Metody Zespołowe, Ensemble

Igor Wojnicki

March 31, 2023

Plan prezentacji

Ensemble Learning

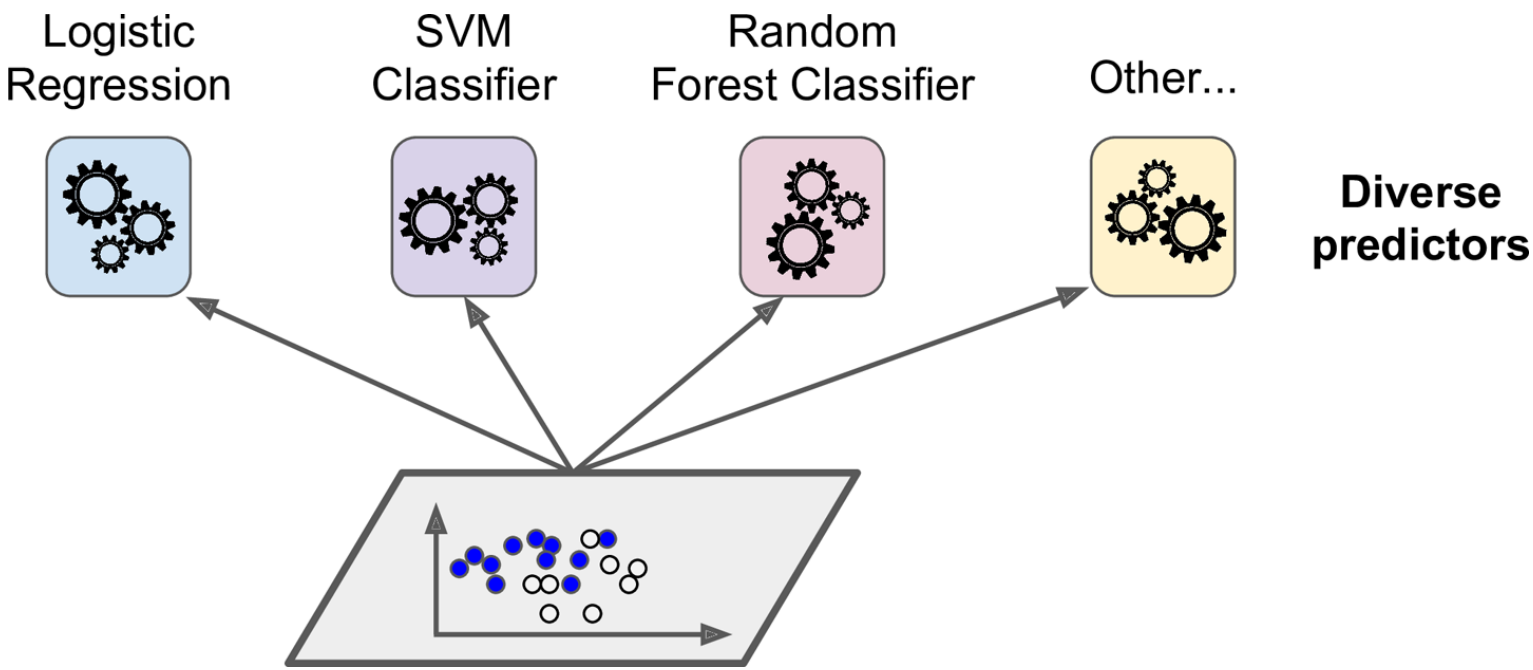
Random Forest

Podsumowanie uczenia nadzorowanego

Dlaczego Ensemble?

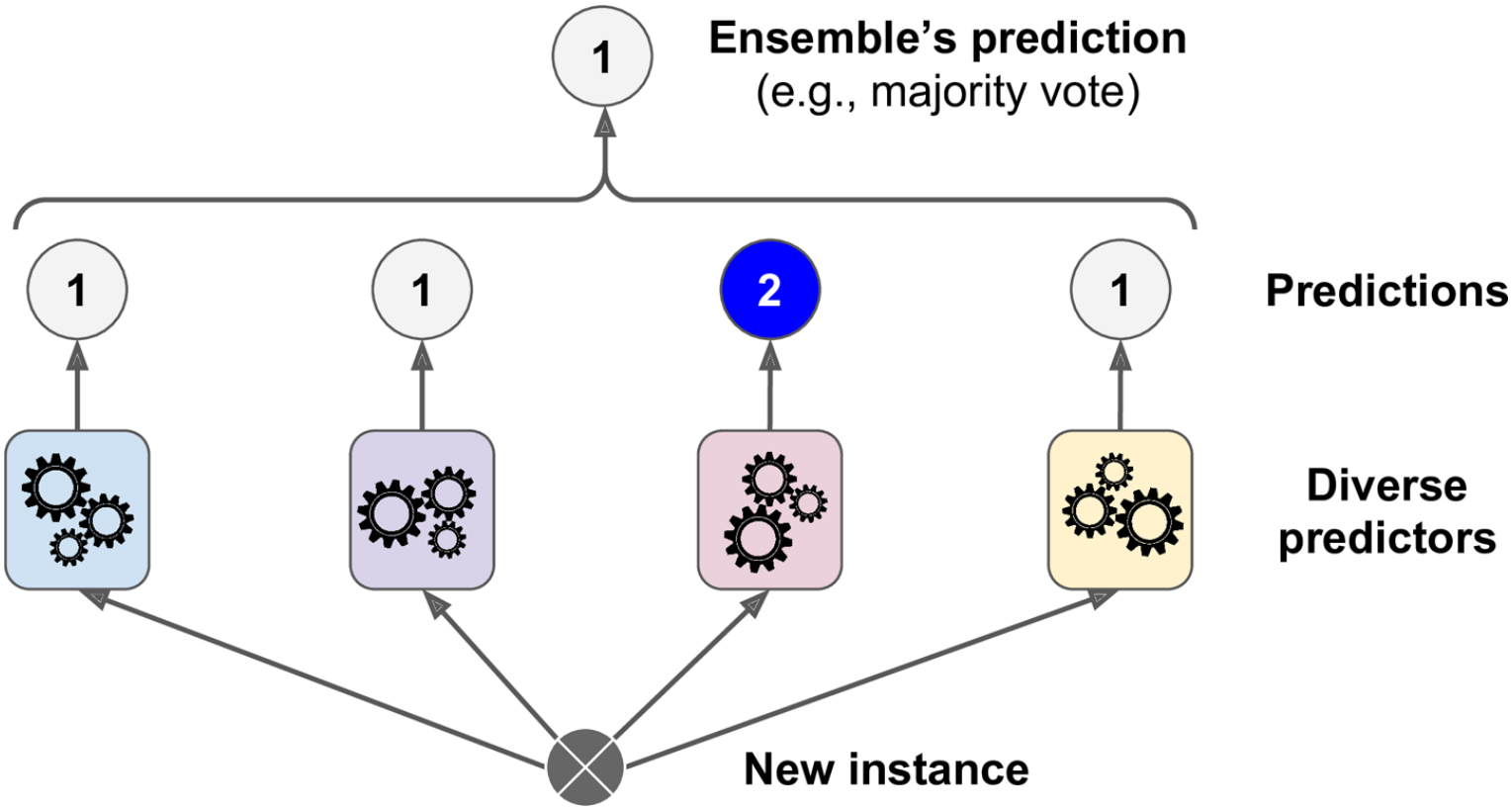
- *Wisdom of the crowd.*
- Często używane do porównania wyników.
- Równoległe.
- Sekwencyjne.

Głosowanie


Logistic Regression
SVM Classifier
Random Forest Classifier
Other...
Diverse predictors

Strategie głosowania

- Hard Voting / Majority Vote – Głosowanie Większości / większościowe



Ciekawa charakterystyka

- Ensemble zbudowane z *kiepskich* klasyfikatorów/regresorów, może działać całkiem *dobrze*
- Pod warunkiem, że klasyfikatory są niezależne.
  - Zwykle nie są bo uczone na tych samych danych...

Ensemble, przykład, dane

```
1  from sklearn.model_selection import train_test_split
2  from sklearn.datasets import make_moons
3
4  X, y = make_moons(n_samples=500, noise=0.30,
5                    random_state=42)
6  X_train, X_test, y_train, y_test = \
7      train_test_split(X, y, random_state=42)
```

Ensemble, przykład, uczenie

```
1  from sklearn.ensemble import RandomForestClassifier
2  from sklearn.ensemble import VotingClassifier
3  from sklearn.linear_model import LogisticRegression
4  from sklearn.svm import SVC
5
6  log_clf = LogisticRegression(solver="lbfgs",
7                               random_state=42)
8  rnd_clf = RandomForestClassifier(n_estimators=100,
9                                   random_state=42)
10 svm_clf = SVC(gamma="scale",
11                random_state=42)
12
13 voting_clf = VotingClassifier(
14     estimators=[('lr', log_clf),
15                 ('rf', rnd_clf),
16                 ('svc', svm_clf)],
17     voting='hard')
18
```

Ensemble, przykład, predykcja

```
print(voting_clf.predict(X_test))
```

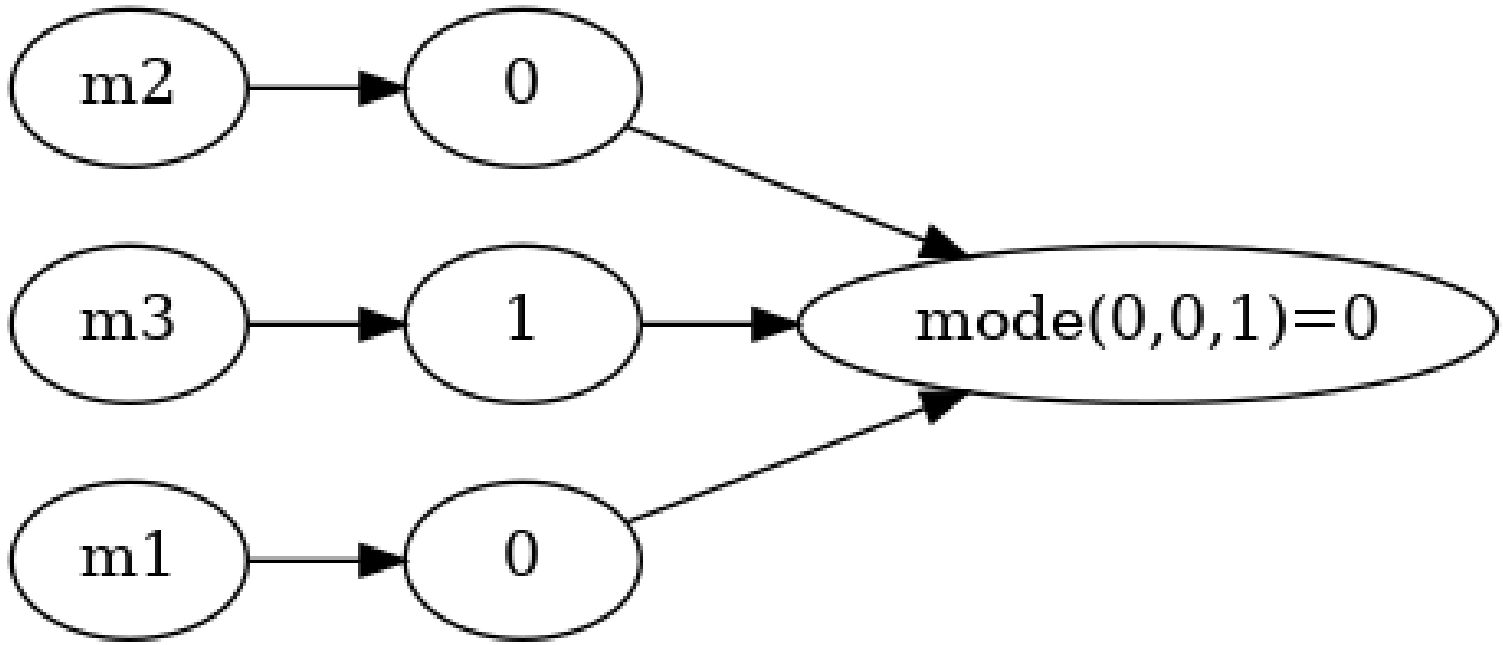
```
[1 0 0 1 1 1 0 0 0 0 1 0 1 1 1 0 0 1 1 0 0 1 1 0 0 0 1 0 1 0
 1 1 1 1 1 0 0 0 0 1 0 1 0 1 1 0 0 0 0 1 1 0 1 0 1 1 0 1 0 0
 0 0 1 1 0 0 1 1 1 0 1 1 1 0 1 1 1 0 0 0 0 1 0 0 0 1 0 1 1 0
 0 0 1 0 0 0 0 0 1 1 1 0 0 0]
```

Ensemble, porównanie

```
1  from sklearn.metrics import accuracy_score
2
3  for clf in (log_clf, rnd_clf, svm_clf, voting_clf):
4      clf.fit(X_train, y_train)
5      y_pred = clf.predict(X_test)
6      print(clf.__class__.__name__,
7            accuracy_score(y_test, y_pred))
```

```
LogisticRegression 0.864
RandomForestClassifier 0.896
SVC 0.896
VotingClassifier 0.912
```

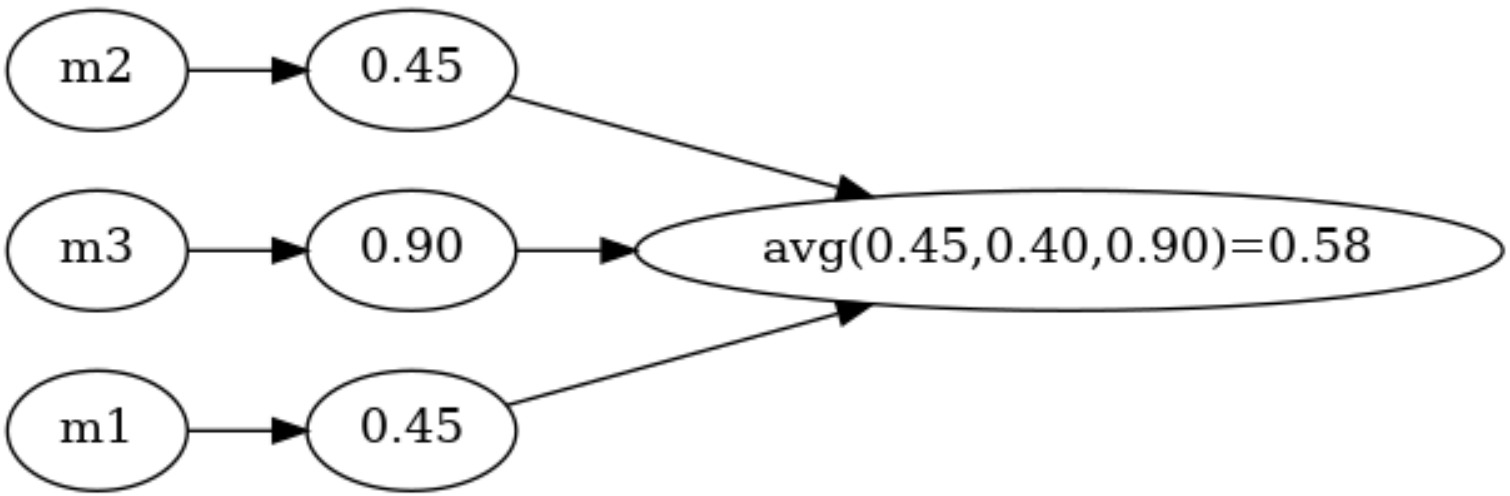
Strategia głosowania: Hard Voting



mode() – dominanta.

Strategia głosowania: Soft Voting

- Każdy predyktor musi dostarczyć prawdopodobieństwo klasyfikacji `.predict_proba()`
- Prawdopodobieństwa dla każdej klasy są uśredniane.
- Wygrywa klasa z największym uśrednionym prawdopodobieństwem.



Ensemble, Soft Voting, uczenie i predykcja

```
log_clf = LogisticRegression(solver="lbfgs",
                             random_state=42)
rnd_clf = RandomForestClassifier(n_estimators=100,
                                 random_state=42)
svm_clf = SVC(gamma="scale", probability=True,
              random_state=42)

voting_clf = VotingClassifier(
    estimators=[('lr', log_clf),
                ('rf', rnd_clf),
                ('svc', svm_clf)],
    voting='soft')
voting_clf.fit(X_train, y_train)
```

Ensemble, Soft Voting, porównanie

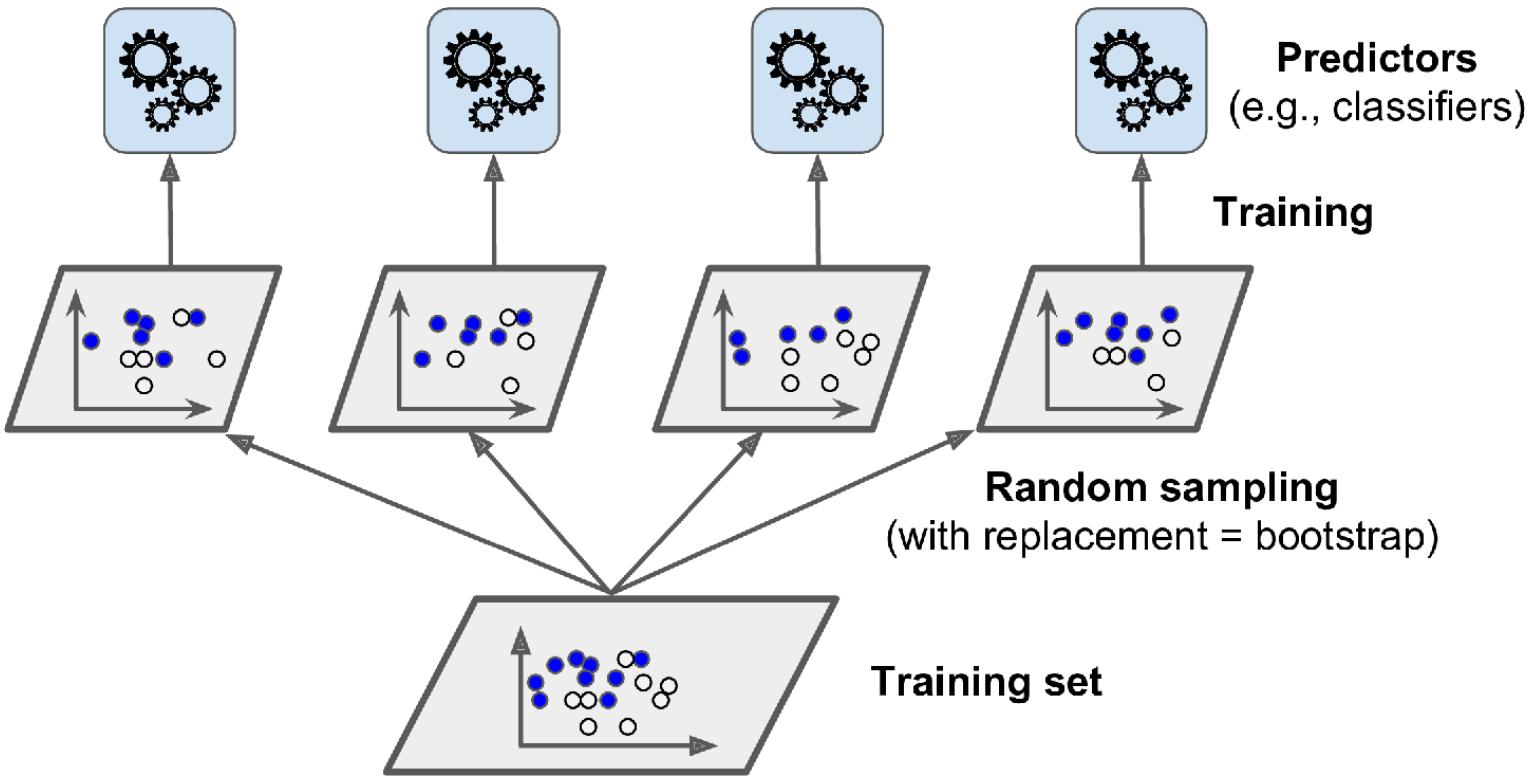
```
1  from sklearn.metrics import accuracy_score
2
3  for clf in (log_clf, rnd_clf, svm_clf, voting_clf):
4      clf.fit(X_train, y_train)
5      y_pred = clf.predict(X_test)
6      print(clf.__class__.__name__,
7            accuracy_score(y_test, y_pred))
```

```
LogisticRegression 0.864
RandomForestClassifier 0.896
SVC 0.896
VotingClassifier 0.92
```

Bagging i Pasting: ensemble inaczej, samplowanie

Samplowanie:

- z powtórzeniami (with replacement) – Bagging = bootstrap aggregating, `bootstrap=True`
- bez powtórzeń (without replacement) – Pasting, `bootstrap=False`.



- Wygrywa dominanta. Dobrze się skaluje. Dowolny klasyfikator.

Bagging

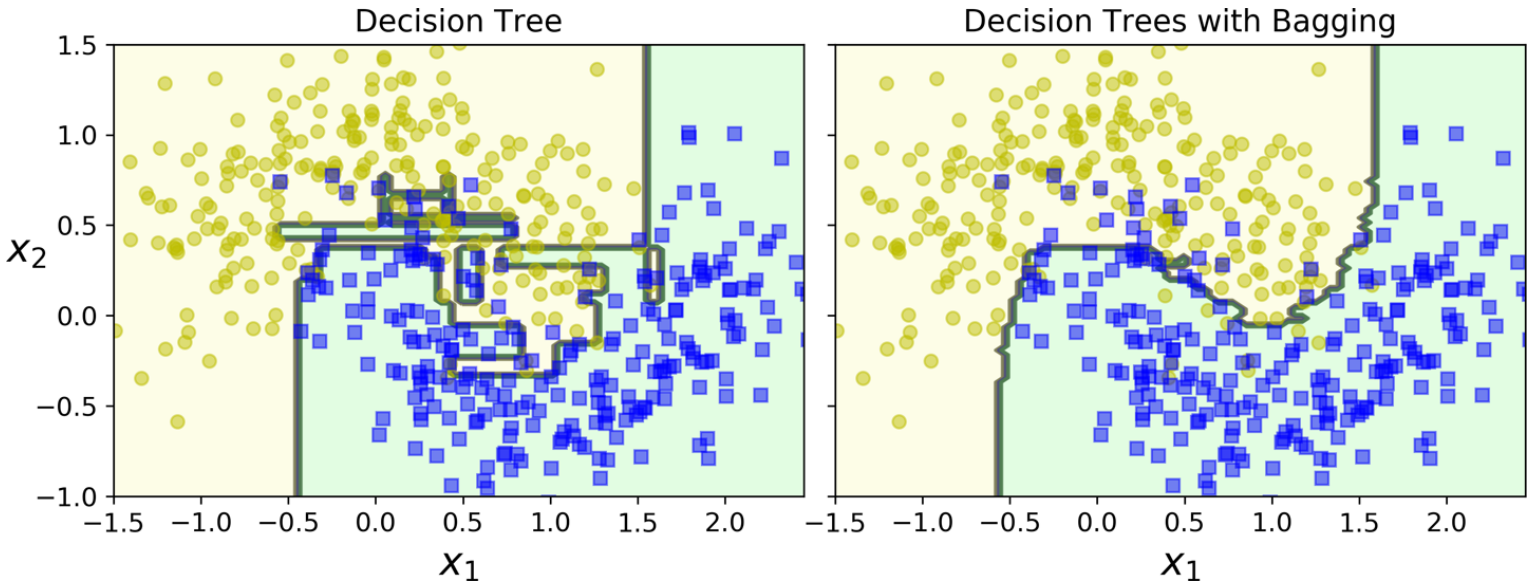
```
1  from sklearn.ensemble import BaggingClassifier
2  from sklearn.tree import DecisionTreeClassifier
3
4  bag_clf = BaggingClassifier(
5      DecisionTreeClassifier(), n_estimators=500,
6      max_samples=100, bootstrap=True, random_state=42)
7  bag_clf.fit(X_train, y_train)
8  y_pred = bag_clf.predict(X_test)
9
10 from sklearn.metrics import accuracy_score
11 print(accuracy_score(y_test, y_pred))
```

```
0.904
```

max_samples – liczba instancji do wylosowania, bezwzględna (tutaj: 100 instancji) albo procentowo $[0, 1]$

- Uwaga: 1 vs. 1.0 w Pythonie, liczba instancji: 1 vs. 100%.

Bagging, porównanie



Bagging, ewaluacja

- Niektóre instancje są używane wielokrotnie, nawet dla tego samego predyktora.
- Niektóre instancje nie są w ogóle używane: *out-of-bag* – 37%.
- Można ich użyć do ewaluacji, jako zbiór testujący.
- *scikit-learn* może to zrobić automatycznie do określenia dokładności (*accuracy*).
- Uwaga: predyktorów musi być dużo.

```
1 bag_clf = BaggingClassifier(
2     DecisionTreeClassifier(), n_estimators=500,
3     bootstrap=True, oob_score=True, random_state=40)
4 bag_clf.fit(X_train, y_train)
5 print(bag_clf.oob_score_)
```

```
0.9013333333333333
```

Bagging, ewaluacja wszystkich instancji

```
1  print(bag_clf.oob_decision_function_[:5])
```

```
[[0.31746032 0.68253968]
 [0.34117647 0.65882353]
 [1.         0.        ]
 [0.         1.        ]
 [0.         1.        ]]
```

Wybór/sampling cech

Umożliwia uczenie predyktora na podstawie losowo wybranych cech.

- z/bez powtórzeń: `bootstrap_features=True/False`
- `max_features` – liczba cech do wylosowania,
  - bezwzględna np. 100, albo
  - procentowo $[0, 1]$ np. 0.7
- Random Patches: wybór instancji i cech
  - `max_samples=0.5, max_features=0.7`
- Random Subspaces: wszystkie instancje i wybór cech
  - `bootstrap=False, max_samples=1.0, bootstrap_features=True, max_features=0.7`

Plan prezentacji

Ensemble Learning

Random Forest

Podsumowanie uczenia nadzorowanego

Random Forest

- Droga na skróty, zamiast `BaggingClassifier+DecisionTreeClassifier`
- Bagging + Drzewa decyzyjne, `max_samples=1.0`
- Hiperparametry z `BaggingClassifier` i `DecisionTreeClassifier`.
- Dodatkowo: nie wyszukuje cech do podziału węzła spośród wszystkich, ale z losowo wybranego podzbioru – większa różnorodność.

```
1  from sklearn.ensemble import RandomForestClassifier
2
3  rnd_clf = RandomForestClassifier(n_estimators=500,
4                                   max_leaf_nodes=16,
5                                   random_state=42)
6  rnd_clf.fit(X_train, y_train)
7
8  y_pred_rf = rnd_clf.predict(X_test)
```

Pomiar ważności cech

```
1  from sklearn.datasets import load_iris
2  iris = load_iris()
3  rnd_clf = RandomForestClassifier(n_estimators=500,
4                                   random_state=42)
5  rnd_clf.fit(iris["data"], iris["target"])
6  for name, score in zip(iris["feature_names"],
7                         rnd_clf.feature_importances_):
8      print(name, score)
9
10 print(rnd_clf.feature_importances_)
```

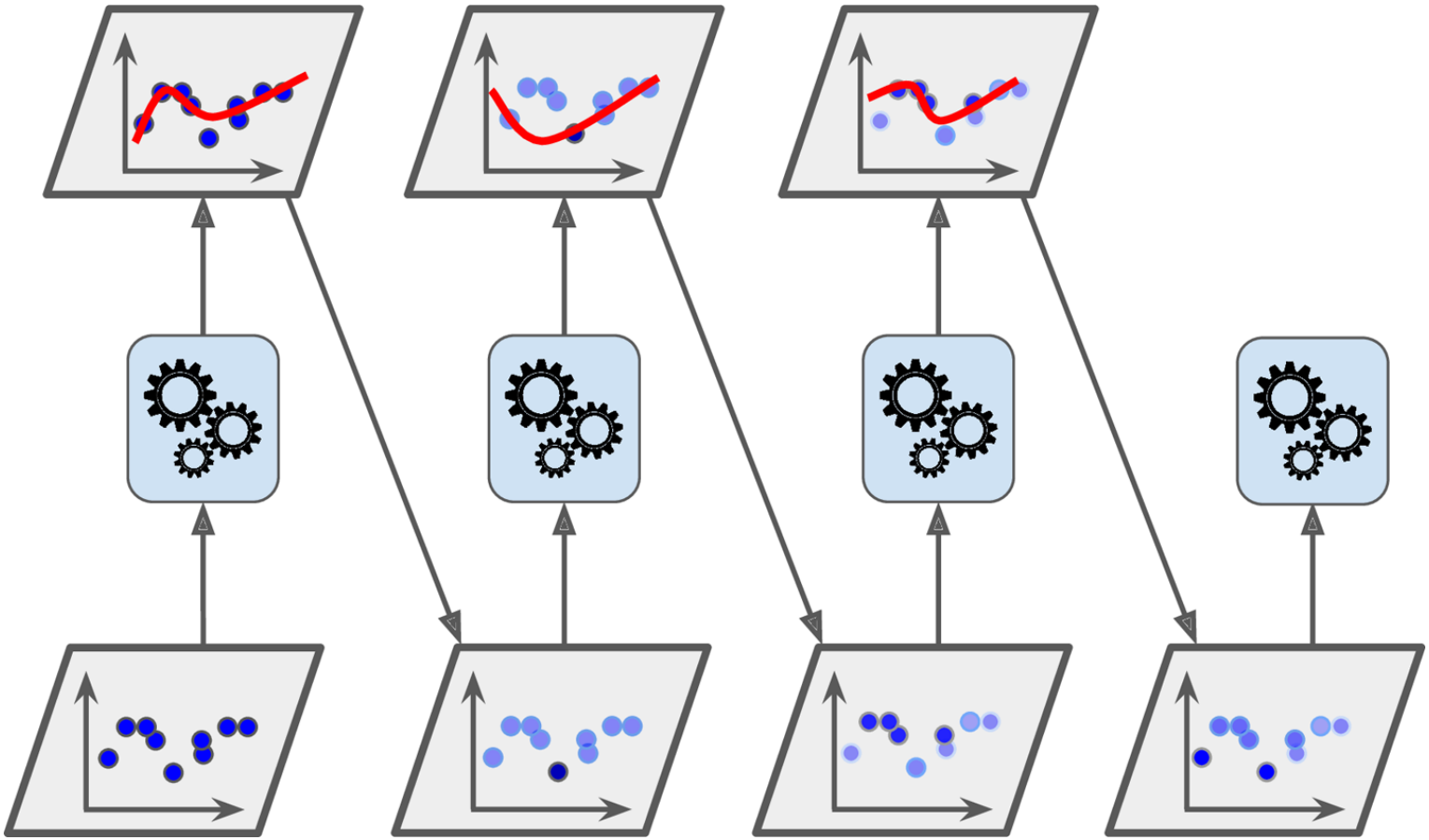
```
sepal length (cm) 0.11249225099876375
sepal width (cm) 0.02311928828251033
petal length (cm) 0.4410304643639577
petal width (cm) 0.4233579963547682
[0.11249225 0.02311929 0.44103046 0.423358  ]
```

- Sumują się do 1.0

Boosting

Kilka kiepskich modeli -> jeden dobry model.

AdaBoost



- Technika sekwencyjna, zrównoleglanie?
- Każdej instancji i predyktorowi przypisywana jest waga.
- Wagi są modyfikowane.
- Po nauczeniu wykorzystywane są wszystkie predyktory

AdaBoost

1. Początkowa waga każdej instancji: $1/m$, m – liczba instancji.
   - Większa waga = instancja częściej używana (parametr modelu albo sampling).
2. Uczenie predyktora.
3. Ocena predyktora.
4. Wagi zwiększane dla błędnie zakwalifikowanych instancji.
5. Jeżeli jeszcze jeden predyktor to idź do: 2
6. Użyj wszystkich predyktorów (ensemble) z wagami proporcjonalnymi do oceny.

AdaBoost, przykład

```
1  from sklearn.model_selection import cross_val_score
2  from sklearn.datasets import load_iris
3  from sklearn.ensemble import AdaBoostClassifier
4
5  X, y = load_iris(return_X_y=True)
6  clf = AdaBoostClassifier(n_estimators=100)
7  scores = cross_val_score(clf, X, y, cv=5)
8  print(scores.mean())
```

```
0.9466666666666665
```

- Domyślnie klasyfikatorem jest:
  `DecisionTreeClassifier(max_depth=1)`

AdaBoost, przykład

```
1  X, y = load_iris(return_X_y=True)
2  clf = AdaBoostClassifier(SVC(kernel="linear",
3                               probability=True),
4                           n_estimators=100)
5  scores = cross_val_score(clf, X, y, cv=5)
6  print(scores.mean())
```

```
0.9733333333333334
```

Gradient Boosting

- Sekwencyjny.
- Następy predyktor stara się poprawić błędy poprzedniego.

Gradient Boosting, na piechotę

```
1  from sklearn.tree import DecisionTreeRegressor
2  X = np.random.rand(100, 1) - 0.5
3  y = 3*X[:, 0]**2 + 0.05 * np.random.randn(100)
4
5  tree_reg1 = DecisionTreeRegressor(max_depth=2, random_state=
6  tree_reg1.fit(X, y)
7  y2 = y - tree_reg1.predict(X)
8  tree_reg2 = DecisionTreeRegressor(max_depth=2, random_state=
9  tree_reg2.fit(X, y2)
10 y3 = y2 - tree_reg2.predict(X)
11 tree_reg3 = DecisionTreeRegressor(max_depth=2, random_state=
12 tree_reg3.fit(X, y3)
13
14 X_new = np.array([[0.8]])
15 y_pred = sum(tree.predict(X_new)
16               for tree in (tree_reg1, tree_reg2, tree_reg3))
17 print(y_pred)
```

```
[0.78881082]
```

Gradient Boosting, prościej

```
1  from sklearn.ensemble import GradientBoostingRegressor
2  gbrt = GradientBoostingRegressor(max_depth=2,
3                                   n_estimators=3,
4                                   learning_rate=1.0,
5                                   random_state=42)
6  gbrt.fit(X, y)
7  print(gbrt.predict(X_new))
```

```
[0.7174359]
```

- `learning_rate`: szybkość uczenia, domyślnie 0.1, tutaj przyspieszamy, bo tylko 3 estymatory.

Gradient Boosting, prędkość uczenia

```
gbrt = GradientBoostingRegressor(max_depth=2,
                                 n_estimators=3,
                                 learning_rate=1.0)
gbrt.fit(X, y)
print(gbrt.predict(X_new))
```

```
[0.7174359]
```

```
gbrt = GradientBoostingRegressor(max_depth=2,
                                 n_estimators=3,
                                 learning_rate=0.1)
gbrt.fit(X, y)
print(gbrt.predict(X_new))
```

```
[0.36502227]
```

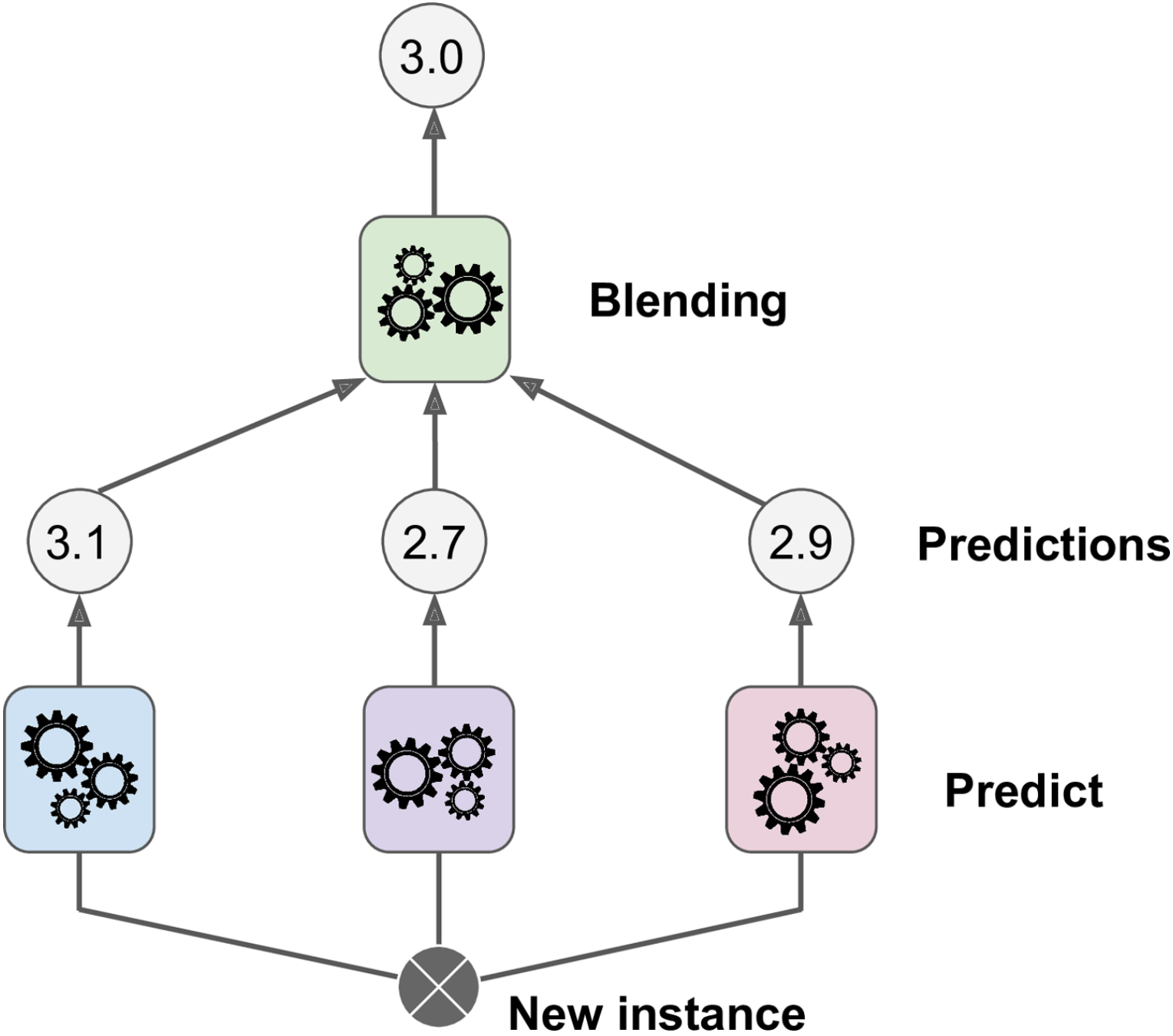
Gradient Boosting

```
1  gbrt = GradientBoostingRegressor(max_depth=2,
2                                   n_estimators=100,
3                                   learning_rate=0.1)
4  gbrt.fit(X, y)
5  print(gbrt.predict(X_new))
```

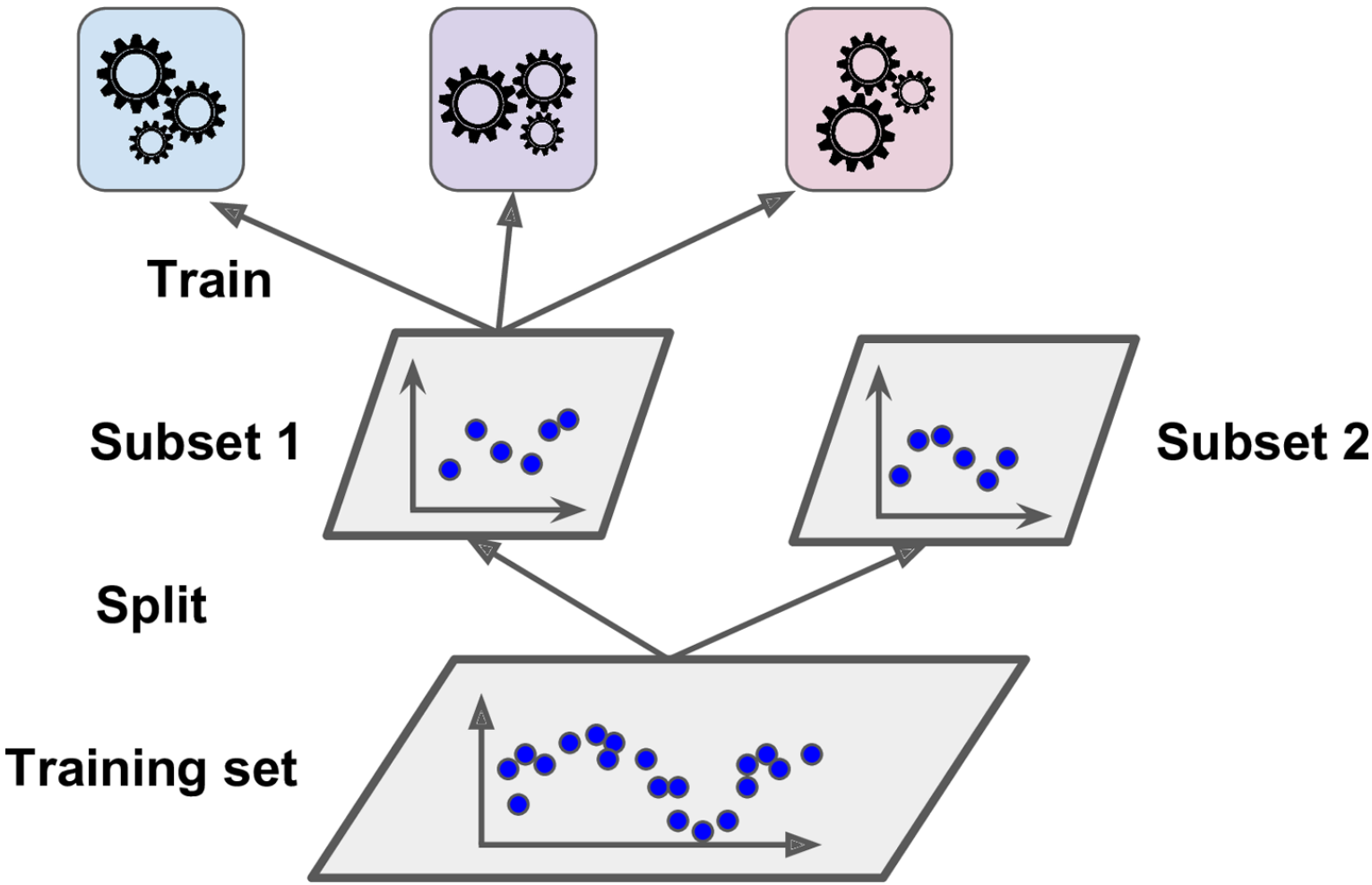
```
[0.73678588]
```

- niska prędkość uczenia – potrzeba więcej regresorów.

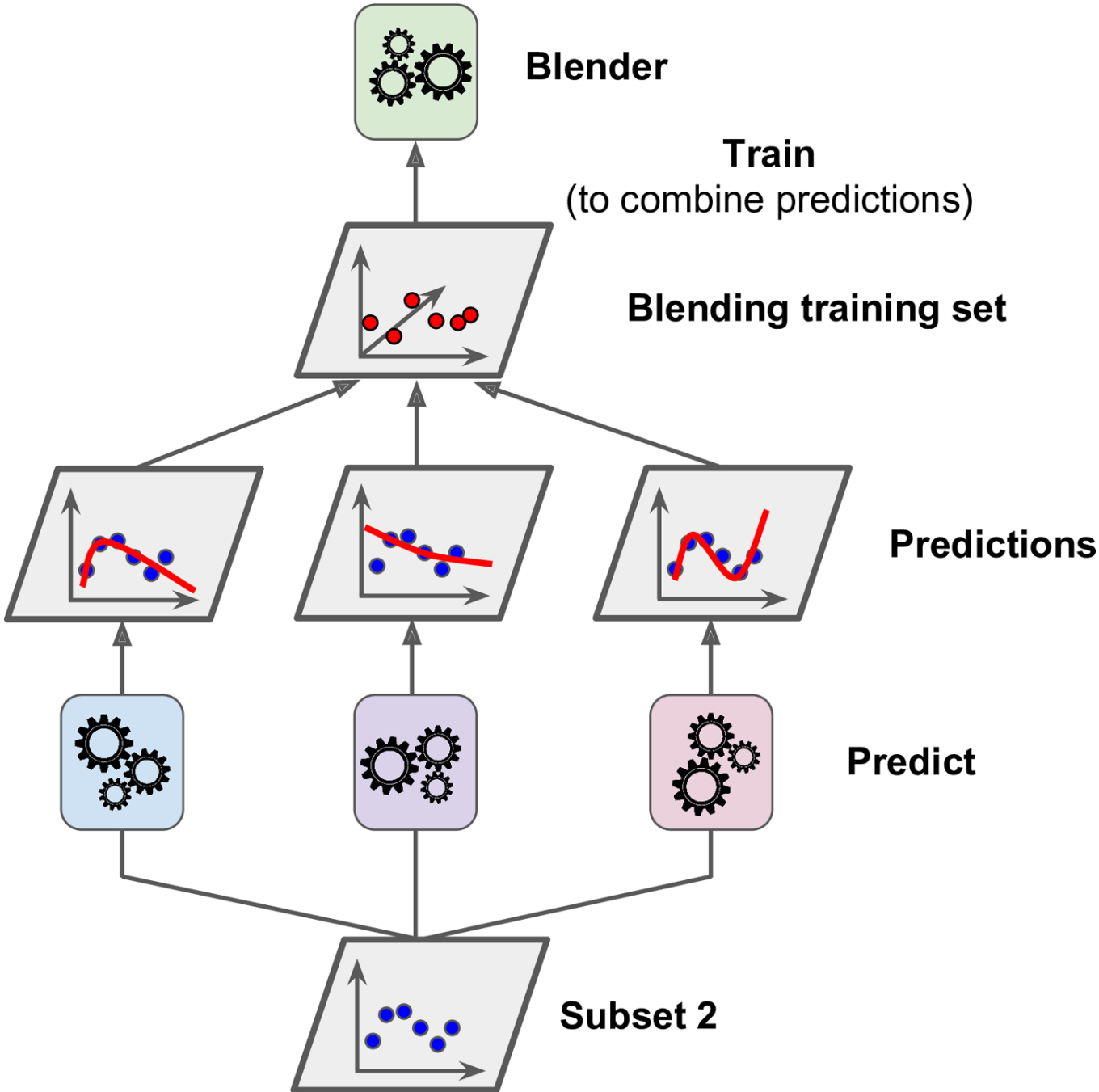
Stacking – automatyzacja agregacji wyników



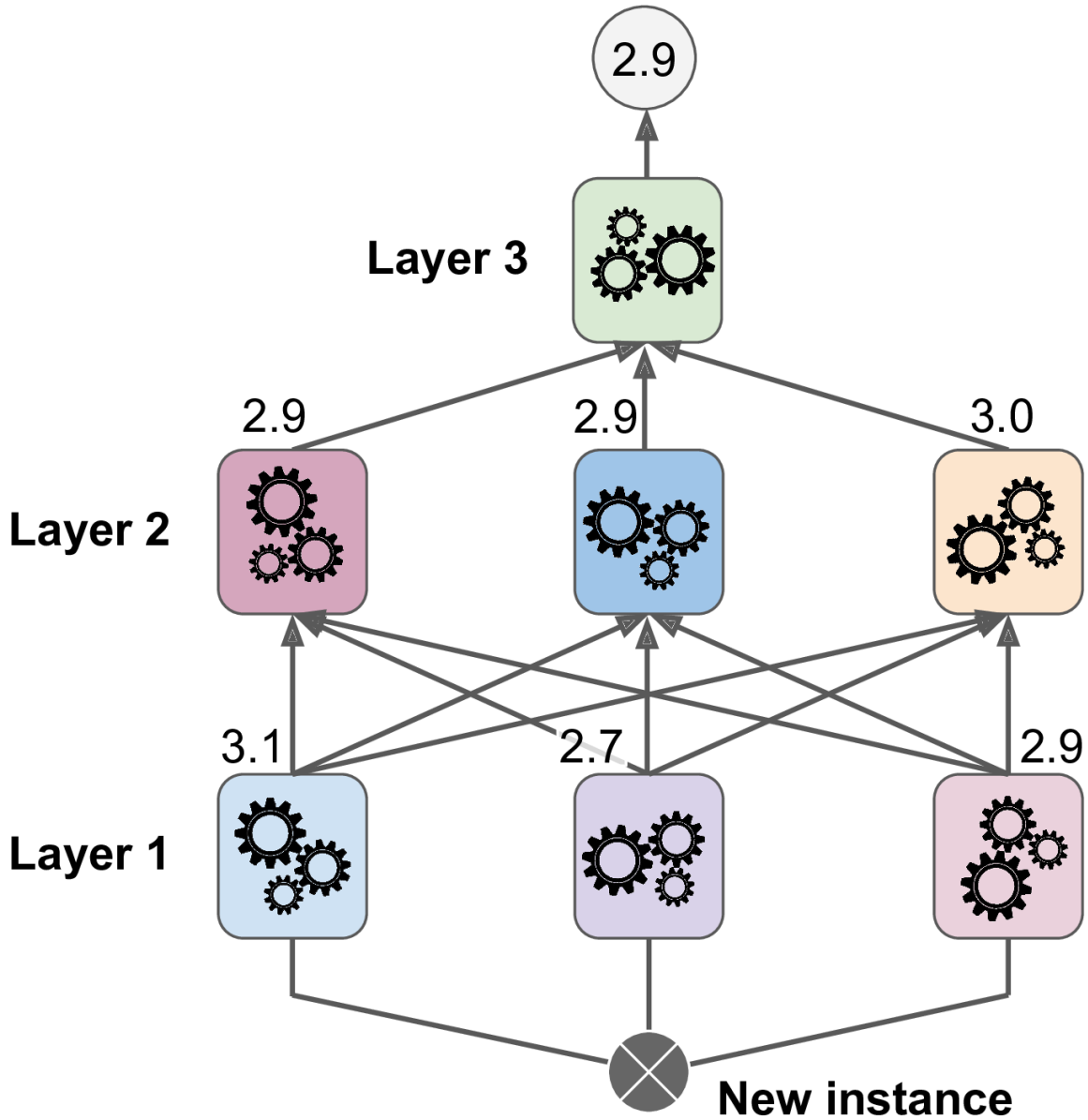
Stacking, hold-out



Stacking


Blender
Train
(to combine predictions)
Blending training set
Predictions
Predict
Subset 2

Stacking



Stacking, *scikit-learn*

- sklearn.ensemble.StackingClassifier
- sklearn.ensemble.StackingRegressor

Plan prezentacji

Ensemble Learning

Random Forest

Podsumowanie uczenia nadzorowanego

Błąd generalizacji, uogólnienia modelu

obciążenia, Bias

- Tendencja do uczenia się tych samych błędów.
- Różnica pomiędzy wartością docelową, a prognozą modelu.
- Zbyt prosty model.
- Underfitting.

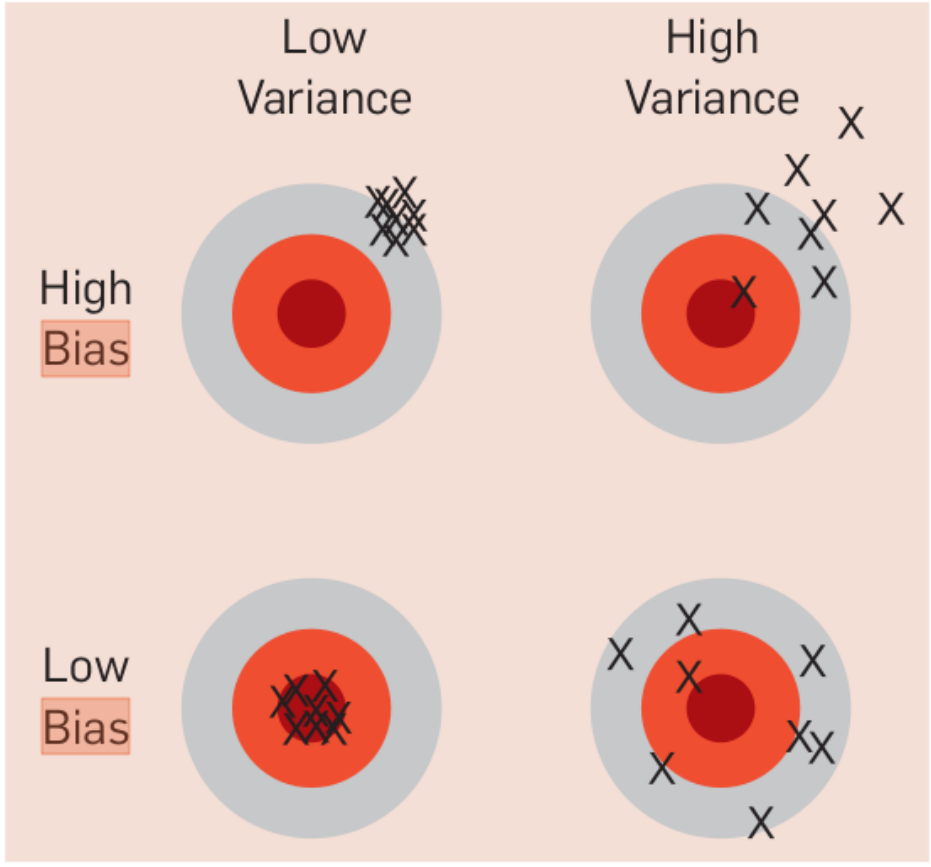
zmienności, Variance

- Uczenie się losowych zmian/szumu.
- Nadmierna wrażliwość na małe różnice danych uczących.
- Zbyt złożony model.
- Overfitting.

nieredukowalny, Irreductible error

- Wynika z zaszumienia danych.
- Trzeba oczyścić dane.

Błąd generalizacji

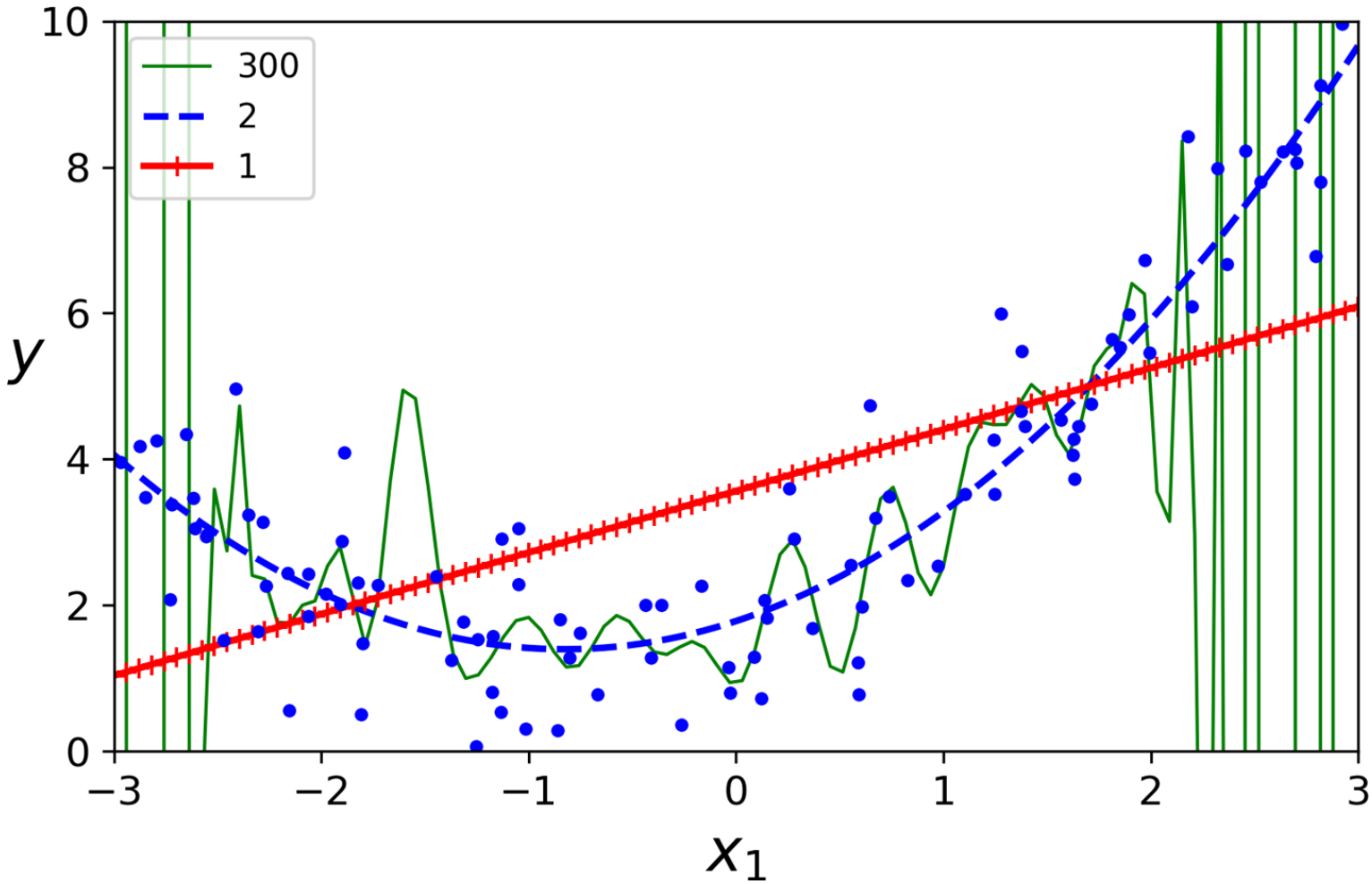


Źródło: Pedro M. Domingos: A few useful things to know about machine learning. *Commun. ACM* 55(10): 78-87 (2012)

Bias-Variance tradeoff

- Zwiększenie złożoności modelu zwiększa jego wariancję i zmniejsza jego obciążenie.
- Zmniejszenie złożoności modelu zwiększa jego obciążenie i zmniejsza jego wariancję.
- Kiedy model staje się zbyt skomplikowany może dojść do przeuczenia
  - model uczy się też odchyleń nie mających wpływu na realny trend.
- Regularyzacja: ograniczenie modelu – zmniejszenie overfitting – np. redukcja stopnia wielomianu, ograniczenie wartości parametrów
  - również osiągalna za pomocą hiperparametrów dango modelu, np. ograniczenie głębokości drzewa decyzyjnego.

Bias-Variance tradeoff



Podsumowanie dot. metryk

- Confusion Matrix
- Dokładność (Accuracy)
- Precyzcja (Precision)
- Czułość (Recall)
- F1
- RMSE/MSE