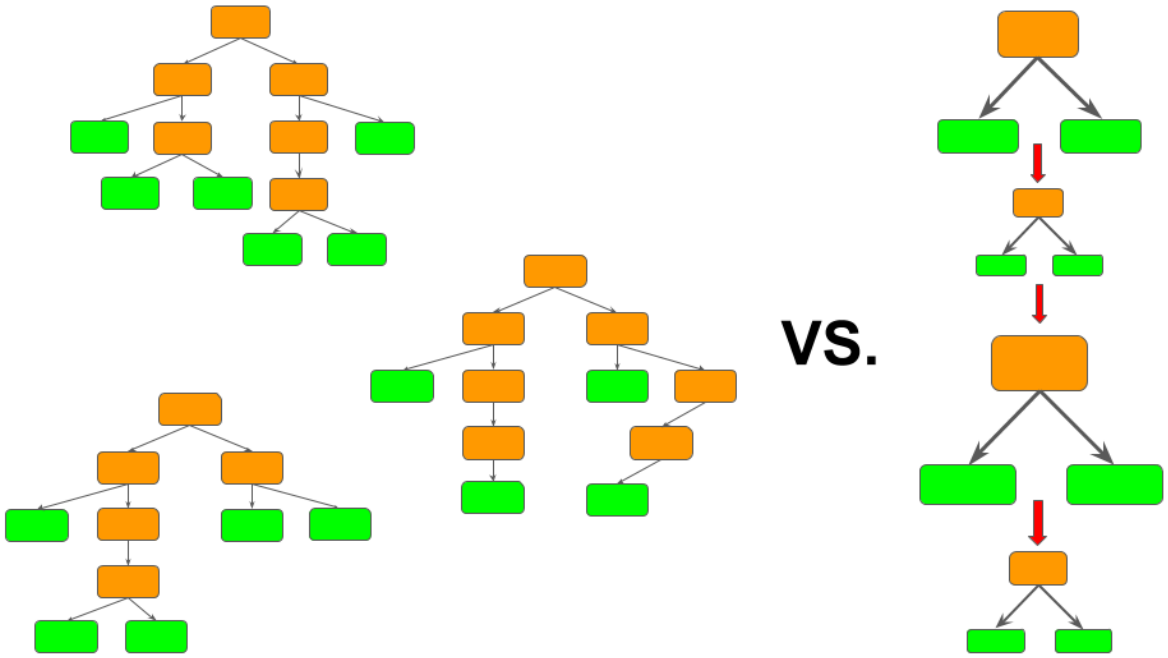
AdaBoost (Adaptive Boosting): poznámky

- Verze algoritmu pro „více než binární“ klasifikaci se nazývá *AdaBoost-SAMME* [Zhu, Rosset, Zou, Hastie (2006)]. Tato verze je implementována v `sklearn`.
- Varianta pro regresi se zase nazývá *AdaBoost.R2* [Drucker (1997)].
- AdaBoost nemusí nutně používat rozhodovací stromy; je možné použít jakýkoli model, který umí pracovat s parametrem `sample_weight`.
- V `sklern` implementaci jsou rozhodovací stromy výchozí volba (parametr `base_estimator`) (stromy hloubky 1, pokud `base_estimator=None`) .
- Parametr `learning_rate` je obvykle zaváděn u většiny ensamble metod spadajících do kategorie Bostingu.
- Jedná se o tzv. **regularizaci**: čím je `learning_rate` nižší, tím je model odolnější vůči přeučení. Nevýhodou je, že je pak obvykle nutné zvýšit počet stromů (parametr `n_estimators`).

Random Forest vs. AdaBoost



Random Forest vs. AdaBoost



Více o ensemble metodách:

- click!

ChangeLog

Verze	Datum	Autor	Log
1.0	28.02.2022	KK	Výchozí verze pro rok 2020/2021.