IFT3395 Rapport Kaggle

Gabriel Beaudoin (20268138)
Tom Sanic (20277286)

Novembre 2024

1 Introduction

Notre objectif pour ce projet est de concevoir un modèle de classification binaire pour trier des documents textuels en fonction de l'occurence d'apparition des différents mots. Pour aborder cette tâche, nous avons expérimenté plusieurs algorithmes d'apprentissage, le modèle Naive Bayes à été notre premier reflex comme il avait été mentionné dans le devoir 1. Pour la partie 2 nous avons essayer un réseau de neurones simple, et un modèle de Random Forest. Le modèle Naive Bayes s'est avéré être le plus performant, atteignant un F1-score de 73.5%, suivi du Random Forest avec 73% et du réseau de neurones avec 70%. Ce rapport détaille notre pipeline d'apprentissage automatique, incluant le prétraitement des données, le choix et l'évaluation des modèles, ainsi que la procédure de validation et de réglage des hyperparamètres. Nous analysons également les avantages et inconvénients de chaque approche et discutons des pistes d'amélioration possibles pour cette tâche.

2 Conception des fonctionnalités

Nous avons commencé par importer et visualiser les données afin de bien comprendre leur structure et les dimensions des matrices représentant la fréquence des mots. Cette étape exploratoire nous a permis d'avoir une meilleure compréhension du problème. Étant donné la structure des données, nous avons décidé d'utiliser directement les matrices fournies pour entraîner nos modèles. Bien que nous ayons essayé des techniques de réduction de dimensionnalité, comme l'analyse en composantes principales (PCA) et la sélection de caractéristiques par gain d'information, les résultats obtenus n'ont pas été satisfaisants. Nous avons donc choisi de conserver l'ensemble complet des données afin d'avoir davantage de caractéristiques sur lesquelles baser notre prédiction. Pour tester nos modèles, nous avons divisé les données en deux ensembles : un ensemble d'entraînement et un ensemble de validation. Cette séparation nous a permis de régler nos hyperparamètres et d'identifier les meilleures configurations pour chaque modèle. Ensuite, nous avons ré-entraîné notre modèle optimal sur l'ensemble complet des données d'entraînement en utilisant les meilleurs hyperparamètres trouvés. L'ensemble de test final pour l'évaluation est celui fourni sur Kaggle.

3 Algorithmes

3.1 Première étape

Notre premier modèle est un classifieur Naive Bayes, qui s'est révélé particulièrement efficace pour la classification de documents textuels. Nous avons appliqué le lissage de Laplace et tanté d'optimiser les hyperparamètres 'alpha' (pour le lissage) et 'beta' (pour ajuster l'influence des mots fréquents).

3.2 Deuxième étape

Nous avons essayer pour l'étape 2 un réseau de neurones artificiels en utilisant le MLP de scikit learn. Nous avons mené une recherche d'hyperparamètres sur le nombre de couches cachées, la régularisation 'alpha', et le taux d'apprentissage 'learning_rate_init' afin d'optimiser le modèle.

Nous avons également mis en oeuvre un arbre aléatoire et une random forest en utilisant tree et RandomForestClassifier de scikit learn. Les Paramètre optimisé pour la random forest sont n_estimators, max_depth, min_samples_split, min_samples_leaf, max_features (sqrt vs log2), class_weight (balanced, balanced_subsample) et cpp_alpha pour l'arbre aléatoire.

4 Méthodologie

4.1 Naive Bayes (Première étape)

Comme dit précédament, pour la première étape, j'ai implémenté un modèle Naive Bayes en m'inspirant de la méthode vue dans un devoir 1. J'ai appliqué un lissage de Laplace pour éviter les probabilités nulles lors de la prédiction, et j'ai utilisé une fonction logarithmique pour éviter les problèmes de valeurs très petites. Comme mentionné précédament, pour tester nos modèles, nous avons divisé les données en deux ensembles : un ensemble d'entraînement et un ensemble de validation. Ensuite, nous avons ré-entraîné notre modèle optimal sur l'ensemble complet des données d'entraînement en utilisant les meilleurs hyperparamètres trouvés. L'ensemble de test final pour l'évaluation est celui fourni sur Kaggle. Pour notre modèle le plus performant possible, nous avons exploré l'optimisation du paramètre de lissage de Laplace (α), initialement fixé à 1. L'optimisation de l'hyperparamètre α s'est déroulée en deux phases distinctes. Nous avons affiné la plage de recherche en passant de 0.1 à 5 puis avons effectué une recherche sur l'intervalle [0.7, 1], qui a révélé une performance optimale pour $\alpha = 0.788$, atteignant un score macro F1 de 0.716. Pour affiner davantage nos résultats, nous avons conduit une seconde phase d'optimisation sur l'intervalle [0.775, 0.81]. Cette analyse plus précise a identifié un plateau, et nous avons pris $\alpha = 0.775$ comme valeur optimale, maintenant le score macro F1 à 0.7158. Suite à cette première optimisation, nous avons tenté d'améliorer notre modèle en introduisant une combinaison linéaire entre

notre probabilité avec lissage de Laplace personnalisé et la probabilité conditionnelle pure, selon la formule :

$$P_{\text{final}}(w|d) = \beta \cdot P_{\text{laplace\_custom}}(w|d) + (1 - \beta) \cdot P(w|C)$$

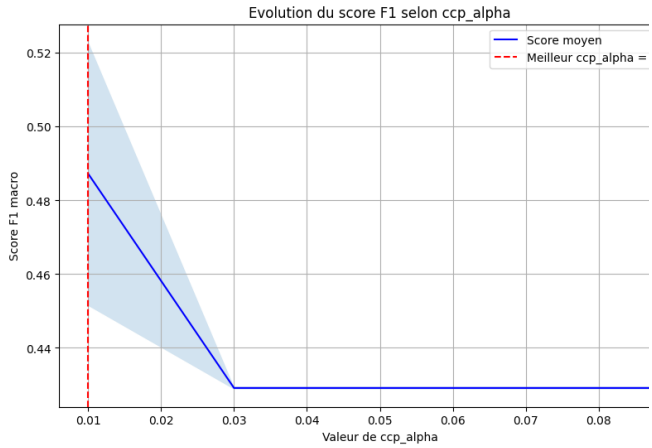
Cette approche a nécessité une recherche d'hyperparamètres en deux dimensions, optimisant simultanément α et β. Après une recherche exhaustive, nous avons retrouvé $\alpha = 0.775$ comme valeur optimale, et obtenu $\beta = 1$. Ce résultat, bien que décevant, confirme que notre approche initiale avec le lissage de Laplace personnalisé était déjà optimale, puisque $\beta = 1$ signifie que le modèle ignore complètement le terme $P(w|C)$ dans la combinaison linéaire.

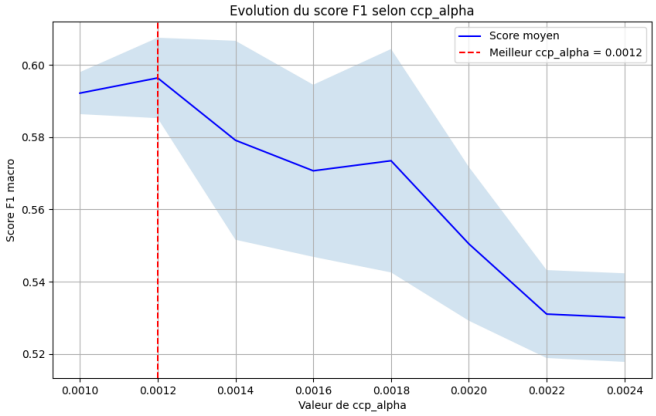
4.2 Réseau de neuronne (Deuxième étape)

Nous avons implémenté un réseau de neurones en utilisant la bibliothèque MLPClassifier de sklearn. J'ai divisé les données en deux ensembles : un ensemble d'entraînement et un ensemble de validation. Ensuite, j'ai effectué une recherche d'hyperparamètres pour optimiser les performances du modèle. Les hyperparamètres explorés incluent la taille des couches cachées (hidden_layer_sizes), le paramètre de régularisation (alpha), et le taux d'apprentissage initial (learning_rate_init). Pour tester nos modèles, nous avons utilisé une fonction de séparation des données qui mélange les échantillons et les divise en ensembles d'entraînement et de validation. Ensuite, nous avons ré-entraîné notre modèle optimal sur l'ensemble complet des données d'entraînement en utilisant les meilleurs hyperparamètres trouvés.

4.3 Arbre aléatoire (Deuxième étape)

Recherche d'hyperparamètres pour prune l'arbre:
Nous avons commencé par utiliser la classe RandomTree de scikit-learn, sans réaliser qu'elle utilisait la méthode Gini par défaut et non l'entropie.
Étant donné que l'entropie est généralement plus efficace que Gini dans le cas de jeux de données déséquilibrés, comme c'est le cas pour cette compétition, nous avons effectué une recherches d'hyperparamètres avec gini puis avec l'entropie car avec GridSearchCV. Voici les graphes pour l'entropie :





Les deux approches gini et entropy ont donnée des résultat très similaire avec une variance assez élevée (nous pouvons constater un écart de plus 6% entre les validations croisée ce qui est très important). De plus une moyenne maximal d'environ 59% est très basse comparé à nos autres modèle.
Cela est surrement dû au surraprentissage.
Face à ces performances insatisfaisantes, nous avons décidé de passer aux Random Forests, qui devraient mieux résister au surapprentissage et offrir de meilleures performances plûtot que de perdre du temps à ameliorer ce model plus faible.

4.4 Random Forest (Deuxième étape)

Vue d'ensemble

Nous avons d'abord effectué des recherches avec RandomizedSearchCV. Nous avons ensuite procédé à une recherche hyperparamètre par hyperparamètre (car leur impact était difficilement distingable avec tout un mix). Nous avons donc pris de petites valeurs de max_depth et n_estimators pour que les recherches prennent moins de temps. Finalement nous avons réalisé une recherche linéaire de tous les hyperparamètres après avoir une bonne idée de comment impactait chaque hyperparametre.
Nous avons utiliser cv = 3, 4 ou 5 car la variances de ce modèle est bien plus faible que celle de l'arbre aléatoire

Résumer des première recherches

Nous avons retiré log2 qui donnait de moins bons résultats.
Une tendance vers 450 ou plus pour n_estimators a été observée mais aucune grosse améliorations au dessus de 600.
Max_depth n'avait pas vraiment d'importance, les meilleurs modèles étaient les plus grands avec très peu de différence (moins de 0,01 pourcent).
Enfin nous avons constater une meilleure performance pour balanced_subsample
Nous avons ensuite essayer d'isoler les hyperparametre : min_samples_split, min_samples_leaf, class_weight

Recherche par hyperparamètre

Après ces phases, nous avons compris qu'il n'était pas nécessaire de chercher des modèles plus grands pour le moments. Nous avons donc procédé à une recherche hyperparamètre par hyperparamètre en fixant max_depth à 10 et n_estimators entre 80 et 200, ce qui a donné des résultats assez similaires (2 pourcent d'erreur en plus que pour les gros modèle) et plus rapide a obtenir.
Pour min_samples_leaf (annexe 1), nous avons remarqué une baisse de performance plus on l'augmente ce qui est bien normale. En effet il faut pouvoir apprendre à classifier de petit groupe de donnée. (pas trop petit pour éviter surraprentissage)
Pour min_samples_split (annexe 2), peu importe la valeur entre 20 et 500, il n'y avait que très peu de variation (moins de 1%). Ceci est assez étonant mais cela montre à quelle point les randoms forest peuvent bien s'adapter. Cependant ceci est surement dû a la petite taille de l'arbre si nous avions tester sur des arbres plus profond cela aurait pu changer les résultat.

5 Résultats

5.1 Première étape

Nous avons d'abord essayé un modèle Naive Bayes sans recherche d'hyperparamètres, obtenant un score de 0.73538, qui s'est avéré être notre meilleur résultat. Afin d'améliorer ce score, nous avons tenté de trouver l'hyperparamètre optimal pour le lissage de Laplace. Au lieu d'ajouter 1, nous avons observé que le meilleur facteur de lissage est 0.775 pour les catégories vides. Nous avons également essayé de faire une interpolation entre le modèle Bayes classique et celui avec lissage de Laplace. Finalement, nous avons constaté que le modèle préfère entièrement le lissage de Laplace. Lors de la soumission sur Kaggle, le modèle n'a pas montré d'amélioration significative, obtenant un score de 0.73176, légèrement inférieur à notre première implémentation sans recherche d'hyperparamètres.

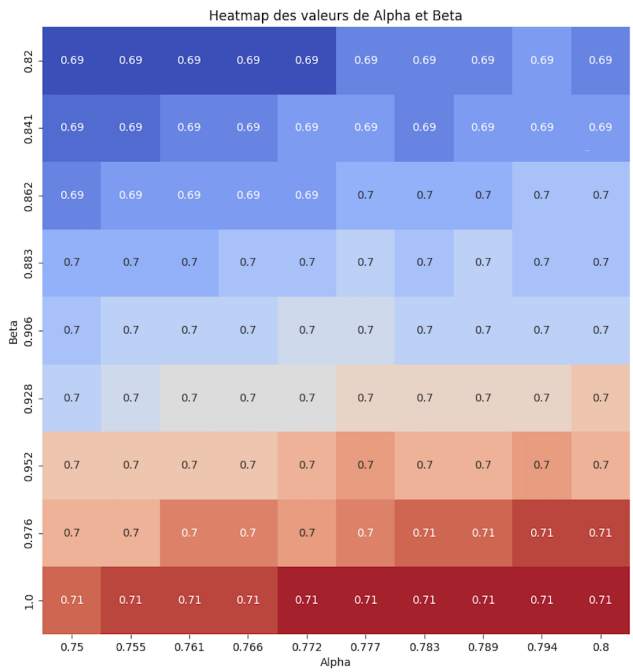
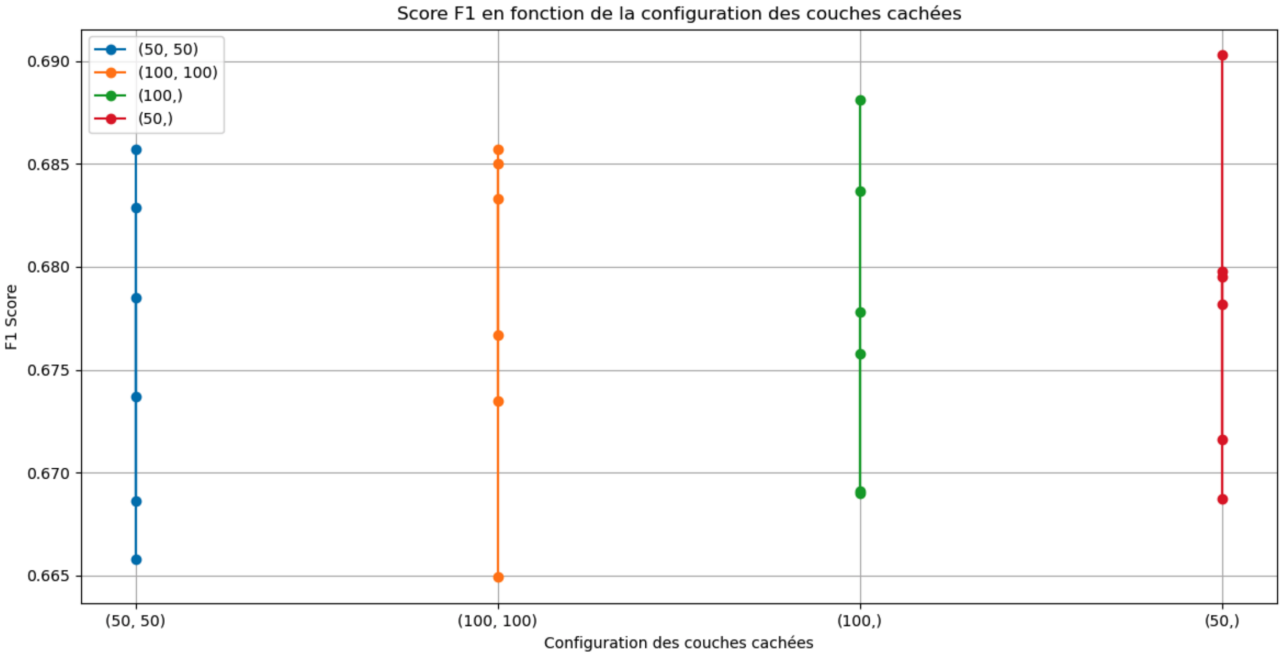


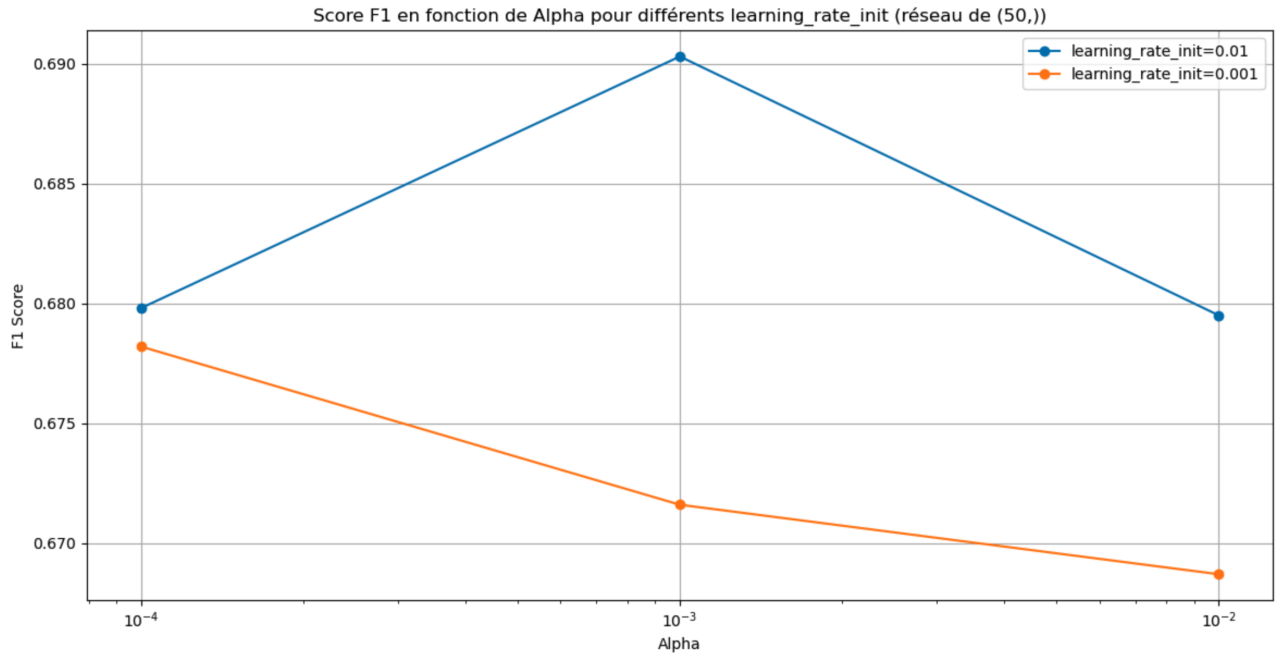
Figure 1: alpha : facteur de lissage — beta : facteur d'interpolation

5.2 Deuxième étape

Réseau de neurones

Pour le réseau de neurones, nous avons testé différents hyperparamètres et avons remarqué que la taille du réseau n'affecte pas beaucoup la performance. Cependant, les réseaux avec une seule couche cachée montrent une légère amélioration des performances. Il est donc préférable d'opter pour un petit réseau avec une couche cachée de 50 neurones. En testant différents taux d'apprentissage (learning rate) et valeurs d'alpha, nous avons constaté que les meilleurs paramètres sont un alpha de 0,001 et un taux d'apprentissage initial de 0,01. Au final, nous obtenons un score de 70% sur Kaggle.





Random forest

Dans notre dernière étapes nous avons affiné notre recherche (en passant de randomGridCV à GridCV) avec les paramètres suivants : **min_samples_leaf** : entre 3 et 9, **max_depth** : entre 40 et 60 (car pas d'amélioration au dessus apart pour la variance mais très légère), **min_samples_split** : 5 et 20 (car pas de différence significative observée), n_estimators : 150, 500, 1000

mean_test_score	std_test_score	params	rank_test_score
0.7248076402356666	0.004079373999909413	{'max_depth': np.int64(40), 'min_samples_leaf': np.int64(5), 'min_samples_split': np.int64(20), 'n_estimators': np.int64(575)}	1
0.724552951765201	0.006874653736156651	{'max_depth': np.int64(40), 'min_samples_leaf': np.int64(5), 'min_samples_split': np.int64(5), 'n_estimators': np.int64(1000)}	2
0.7237765727632338	0.004086874124467256	{'max_depth': np.int64(65), 'min_samples_leaf': np.int64(7), 'min_samples_split': np.int64(5), 'n_estimators': np.int64(1000)}	3
0.7226885659807657	0.006186569293734672	{'max_depth': np.int64(40), 'min_samples_leaf': np.int64(7), 'min_samples_split': np.int64(5), 'n_estimators': np.int64(1000)}	4
0.7225661987305472	0.00967948459740562	{'max_depth': np.int64(65), 'min_samples_leaf': np.int64(5), 'min_samples_split': np.int64(20), 'n_estimators': np.int64(575)}	5
0.7220547137636081	0.0034643615739522555	{'max_depth': np.int64(40), 'min_samples_leaf': np.int64(5), 'min_samples_split': np.int64(20), 'n_estimators': np.int64(1000)}	6
0.721897402702884	0.007903547831753684	{'max_depth': np.int64(65), 'min_samples_leaf': np.int64(5), 'min_samples_split': np.int64(20), 'n_estimators': np.int64(1000)}	7
0.7218178492789602	0.005123657807216601	{'max_depth': np.int64(40), 'min_samples_leaf': np.int64(9), 'min_samples_split': np.int64(5), 'n_estimators': np.int64(1000)}	8
0.7217983213022094	0.004831230714418824	{'max_depth': np.int64(90), 'min_samples_leaf': np.int64(7), 'min_samples_split': np.int64(5), 'n_estimators': np.int64(1000)}	9
0.7217204423998025	0.005577173209008841	{'max_depth': np.int64(40), 'min_samples_leaf': np.int64(7), 'min_samples_split': np.int64(5), 'n_estimators': np.int64(575)}	10

Figure 2: Top 10 score de la recherche

max_depth = 40 apparaît dans 5 des 10 meilleures configurations
Les deux meilleures configurations ont : min_samples_leaf = 5, max_depth = 40 On retrouve bien 8 fois parmis 10 1000 estimators ce qui montre qu'il est preferable mais seulement pour une très légère amélioration.
Les écarts-types sont relativement faibles (entre 0.003 et 0.009)
Nous allons donc tester (avec $max\_depth = 40$):

```
{'min_samples_leaf': (5), 'min_samples_split': (5), 'n_estimators': (1000)}

{'min_samples_leaf': (5), 'min_samples_split': (5), 'n_estimators': (575)}
```

Résultat kaggle : 0.73034 et 0.72949 respectivemnt ce qui est un assez bon score même très légèrement meilleur que par la cross-validdation !

6 Discussion

Pour le modèle de Naive Bayes, nous avons obtenu un modèle performant avec un score macro F1 de 73,5% sur l'ensemble de test. Ce résultat n'est pas particulièrement surprenant, car l'approche Naive Bayes avec bag of words, semble bien adaptée à ce type de problème de classification de textes. Ce modèle présente plusieurs avantages. Il est simple à mettre en oeuvre, rapide à entraîner. Cependant, cette méthode montre aussi ses limites lorsqu'elle est appliquée à des textes plus complexes. Pour amélioré la technique, nous pourrions tanté de capturé la relation entre les caractère du text pour avoir une prédiction plus réaliste.

Pour notre réseau de neurones, bien que les performances obtenues soient légèrement inférieures au modèle de Naive Bayes (score macro F1 de 70%), cette approche reste prometteuse pour des tâches impliquant des relations complexes entre les termes. Cependant, un inconvénient majeur est le coût en termes de puissance de calcul, qui peut rendre l'entraînement et la recherche d'hyperparamètres longs et trop chère en ressources. En raison des contraintes de calcul, nous avons testé une gamme limitée d'hyperparamètres. Avec davantage de temps et un accès à des ressources de calcul accrues, une recherche d'hyperparamètres plus poussé aurait pu nous permettre d'améliorer les performances du réseau de neurones.

Pour la random forest, la stratégie de recherche progressive a permis d'explorer efficacement l'espace des hyperparamètres tout en maintenant des temps de calcul raisonnables. L'isolation des paramètres a fourni une compréhension approfondie de leur impact individuel. La stabilité des résultats, avec des écarts-types entre 0.003 et 0.009, confirme la robustesse du modèle.
Cependant, cette méthodologie comporte certaines limitations. La recherche séquentielle, bien qu'efficace en temps de calcul, peut masquer des interactions importantes entre les hyperparamètres.
Nous aurions aussi pu envisagées l'implémentation d'une optimisation bayésienne permettant une exploration plus intelligente de l'espace des hyperparamètres

7 Conclusion

Les différentes techniques donnent sensiblement des résultats semblables, mais notre hypothèse de départ semble être bonne, car effectivement le Naïve Bayes obtient le meilleur score pour ce problème. Bien entendu, avec plus de temps et de ressources, nous serions en mesure d'obtenir des résultats sensiblement meilleurs.

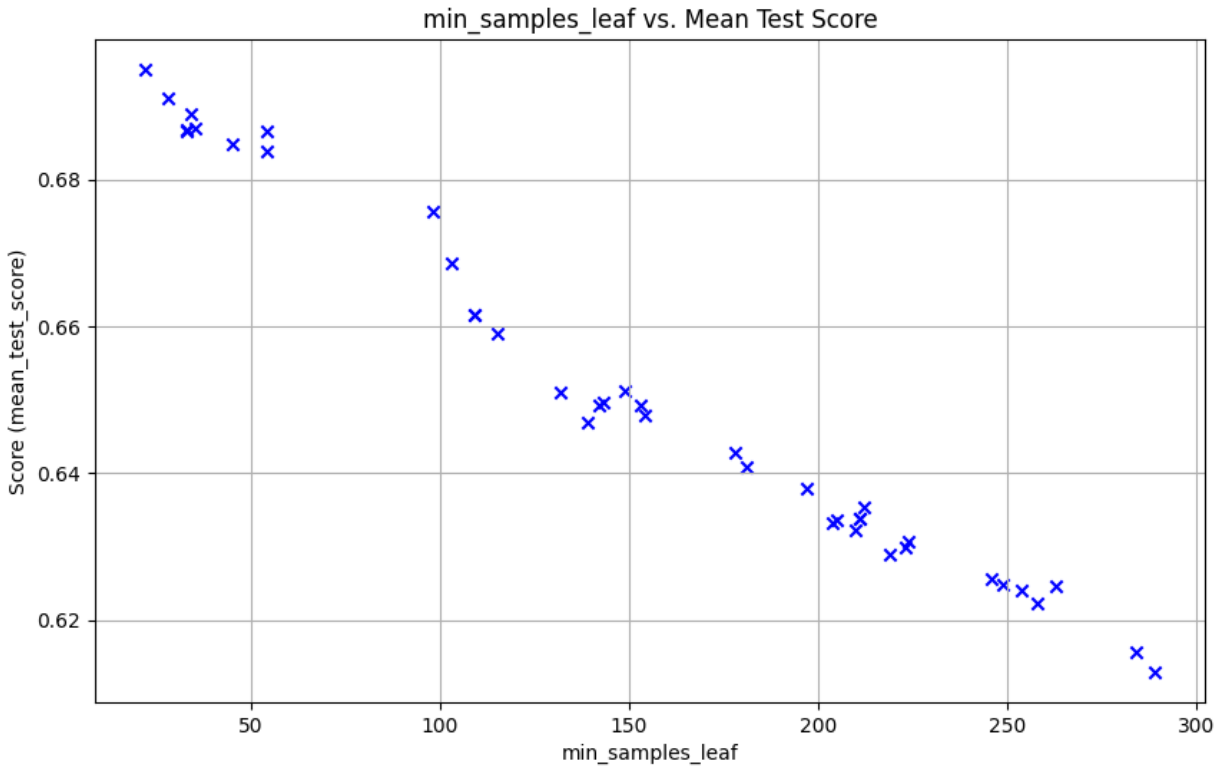
8 Références

https://medium.com/@dancerworld60/demystifying-naïve-bayes-log-probability-and-laplace-smoothing-d6da61b0e70b
https://scikit-learn.org/dev/modules/generated/sklearn.neural$_network.MLPClassifier.html$

Annexe

1

Pour min_samples_leaf, nous voyons clairement une baisse de performance plus on l'augmente ce qui est bien normale. En effet il faut pouvoir apprendre à classifier de petit groupe de donnée. (pas trop petit)



2

Pour min_samples_split, peu importe la valeur entre 20 et 500 , il n'y avait que très peu de variation (moins de 1%). Ceci est assez étonant mais cela montre à quelle point les randoms forest peuvent bien s'adapter.

Ceci est peut être aussi dû au petite taille d'arbre si nous avions tester sur des arbres plus profond cela aurait pu changer les résultat.