Scikit-learn: структура библиотеки и принципы проектирования

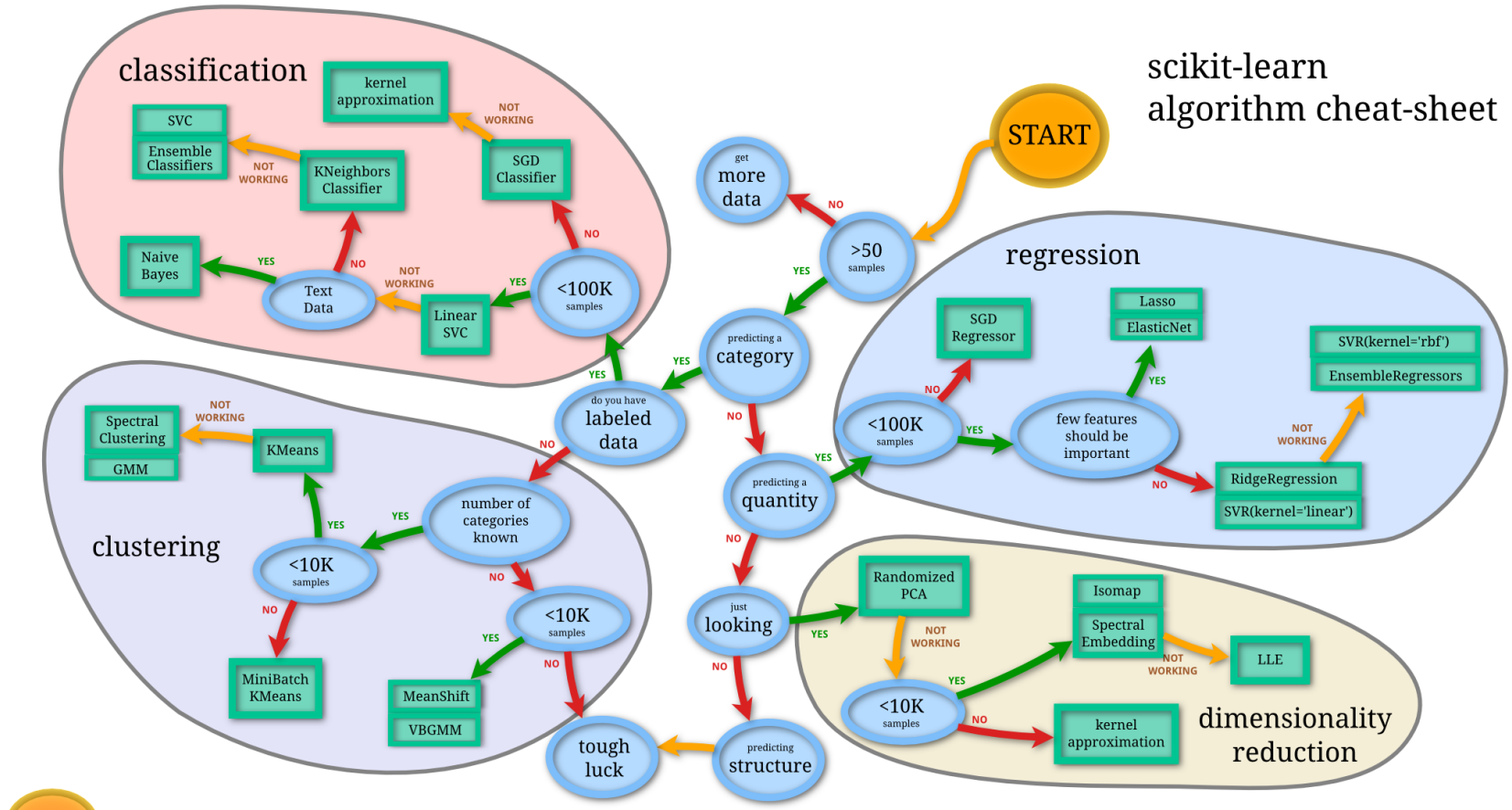
Першин Антон Юрьевич, Ph.D.
Никольская Анастасия Николаевна

Программа «Большие данные и распределенная цифровая платформа»
Санкт-Петербургский государственный университет

Практика по дисциплине «Технологии ИИ»
11 марта 2023 г.

Обзор Scikit-learn

Scikit-learn является easy-to-use библиотекой для машинного обучения, реализующей множество полезных методов.



Обзор Scikit-learn

`Scikit-learn` обеспечивает следующую функциональность:

- → Препроцессинг (обработка и преобразование признаков, их отбор)
- → Понижение размерности (PCA, LLE, t-SNE etc.)
- → Решение задач:
  - регрессии (линейные модели, деревья решений, SVM, GP etc.)
  - классификации (логистическая регрессия, деревья решений, SVM, etc.)
  - кластеризации (k-means, MeanShift, BIRCH, DBSCAN etc.)
- → Создание мета-моделей (ансамбли: бэггинг, бустинг, стэкинг)
- → Выбор моделей (кросс-валидация, поиск гиперпараметров)

Структура API Scikit-learn

Все объекты в `Scikit-learn` находятся в рамках общего API, который строится вокруг трех дополняющих друг друга интерфейсов:

- → **Estimator** (строит и обучает модели)
- → **Predictor** (выполняет предсказание/inference)
- → **Transformer** (преобразует данные)

Общие принципы построения API `Scikit-learn`:

- → **Consistency:** все объекты (простые и сложные) используют общий интерфейс, состоящий из ограниченного набора методов
- → **Inspection:** все параметры, передаваемые на вход моделям и полученные во время обучения, сохраняются и доступны как открытые аттрибуты класса
- → **Non-proliferation of classes:** специализированные классы используются только для моделей, остальные объекты представлены стандартными типами/классами (например, датасетами могут быть numpy массивы, разреженные scipy матрицы или датафреймы pandas)
- → **Composition:** везде, где это возможно, модели реализованы так, чтобы их можно было использовать как "строительные блоки" других композиционных моделей
- → **Sensible defaults:** все параметры моделей должны иметь "разумные" значения по умолчанию, чтобы модель можно было использовать для получения baseline решения

Интерфейс Estimator

Любая модель `Model`, имеющая параметры, обучаемые на входных данных `X` и выходных `y`, должна реализовать интерфейс Estimator:

1. Отнаследоваться от `sklearn.base.BaseEstimator` (под параметрами здесь понимаются гиперпараметры, передаемые в конструктор)

```
class BaseEstimator:
    def get_params(deep=True):
        ...

    def set_params(**params):
        ...
```

2. Реализовать `fit(X, y, **kwargs)`

Пример использования:

```
X = np.random.randint(10, size=(1000, 2))
y = np.ones((1000, 1))
model = Model(hyperparameter=1e-3)
model.fit(X, y)
```

Интерфейс Estimator

Инициализация и обучение модели строго разделены:

→ `__init__()` принимает только гиперпараметры модели как явно заданные ключевые слова

→ `fit(X, y)` принимает данные для обучения и возвращает `self`

Параметры модели:

→ Гиперпараметры хранятся как аттрибуты класса

→ Обучаемые параметры хранятся как аттрибуты с "_" на конце

Пример:

```
1 class SubtractMeanAndShiftEstimator(BaseEstimator):
2     def __init__(self, shift=0.):
3         self.shift: float = shift
4         self.means_: NDArray = None
5 
6     def fit(self, X: NDArray, y: Optional[NDArray]):
7         self.means_ = X.mean(axis=0)
8         return self
```

Практически все объекты в `scikit-learn`, преобразующие данные, являются Estimators

Интерфейс Predictor

Интерфейс Predictor расширяет интерфейс Estimator, добавляя к нему два метода:

- → `predict(X_test)` для предсказания по входным данным `X_test`
- → `score(X_test, y_test)` для оценки предсказания

Пример:

```
1  class SubtractMeanAndShiftEstimator(BaseEstimator):
2      def __init__(self, shift=0.):
3          self.shift: float = shift
4          self.means_: NDArray = None
5
6      def predict(self, X: NDArray) -> NDArray:
7          e = np.ones((X.shape[0], 1))
8          return X -  e @ self.means_.reshape(-1, 1).T + self.
       shift
9
10     def score(self, X: NDArray, y: NDArray) -> float:
11         return r2_score(y, self.predict(X))
```

Интерфейс Transformer

Интерфейс Transformer расширяет интерфейс Estimator:

- → Обязательно: добавить метод `transform(X)` для преобразования данных `X`
- → Опционально для работы с pipelines:
  - добавить метод `get_feature_names_out(input_features=None)` для возвращения имен преобразованных признаков
  - установить аттрибут `feature_names_in_` во время вызова `fit()`

Для создания Transformer полезными оказываются стандартные миксины:

- → `sklearn.base.TransformerMixin`
- → `sklearn.base.OneToOneFeatureMixin`
- → `sklearn.base.ClassNamePrefixFeaturesOutMixin`

FYI: миксины (mixins)

Миксином называют класс, расширяющий функциональность дочернего класса через ограниченную форму множественного наследования. Он не содержит собственных аттрибутов и не предназначен для создания экземпляров.

Рассмотрим пример базового Estimator:

```
class MyEstimator:
    def __init__(self, mean=0.):
        self.mean: float = mean

    def get_params(deep=True):
        return {"mean": self.mean}

    def set_params(mean=0.):
        self.mean = mean
```

FYI: миксины (mixins)

Создадим миксин для вывода гиперпараметров:

```
class PrinterMixin:
    def __repr__(self):
        return "\n".join([f"{att_name}: {att_value}" for
    att_name, att_value in vars(self).items()])
```

Тогда Estimator с выводом гиперпараметров будет иметь следующий вид:

```
class PrintableEstimator(MyEstimator, PrinterMixin):
    def fit(X, y):
        return self
```

Порядок базовых классов в множественном наследовании важен: он влияет на MRO (method resolution order).

Композиция Estimators

Последовательное объединение Estimators: `sklearn.pipeline.Pipeline`
Параллельное объединение Estimators: `sklearn.pipeline.FeatureUnion`

Все промежуточные шаги в Pipeline являются Transformers, а последний шаг – любой Estimator

```
from sklearn.pipeline import Pipeline
from sklearn.preprocessing import StandardScaler
from sklearn.linear_model import LinearRegression


pipeline = Pipeline([
    ("scaler", StandardScaler()),
    ("regressor", LinearRegression()),
])
...
pipeline.fit(X, y)
y_pred = pipeline.predict(X_test)  # mimics the last
    estimator interface
```

Доступ к параметрам индивидуальных Estimators организуется с помощью синтаксиса `<estimator>__<parameter>`

Композиция Estimators через Pipeline