

Stacking Generalisé à 2 Niveaux : Analyse Comparative Multi-Datasets Techniques Prédictives – mini Projet de Module

Mohamed Amine Bellatreche Soltane Rezaiguia

Université USTO – ING 4 Data Science

Module : Techniques Prédictives

Encadré par : Pr. Bouziane H.

Année universitaire 2024–2025

Sommaire

- 1 Introduction
- 2 Fondements théoriques
- 3 Architecture proposée
- 4 Méthodologie expérimentale
- 5 Présentation des datasets
- 6 Résultats expérimentaux
- 7 Comparaison multi-datasets
- 8 Analyse de la diversité
- 9 Discussion
- 10 Conclusions et recommandations
- 11 Livrables

Pourquoi les méthodes d'ensemble ?

En classification, un seul modèle capture rarement toute la structure des données. Chaque algorithme possède ses propres **biais inductifs** :

- **Random Forest** : découpe l'espace par arbres aléatoires
- **SVM** : cherche un hyperplan de marge maximale
- **Régression logistique** : frontière linéaire probabiliste
- **KNN** : vote par proximité dans l'espace
- **Naïve Bayes** : hypothèse d'indépendance conditionnelle

Idée fondatrice

Si ces modèles se trompent sur des observations *differentes*, on peut combiner leurs prédictions pour réduire l'erreur globale.

Question de recherche

Le stacking à 2 niveaux améliore-t-il systématiquement les performances par rapport aux modèles individuels ? Sous quelles conditions ?

Le stacking : principe général

Le **stacking** (ou *stacked generalization*), proposé par Wolpert (1992), repose sur un principe simple mais puissant :

- ① Entraîner M modèles de base (niveau 0) sur les données d'entraînement
- ② Collecter leurs prédictions comme **méta-features**
- ③ Entraîner un **méta-modèle** (niveau 1) qui apprend la combinaison optimale

Contrairement au *voting* simple (moyenne), le métamodèle apprend à pondérer adapté aux forces de chaque modèle.

Formulation

Soit h_1, h_2, \dots, h_M les modèles de base. Pour une observation x , on construit :

$$z = (h_1(x), h_2(x), \dots, h_M(x))$$

Le métamodèle g prédit :

$$\hat{y} = g(z) = g(h_1(x), \dots, h_M(x))$$

Condition clé

Le stacking fonctionne si les modèles de base commettent des erreurs **non corrélées** entre eux.

OOF vs Blending : deux stratégies

Out-Of-Fold (OOF)

- ➊ Découper le train en K folds
- ➋ Pour chaque fold : entraîner sur $K-1$ folds, prédire le fold restant
- ➌ On obtient une prédition OOF pour **chaque** observation du train
- ➍ Sur le test : moyenner les K prédictions

Avantage : utilise 100% du train

Risque : plus complexe, fuite possible si mal implémenté

Blending (holdout)

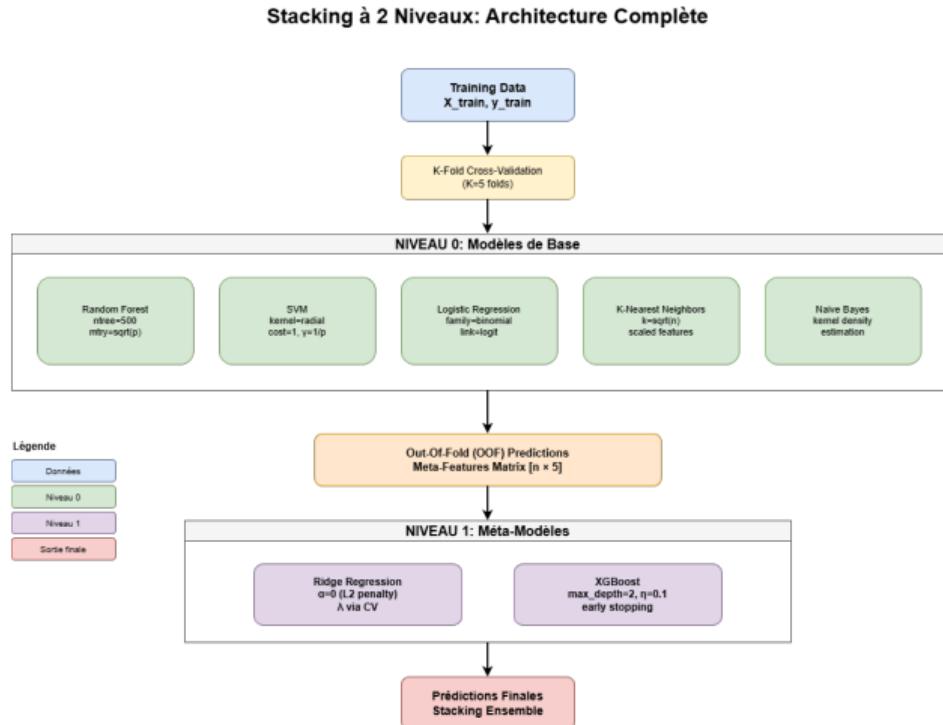
- ➊ Séparer une portion du train (ex. 25%) comme ensemble de validation
- ➋ Entraîner les modèles sur les 75% restants
- ➌ Prédire sur le holdout → méta-features
- ➍ Le méta-modèle s'entraîne sur le holdout uniquement

Avantage : simple à implémenter

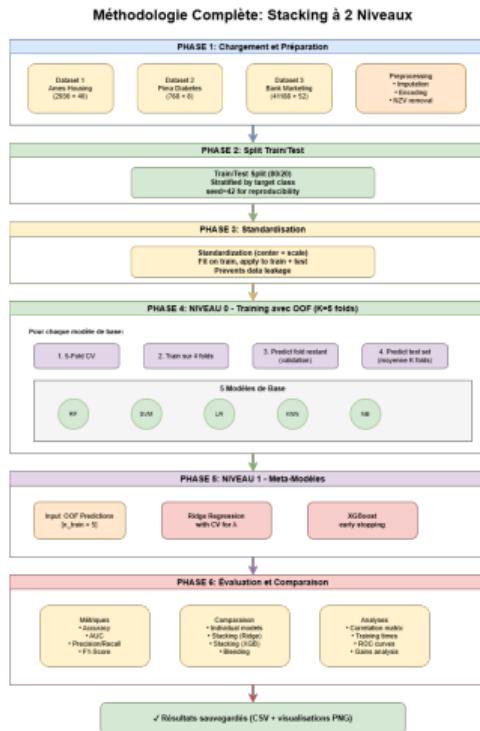
Risque : perte de 25% des données pour le méta-modèle

Dans notre étude, nous implémentons les deux approches pour les comparer directement.

Architecture du Stacking à 2 niveaux



Pipeline expérimental complet



Choix d'implémentation

Environnement

- Langage : **R** (version 4.5.2)
- IDE : Jupyter Notebook avec noyau R
- Packages principaux : caret, randomForest, e1071, glmnet, xgboost, pROC

Préprocessing

- Imputation par médiane
- Encodage one-hot des catégorielles
- Suppression des features à variance quasi-nulle (`nearZeroVar`)
- Standardisation center + scale

Protocole de validation

- Split train/test : **80%/20%**, stratifié
- Validation croisée interne : **5-fold**
- Graine aléatoire fixée (`seed=42`) pour la reproductibilité

Métriques d'évaluation

- **Accuracy** : taux de bonne classification
- **AUC** : aire sous la courbe ROC
- **Précision, Rappel, F1-Score**
- **Temps d'entraînement** (secondes)

Trois datasets, trois défis

Propriété	Ames Housing	Pima Diabetes	Bank Marketing
Source	AmesHousing (R)	mlbench (R)	UCI Repository
Domaine	Immobilier	Médical	Financier
Observations	2 930	768	41 188
Features	40 (mixtes)	8 (num.)	52 (mixtes)
Cible	Prix > médiane	Diabète pos/neg	Souscription oui/non
Équilibre	50/50	65/35	89/11
Split train	2 345	615	32 951
Split test	585	153	8 237

- **Ames** : grand dataset équilibré, features mixtes → cas favorable
- **Pima** : petit dataset, peu de features, classes déséquilibrées → cas difficile
- **Bank** : très grand, fortement déséquilibré (11% positifs) → cas réel

Pourquoi ces 3 datasets ?

Ames Housing

- 40 features après encodage
- Features immobilières (qualité, surface, année, etc.)
- Taille suffisante pour l'OOF
- Baseline élevée ($\approx 91\%$)

Pima Diabetes

- Seulement 8 features médicales
- 768 observations
- Données bruitées (zéros = NA)
- Teste la robustesse du stacking avec peu de données

Bank Marketing

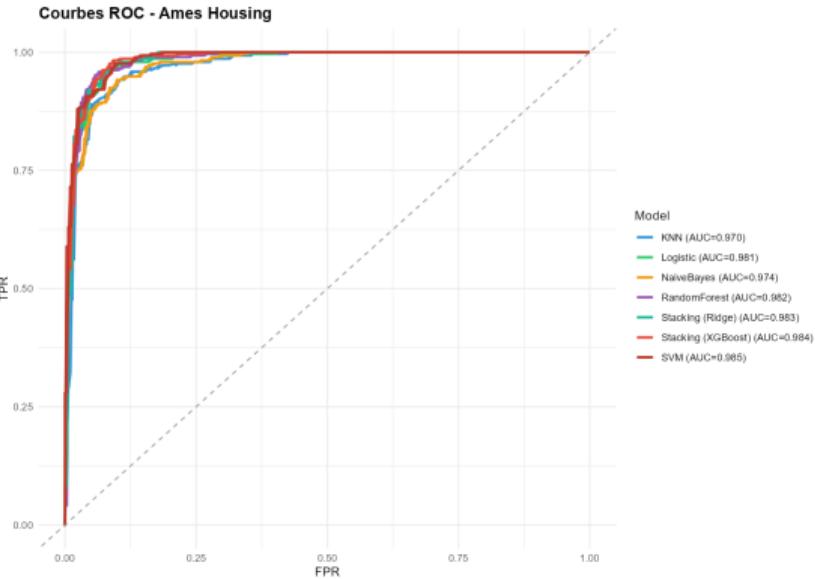
- 52 features après encodage
- Déséquilibre sévère (89/11)
- 41k observations
- Haute dimensionnalité → diversité naturelle

L'objectif est de tester le stacking dans des **conditions variées** : taille du dataset, nombre de features, degré de déséquilibre et domaine applicatif.

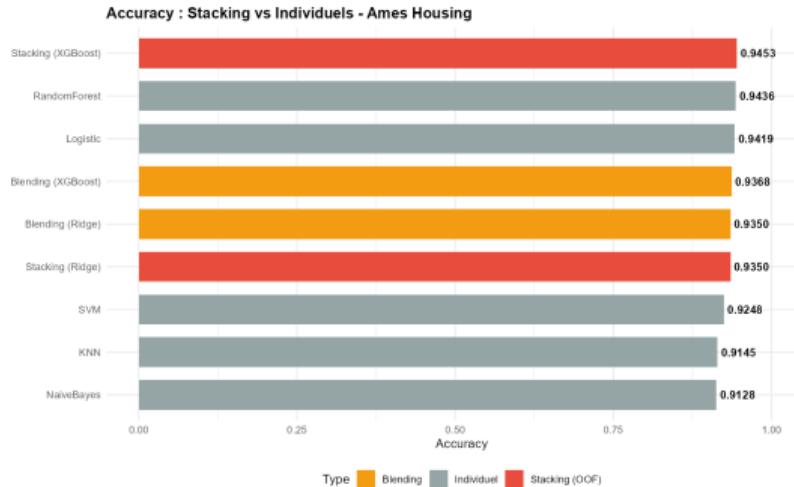
Dataset 1 : Ames Housing – Résultats

Modèle	Acc.	AUC	F1
Stacking (XGB)	0.9453	0.9838	0.9461
RandomForest	0.9436	0.9818	0.9436
Logistic	0.9419	0.9809	0.9424
Blending (XGB)	0.9368	0.9837	0.9384
Stacking (Ridge)	0.9350	0.9827	0.9349
Blending (Ridge)	0.9350	0.9820	0.9349
SVM	0.9248	0.9847	0.9247
KNN	0.9145	0.9698	0.9144
Naïve Bayes	0.9128	0.9743	0.9101

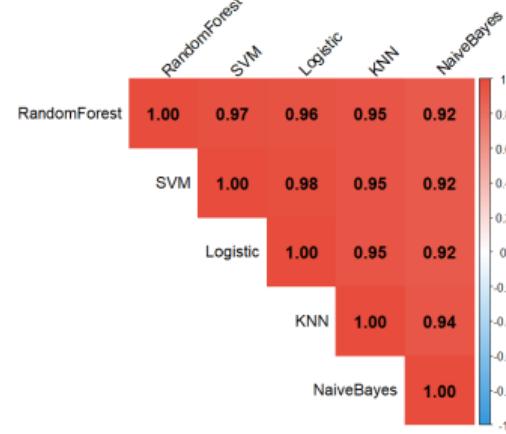
- Stacking XGBoost en tête : **+0.17 pp** vs RF
- Gain modeste car corrélation très élevée (0.944)
- Tous les modèles dépassent 91% d'accuracy



Dataset 1 : Ames Housing – Visualisations



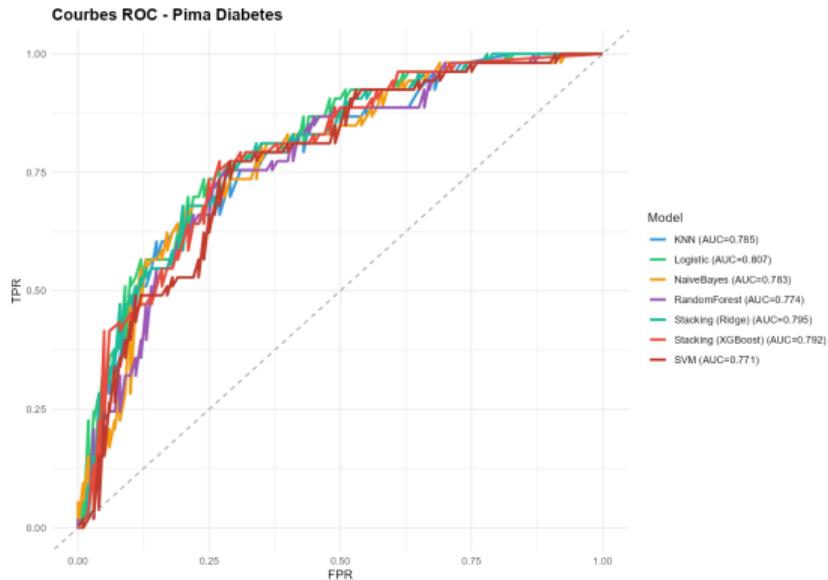
Correlation Predictions Niveau 0 - Ames Housing



Gauche : classement par accuracy. Droite : matrice de corrélation des prédictions OOF.
La corrélation moyenne est de **0.944** : les modèles produisent des prédictions très similaires.

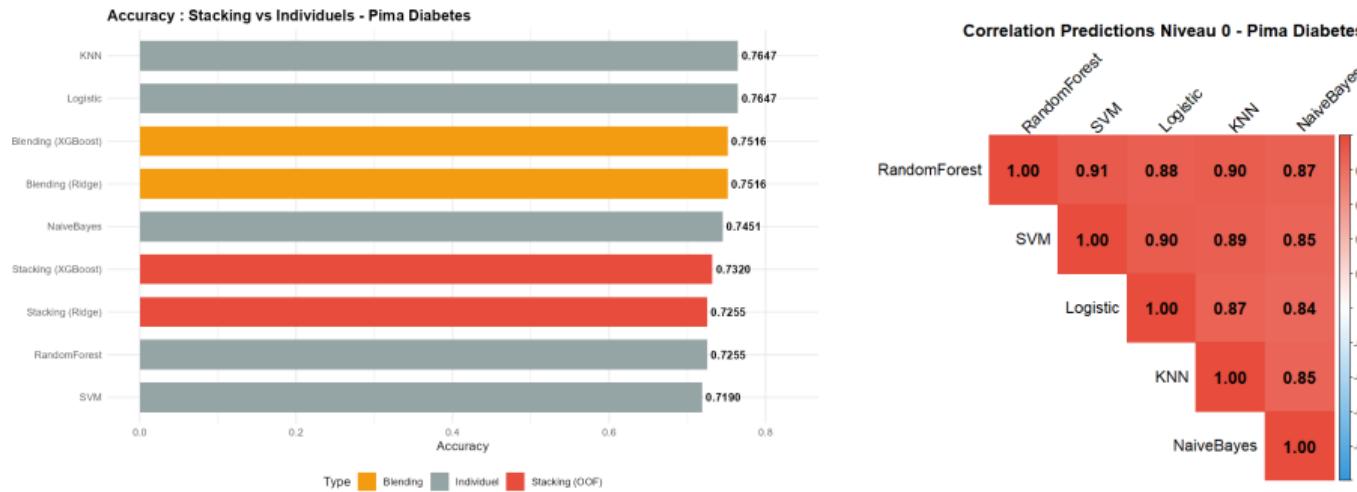
Dataset 2 : Pima Diabetes – Résultats

Modèle	Acc.	AUC	F1
Logistic	0.7647	0.8070	0.6250
KNN	0.7647	0.7855	0.6400
Blending (Ridge)	0.7516	0.8011	0.6275
Blending (XGB)	0.7516	0.8030	0.6607
Naïve Bayes	0.7451	0.7828	0.6355
Stacking (XGB)	0.7320	0.7916	0.6019
RandomForest	0.7255	0.7741	0.5882
Stacking (Ridge)	0.7255	0.7955	0.5800
SVM	0.7190	0.7711	0.5567



- Le stacking **dégrade** les performances :
-3.27 pp
- Le blending fait mieux (+0.33 pp vs stacking)
- Cause : dataset trop petit (615 obs train) pour l'OOB

Dataset 2 : Pima Diabetes – Visualisations

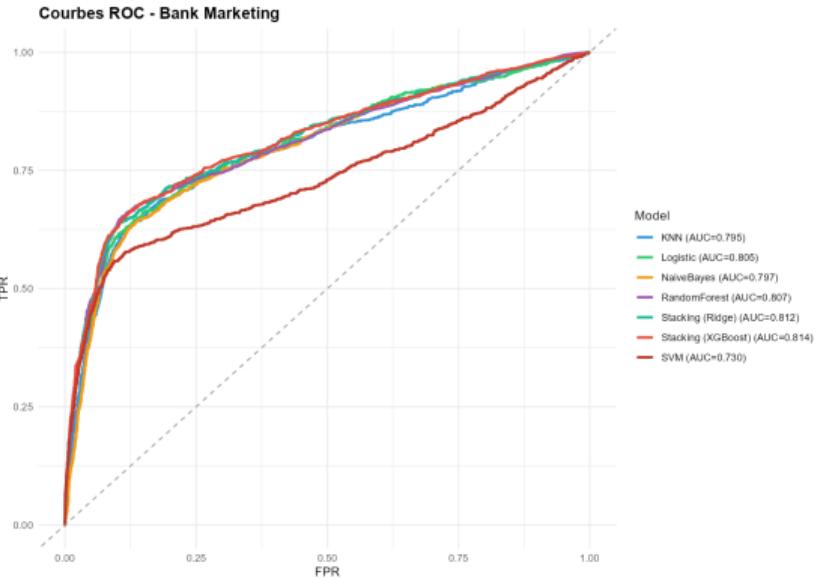


Corrélation moyenne : **0.877**. Avec seulement 8 features, les modèles explorent le même espace et produisent des prédictions semblables. Le méta-modèle n'a pas assez de signal complémentaire pour améliorer la classification.

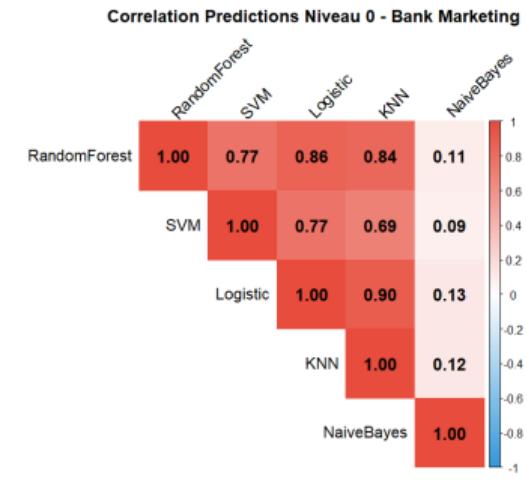
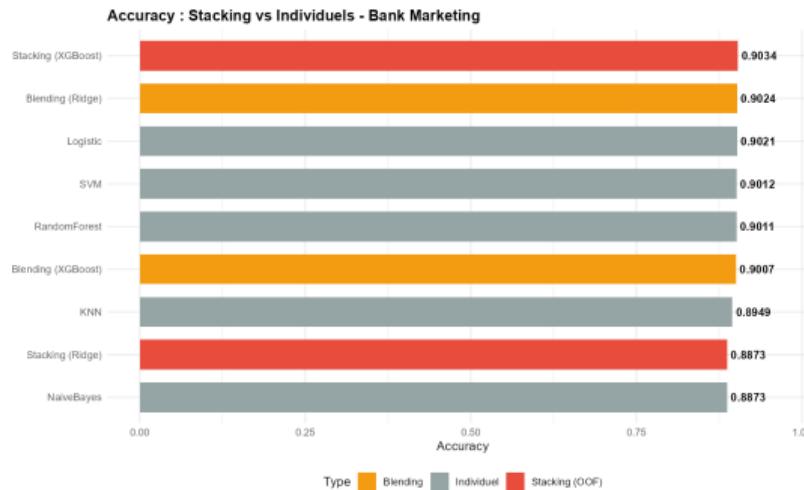
Dataset 3 : Bank Marketing – Résultats

Modèle	Acc.	AUC	F1
Stacking (XGB)	0.9034	0.8141	0.3486
Blending (Ridge)	0.9024	0.8094	0.3748
Logistic	0.9021	0.8049	0.3623
SVM	0.9012	0.7303	0.3361
RandomForest	0.9011	0.8073	0.3783
Blending (XGB)	0.9007	0.8104	0.3339
KNN	0.8949	0.7946	0.1996
Naïve Bayes	0.8873	0.7967	–
Stacking (Ridge)	0.8873	0.8120	–

- Stacking XGBoost : meilleur AUC (**+0.92 pp**)
- F1-Scores très faibles → déséquilibre 89/11
- NB et Stacking Ridge n'arrivent pas à prédire la classe minoritaire



Dataset 3 : Bank Marketing – Visualisations



Corrélation moyenne : **0.528**. Naïve Bayes est très décorrélé des autres (≈ 0.10).

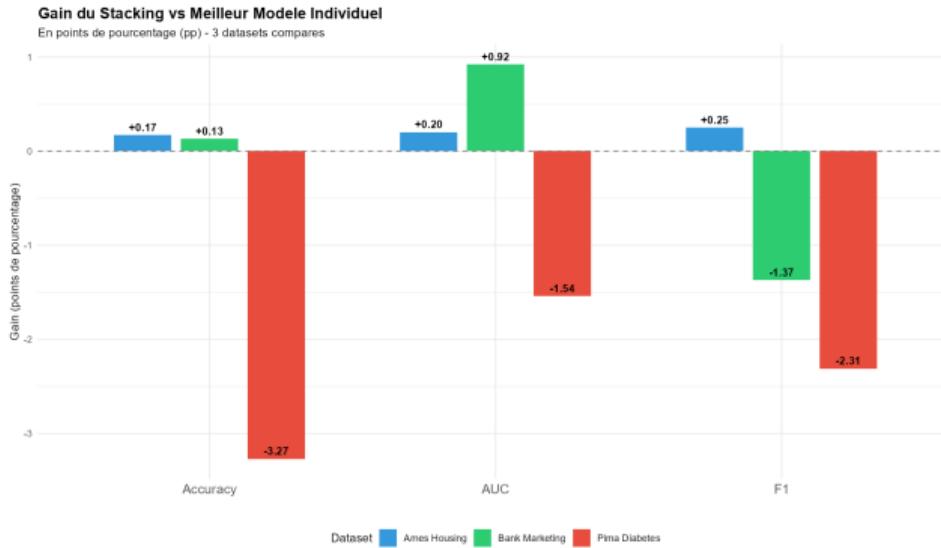
Cette diversité permet au stacking d'exploiter des signaux complémentaires, d'où le gain en AUC malgré le problème de déséquilibre.

Vue d'ensemble : Stacking vs Individuels

Comparaison Multi-Datasets: Stacking vs Modèles Individuels



Gains du stacking par dataset



	Acc.	AUC	F1
Ames	+0.17	+0.20	+0.25
Pima	-3.27	-1.54	-2.31
Bank	+0.13	+0.92	-1.37

Table – *

Gains en points de pourcentage (pp)

- ▶ Ames et Bank : gain en Accuracy et AUC
- ▶ Pima : le stacking dégrade sur toutes les métriques
- Le F1 sur Bank est tiré vers le bas par le déséquilibre sévère

Corrélation des prédictions : facteur déterminant

Correlation des Predictions Niveau 0 : Comparaison 3 Datasets

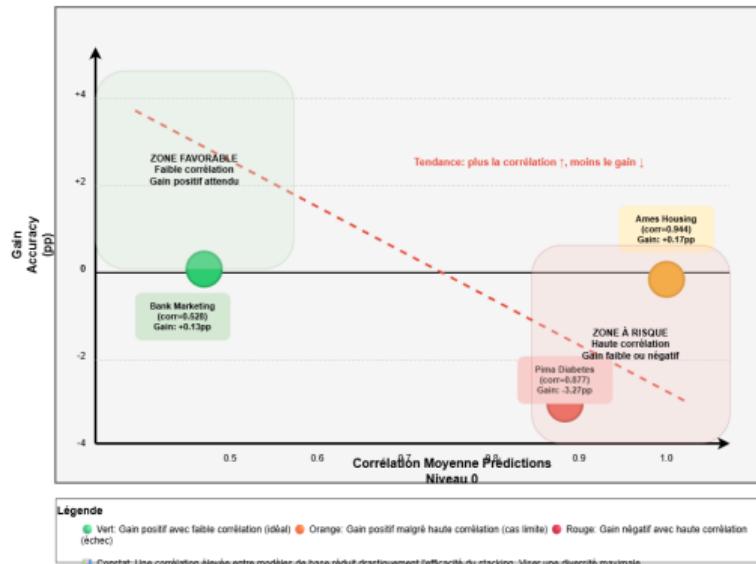
Plus faible corrélation = meilleure diversité pour le stacking



Ames : corrélation ≥ 0.92 partout. **Pima** : corrélation autour de 0.85–0.91. **Bank** : Naïve Bayes quasi-indépendant (≈ 0.10), diversité marquée.

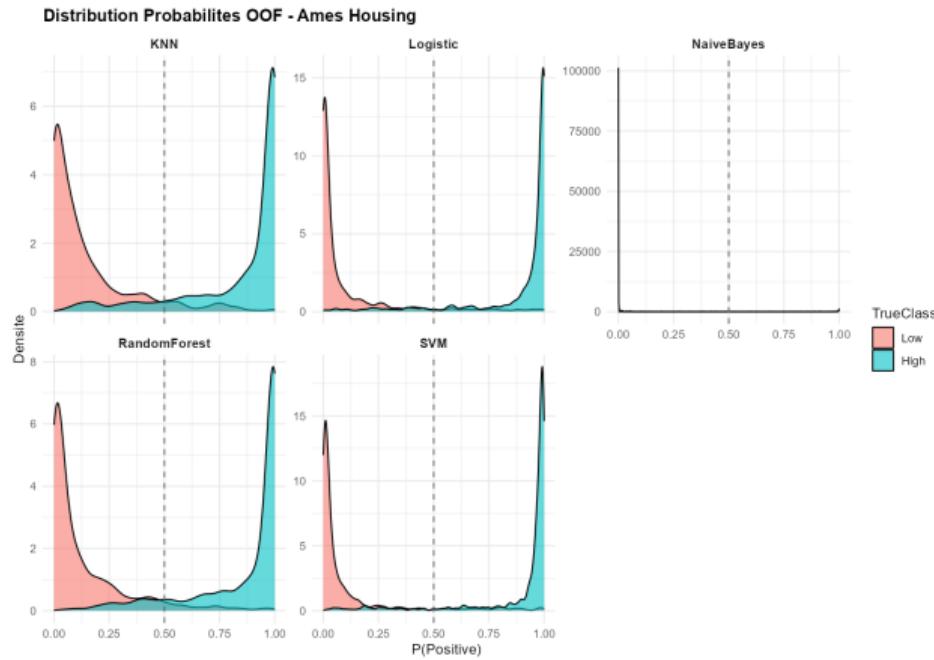
Corrélation ↔ gain du stacking

Relation: Corrélation des Modèles ↔ Gain du Stacking



Relation observée : plus la corrélation entre modèles de base est forte, moins le stacking apporte de gain. Les modèles doivent être **divers** pour que le méta-modèle ait de l'information complémentaire à exploiter.

Distribution des probabilités OOF – Ames Housing



Les distributions OOF montrent une bonne séparation des classes pour la majorité des modèles. Les zones de chevauchement autour de 0.5 sont là où le méta-modèle peut apporter une correction.

OOF vs Blending : résultats empiriques

Dataset	OOF	Blending	Δ (pp)
Ames Housing	0.9453	0.9368	+0.85
Pima Diabetes	0.7320	0.7516	-1.96
Bank Marketing	0.9034	0.9024	+0.10
Moyenne	0.8602	0.8636	-0.34

L'OOF est généralement supérieur sur les grands datasets car il exploite la totalité des données d'entraînement.

Quand préférer l'OOF ?

- Dataset de taille suffisante (> 1000 obs)
- Quand chaque observation compte
- Implémentation rigoureuse (pas de fuite)

Quand préférer le Blending ?

- Petit dataset où l'OOF risque de sur-apprendre
- Prototypage rapide
- Quand la simplicité prime

Coût computationnel

Modèle	Ames	Pima	Bank
RandomForest	18.1 s	1.4 s	450 s
SVM	5.5 s	0.4 s	5275 s
Logistic	0.4 s	0.1 s	6.2 s
KNN	1.1 s	0.3 s	214 s
Naïve Bayes	0.7 s	0.1 s	2.0 s
Stacking (XGB)	27.6 s	3.6 s	5951 s
Stacking (Ridge)	28.4 s	3.9 s	5973 s

Constat

Le stacking cumule le temps de **tous les modèles de base** (5 modèles × 5 folds) plus le méta-modèle.

Sur Bank Marketing, le SVM prend à lui seul **1h28** sur les 5 folds, ce qui porte le stacking à près de **1h40** au total.

Pour un gain de +0.13 pp en accuracy, la question du rapport coût/bénéfice se pose.

Insights clés

Conclusions et Insights Clés

Stacking multi-datasets (Ames, Pima, Bank Marketing)

1. Diversité & Corrélation

Corrélation < 0.7 : stacking très rentable
Corrélation 0.7-0.9 : gains modérés
Corrélation > 0.9 : gain faible ou négatif

Exemples : Bank Marketing (corr=0.53, gain AUC +0.92pp) vs Ames Housing (corr=0.94, gain +0.17pp).

2. Taille du dataset

Grand dataset (> 2k obs) : OOF stable
Dataset moyen : vigilance sur l'overfit
Petit dataset (< 500) : Blending ou bootstrap

Pima (768 obs) : stacking perd -3.27pp vs meilleur modèle.
Bank (41k obs) : stacking gagne +0.13pp accuracy.

3. Haute dimensionnalité

RF sélectionne des features, SVM exploite les noyaux, KNN souffre de la malédiction et NB repose sur des hypothèses fortes.
Ensemble, ces comportements produisent des prédictions complémentaires pour le stacking.

4. OOF vs Blending

OOF utilise 100% des données d'entraînement pour produire des meta-features. Blending sacrifie 25%.
Résultats : OOF +0.33pp en moyenne (Ames +0.65, Bank +0.10, Pima -1.96).

5. Recommandations pratiques

1. Vérifier la corrélation des prédictions de base (idéal < 0.8)
2. Valider la taille du dataset (si < 500, envisager Blending)
3. Mixez des algorithmes contrastés (arbre, noyau, linéaire, distance)
4. Surveiller le coût : stacking = 5x temps training + meta-model (Bank = 1.6h vs RF seul 7min).

CONCLUSION GENERALE

Stacking à deux niveaux fonctionne lorsque : diversité des modèles, dataset massif (>1k obs), features riches.
Il complète mais ne remplace pas un modèle individuel bien tuné, avec des gains 0.5-2pp sur les datasets favorables.

Synthèse et recommandations

Ce que l'on retient

- ➊ La **diversité** des modèles de base est le facteur n°1 du succès du stacking
- ➋ Le stacking n'améliore **pas systématiquement** les performances : il faut vérifier les conditions
- ➌ Sur Pima, un simple modèle logistique bat l'ensemble du pipeline
- ➍ L'OOF surpassé le blending sur les grands datasets, mais pas toujours sur les petits

Guide pratique

Avant de déployer un stacking :

- ➊ Calculer la corrélation entre prédictions de base
 - Si > 0.9 : gain négligeable probable
 - Si < 0.7 : stacking potentiellement utile
- ➋ Vérifier la taille du dataset (idéalement $> 1\,000$ obs pour l'OOF)
- ➌ Privilégier des algorithmes de natures différentes
- ➍ Évaluer le coût computationnel par rapport au gain espéré

Limites et perspectives

Limites de notre étude

- Nombre de datasets limité à 3
- Pas d'optimisation fine des hyperparamètres (grid search) pour les modèles de base
- Le déséquilibre de Bank Marketing n'a pas été traité (SMOTE, sous-échantillonnage)
- Un seul split train/test (pas de répétitions multiples)

Pistes d'amélioration

- Ajouter des modèles plus divers (réseaux de neurones, LDA, gradient boosting simple)
- Appliquer un resampling (SMOTE) avant stacking
- Optimiser les hyperparamètres de chaque modèle de base
- Tester le stacking à 3 niveaux
- Étendre à des problèmes multi-classes et de régression

Récapitulatif des livrables

Code et données

- Notebook R complet (`stacking_dual_dataset.ipynb`)
- Pipeline générique réutilisable (`run_stacking_pipeline`)
- 3 datasets préparés et prétraités

Résultats (CSV)

- Tables de résultats par dataset
- Matrices de corrélation
- Accuracies par fold
- Table comparative cross-dataset
- Table de synthèse pour LATEX

Visualisations (40+ fichiers PNG)

- Courbes ROC par dataset
- Barplots d'accuracy
- Heatmaps de corrélation
- Distributions OOF
- Compromis performance/temps
- Comparaisons multi-datasets

Diagrammes (Draw.io)

- Architecture du stacking
- Workflow méthodologique
- Comparaison des résultats

Références

-  Wolpert, D. H. (1992).
Stacked Generalization.
Neural Networks, 5(2), 241–259.
-  Breiman, L. (1996).
Stacked Regressions.
Machine Learning, 24(1), 49–64.
-  Ting, K. M. & Witten, I. H. (1999).
Issues in Stacked Generalization.
Journal of Artificial Intelligence Research, 10, 271–289.
-  van der Laan, M. J., Polley, E. C. & Hubbard, A. E. (2007).
Super Learner.
Statistical Applications in Genetics and Molecular Biology, 6(1).
-  De Cock, D. (2011).

Merci pour votre attention

Questions ?

Mohamed Amine Bellatreche & Soltane Rezaiguia
USTO – ING 4 Data Science
Techniques Prédictives – Pr. Bouziane H.