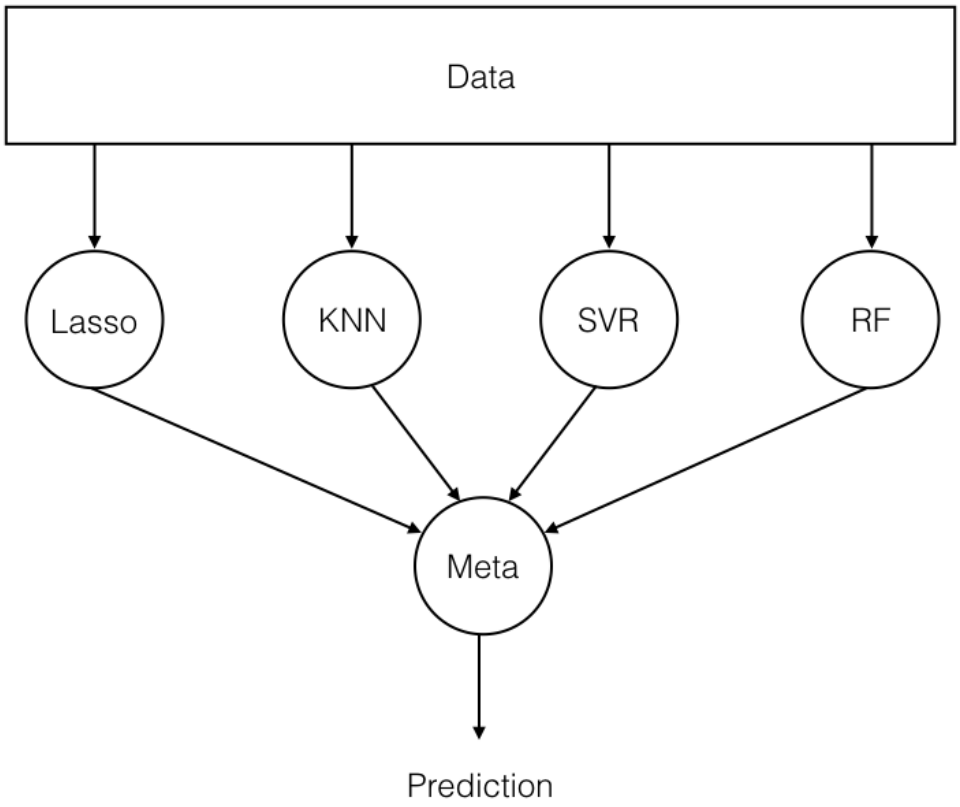
Ensemble learning

Desi in ML-ul traditional se lucreaza pentru a crea modele care, singure, sa poata sa rezolve cat mai bine un set de probleme, in practica se folosesc frecvent mai multe modele care, impreuna, au sanse mai mari de a da un rezultat mai bun decat oricare din cele care le compun.

Mai clar, un astfel ansamblu de modele de regresie poate arata precum:



Sursa imaginii (https://www.dataquest.io/blog/introduction-to-ensembles/)

Exemplu din lumea reala in care se folosesc mai multe modele pentru a lua o decizie: pentru a determina daca merita investiti banii la bursa intr-o anumita companie, se iau in considerare:

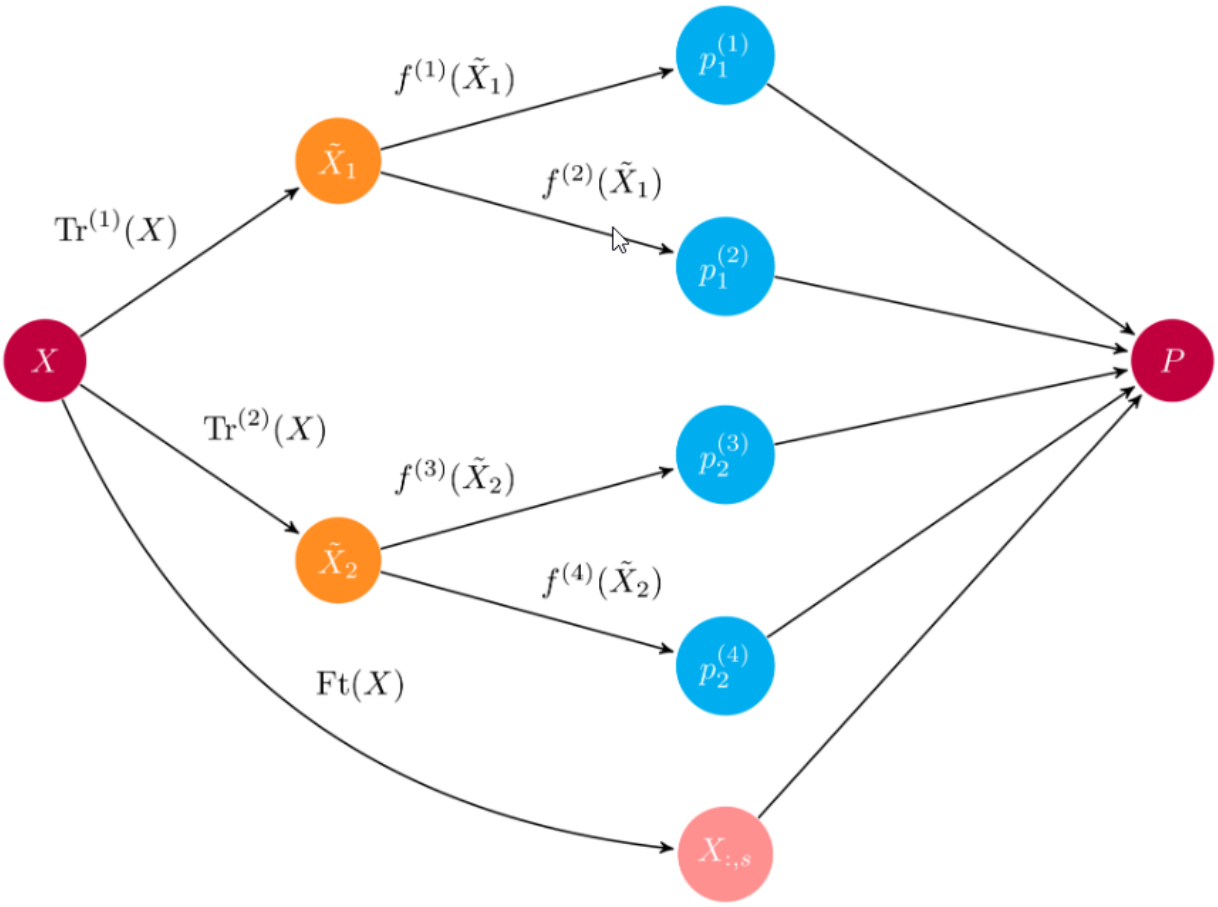
1. Informatii despre activitatea companiei, perspective - afisate public sau din surse interne
2. Studiul evolutiei bursiere
3. Informatii despre companie provenind de la competitori
4. Cercetare de piata pe domeniul pe care compania activeaza - competitori, achizitii recente, preferintele clientilor
5. Social media - opinia populara despre companie sau diomeniul ei de activitate

Prin combinarea deciziilor de regula se ajunge la rezultate mai bune decat daca se considera o singura opinie de expert. In ML se pot combina mai multe modele de regresie sau clasificare pentru a produce raspunsul final. Majoritatea competitiilor Kagle din ultimii ani au fost castigate prin ansambluri de modele, uneori de dimensiuni foarte mari: KAGGLE ENSEMBLING GUIDE (https://mlwave.com/kaggle-ensembling-guide/).

Efectul succesului combinatiilor se explica prin faptul ca fiecare model din ansamblu are intrinsec o presupunere asupra modului in care variabila dependenta (de iesire) este determinata de variabilele independente (de intrare). In plus, ele pot excela pe anumite de subseturi de date (exemplu: sub-populatii de clienti) dar sa aiba performante mai mici pe alte subseturi; sau, votarea majoritara ori ponderarea valorilor de iesire poate sa duca la atenuarea valorilor extreme produse de un singur model; sau, se poate urmari un melanj inttre modele cae sunt cu acuratete mare - dar computational intensive si lente - si unele mai putin precise, dar rapide.

Cateva situatii clare in care se poate folosi ensemble learning sunt:

1. Set de date prea mare: se poate intampla ca un singur model sa nu poata sa fie antrenat pe tot setul de date. Se pot obtine atunci modele diferite pe subseturi de date, ca in final deciziile lor sa fie agregate. Chiar daca se foloseste un acelasi model de baza, rezultatele sunt diferite pentru ca datele de instruire sunt diferite.
2. Set de date prea mic: se poate folosi metoda bootstrapping (https://en.wikipedia.org/wiki/Bootstrapping_(statistics)), prin care prin esantionari aleatoare se obtin subseturi de date diferite; se obtin deci modele diferite, la fel ca mai sus.
3. Set de date complexe: pot exista cazuri de valori lipsa, sau tipuri de date pentru intrari ce nu pot fi manipulate de catre modele consacrate. Se pot obtine modele care lucreaza pe proiectii ale datelor, sau pe rezultatele unor fluxuri de procesare specifice, fiecare model vazand o parte din intreg.



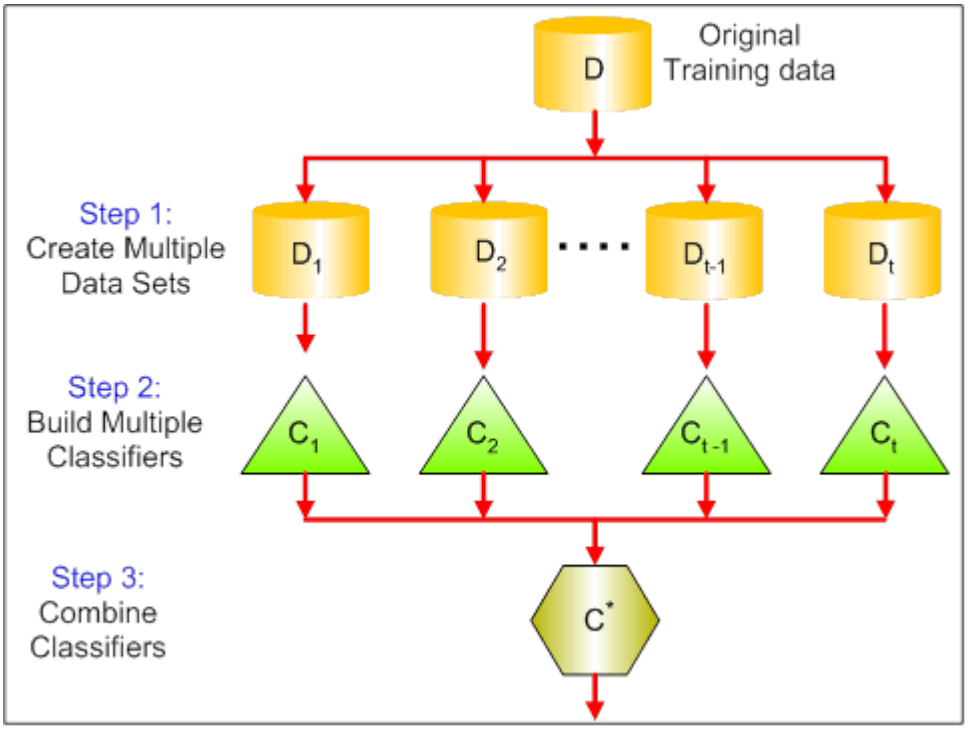
4. Masurarea gradului de incredere pentru predictia rezultata din ansamblu: daca din 5 modele de clasificare 4 decid ca intrarea este de o aceeasi clasa, avem o indicatie de incredere in rezultatul clasificarii.

Metode de realizare de ansambluri

Bagging

Se bazeaza pe bootstrap aggregating (https://en.wikipedia.org/wiki/Bootstrapping_(statistics)) - se face o esantionare (extragere) cu intoarcere din populatia initiala; pentru un set de date, se extrag n elemente (posibil unele sa fie duplicate) din populatia initiala. Pe fiecare din cele t seturi de n elemente extrase ca mai sus se antreneaza cate un model. Cele t modele se agrega:

- pentru o problema de clasificare se poate considera clasa majoritar prezisa
- pentru o problema de regresie se ia media aritmetica a celor t modele de regresie



Sursa imaginii (https://www.datacamp.com/community/tutorials/ensemble-learning-python)

Boosting

Plecand de la modele de inferenta al caror comportament e chiar si doar un pic mai bun decat o ghicire aleatoare (weak learner), se poate obtine un ansamblu care sa obtina o acuratete arbitrar de mare. Ideea de baza este de a determina care din datele din setul de instruire sunt dificil de invatat, ca apoi sa se asigneze acestora o pondere mai mare. Modelul ajunge sa sa se concentreze mai mult pe invatarea datelor cu pondere mai mare (pondere data din cauza ca acele date sunt mai dificile). Modelul cel mai popular este AdaBoost (https://en.wikipedia.org/wiki/AdaBoost).

Algoritmul AdaBoost are doua componente majore: determinarea ponderilor datelor din setul de instruire si calculul coeficientilor modelelor rezultate. Algoritmul pentru o problema de clasificare in doua clase este schitat in figura de mai jos:

Input: Data set $D = \{(\boldsymbol{x}_1, y_1), (\boldsymbol{x}_2, y_2), \ldots, (\boldsymbol{x}_m, y_m)\}$;
Base learning algorithm L;
Number of learning rounds T.

Process:

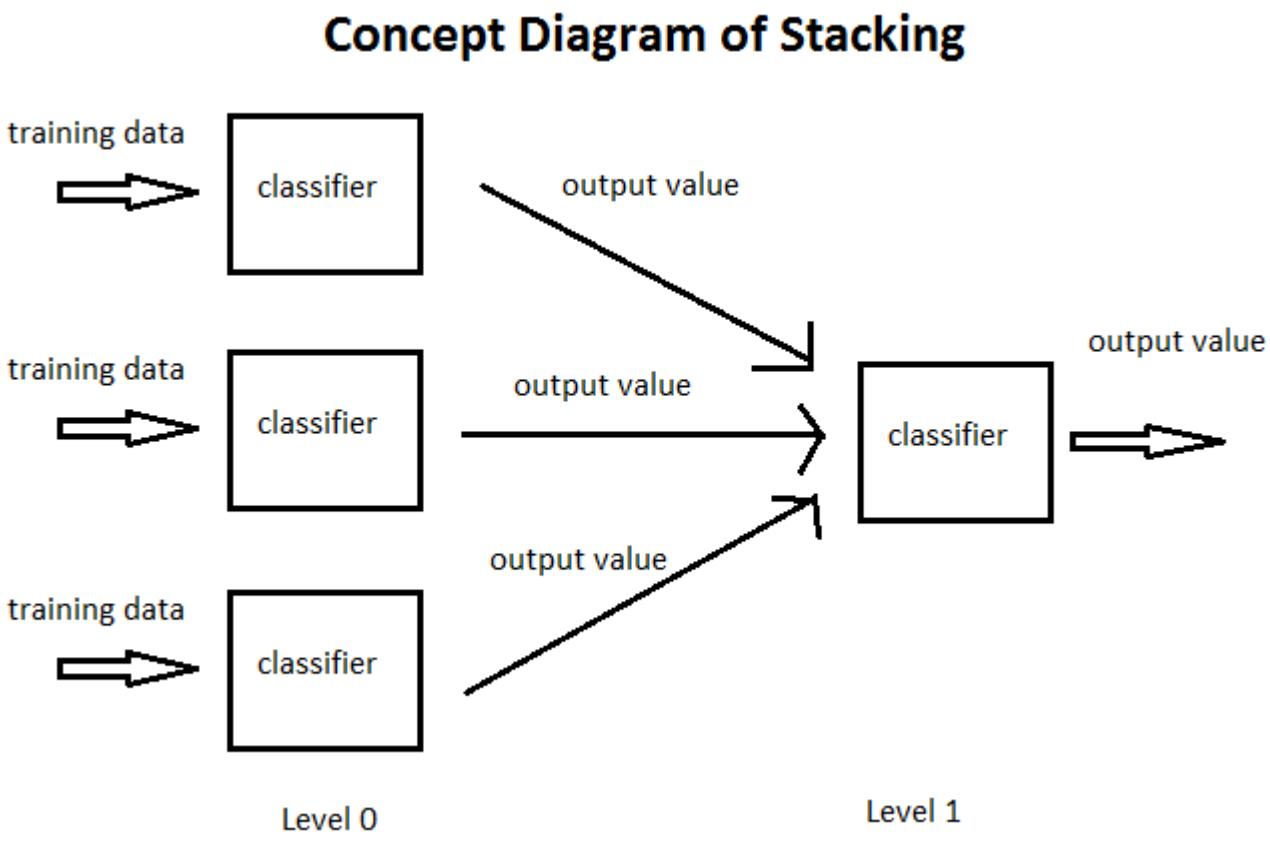
1. $\mathcal{D}_1(i) = 1/m.$ % Initialize the weight distribution
2. **for** $t = 1, \cdots, T$:
3. $h_t = L(D, \mathcal{D}_t)$; % Train a learner h_t from D using distribution $\mathcal{D}_t$
4. $\epsilon_t = \Pr_{x \sim \mathcal{D}_t, y} \boldsymbol{I}[h_t(\boldsymbol{x}) \neq y]$; % Measure the error of h_t
5. **if** $\epsilon_t > 0.5$ **then break**
6. $\alpha_t = \frac{1}{2} \ln\left(\frac{1-\epsilon_t}{\epsilon_t}\right)$; % Determine the weight of h_t
7. $\mathcal{D}_{t+1}(i) = \frac{\mathcal{D}_t(i)}{Z_t} \times \begin{cases} \exp(-\alpha_t) & \text{if } h_t(\boldsymbol{x}_i) = y_i \\ \exp(\alpha_t) & \text{if } h_t(\boldsymbol{x}_i) \neq y_i \end{cases}$
$= \frac{\mathcal{D}_t(i) \exp(-\alpha_t y_i h_t(\boldsymbol{x}_i))}{Z_t}$ % Update the distribution, where
% Z_t is a normalization factor which
% enables $\mathcal{D}_{t+1}$ to be distribution
8. **end**

Output: $H(\boldsymbol{x}) = \text{sign}\left(\sum_{t=1}^{T} \alpha_t h_t(\boldsymbol{x})\right)$

Sursa (https://www.amazon.com/Algorithms-Mining-Chapman-Knowledge-Discovery/dp/1420089641/ref=sr_1_1?crid=13FRIM1B488BK&keywords=the+top+ten+algorithms+in+data+mining&qid=1559746296&s=gateway&sprefix=1)

Stacking

O modalitate simpla de agregare a "opiniilor" date de catre fiecare model dintr-un ansamblu este votarea sau calcularea mediei iesirilor acestor modele. O varianta mai elaborata este ca un model suplimentar sa invete cum sa agrege "opiniile" date de catre modelele din ansamblu, inlocuind o agregare simpla cu una invatata. Modelele care compun ansamblul sunt de nivel 0, modelul care invata sa pondereze iesirile date de cele de nivel 0 este de nivel 1:



Sursa (https://medium.com/@gurucharan_33981/stacking-a-super-learning-technique-dbed06b1156d)

O schita a pasilor este data mai jos:

Algorithm Stacking

1: Input: training data $D = \{x_i, y_i\}_{i=1}^{m}$
2: Ouput: ensemble classifier H
3: *Step 1: learn base-level classifiers*
4: **for** $t = 1$ to T **do**
5: learn h_t based on D
6: **end for**
7: *Step 2: construct new data set of predictions*
8: **for** $i = 1$ to m **do**
9: $D_h = \{x'_i, y_i\}$, where $x'_i = \{h_1(x_i), ..., h_T(x_i)\}$
10: **end for**
11: *Step 3: learn a meta-classifier*
12: learn H based on D_h
13: return H

Sursa (https://blog.statsbot.co/ensemble-learning-d1dcd548e936)

Se pot, desigur, adauga si alte niveluri de modele de agregare peste nivelul 0.

Exemplu

Incarcarea si preprocesarea datelor

Se exemplifica folosirea unui ansamblu de clasificatori pentru problema Breast Cancer Wisconsin (Original) Data Set (https://archive.ics.uci.edu/ml/datasets/breast+cancer+wisconsin+(original)). Datele sunt descarcate local in directorul `./data`

In [1]:
```
import pandas as pd
import numpy as np
from sklearn.impute import SimpleImputer
from sklearn.preprocessing import MinMaxScaler
```

In [2]:
```
path = './data/breast-cancer-wisconsin.csv'
data = pd.read_csv(path)
data.head()
```

Out[2]:

	Sample code number	Clump Thickness	Uniformity of Cell Size	Uniformity of Cell Shape	Marginal Adhesion	Single Epithelial Cell Size	Bare Nuclei	Bland Chromatin	Normal Nucleoli
0	1000025	5	1	1	1	2	1	3	1
1	1002945	5	4	4	5	7	10	3	2
2	1015425	3	1	1	1	2	2	3	1
3	1016277	6	8	8	1	3	4	3	7
4	1017023	4	1	1	3	2	1	3	1

Coloana 'Sample code number' poate fi inlaturata, deoarece nu poarta informatie utila.:

In [3]:
```
data.drop(['Sample code number'],axis = 1, inplace = True)
data.head()
```

Out[3]:

	Clump Thickness	Uniformity of Cell Size	Uniformity of Cell Shape	Marginal Adhesion	Single Epithelial Cell Size	Bare Nuclei	Bland Chromatin	Normal Nucleoli	Mitoses
0	5	1	1	1	2	1	3	1	1
1	5	4	4	5	7	10	3	2	1
2	3	1	1	1	2	2	3	1	1
3	6	8	8	1	3	4	3	7	1
4	4	1	1	3	2	1	3	1	1

Obtinem niste statistici despre date:

In [4]:
```
data.describe()
```

Out[4]:

	Clump Thickness	Uniformity of Cell Size	Uniformity of Cell Shape	Marginal Adhesion	Single Epithelial Cell Size	Bland Chromatin	Normal Nucleoli	I
count	699.000000	699.000000	699.000000	699.000000	699.000000	699.000000	699.000000	699
mean	4.417740	3.134478	3.207439	2.806867	3.216023	3.437768	2.866953	1
std	2.815741	3.051459	2.971913	2.855379	2.214300	2.438364	3.053634	1
min	1.000000	1.000000	1.000000	1.000000	1.000000	1.000000	1.000000	1
25%	2.000000	1.000000	1.000000	1.000000	2.000000	2.000000	1.000000	1
50%	4.000000	1.000000	1.000000	1.000000	2.000000	3.000000	1.000000	1
75%	6.000000	5.000000	5.000000	4.000000	4.000000	5.000000	4.000000	1
max	10.000000	10.000000	10.000000	10.000000	10.000000	10.000000	10.000000	10

Remarcam ca atributul 'Bare nuclei' lipseste din descriere, ceea ce inseamna ca nu toate valorile de pe coloana sunt numerice.

In [5]:
```
data.info()
```

```
<class 'pandas.core.frame.DataFrame'>
RangeIndex: 699 entries, 0 to 698
Data columns (total 10 columns):
 #   Column                       Non-Null Count  Dtype 
---  ------                       --------------  ----- 
 0   Clump Thickness              699 non-null    int64 
 1   Uniformity of Cell Size      699 non-null    int64 
 2   Uniformity of Cell Shape     699 non-null    int64 
 3   Marginal Adhesion            699 non-null    int64 
 4   Single Epithelial Cell Size  699 non-null    int64 
 5   Bare Nuclei                  699 non-null    object
 6   Bland Chromatin              699 non-null    int64 
 7   Normal Nucleoli              699 non-null    int64 
 8   Mitoses                      699 non-null    int64 
 9   Class                        699 non-null    int64 
dtypes: int64(9), object(1)
memory usage: 54.7+ KB
```

Remarcam ca toate atributele sunt numerice, mai putin 'Bare nuclei'. Acest lucru se datoreaza faptului ca pe coloana numita se gasesc valori nule:

In [6]:
```
data['Bare Nuclei'].unique()
```

Out[6]:
```
array(['1', '10', '2', '4', '3', '9', '7', '?', '5', '8', '6'],
      dtype=object)
```

Inlocuim aceste valori '?' cu 'nan', pentru ca transformarea din string in floating point sa functioneze usor:

In [7]:
```
data['Bare Nuclei'].replace('?', 'nan', inplace = True)
data['Bare Nuclei'] = data['Bare Nuclei'].astype('float64')
```

In [8]:
```
data['Bare Nuclei'].describe()
```

Out[8]:
```
count    683.000000
mean       3.544656
std        3.643857
min        1.000000
25%        1.000000
50%        1.000000
75%        6.000000
max       10.000000
Name: Bare Nuclei, dtype: float64
```

Vom face missing value imputation, inlocuind valorile lipsa cu media lor:

In [9]:
```
from sklearn.pipeline import Pipeline

pipeline = Pipeline([('imputer', SimpleImputer()), ('scaler', MinMaxScaler
())])

values = data.values # pentru a le da algoritmului de missing value imputation
```

Model singular

Utilizam un model de clasificare singular - arbore de decizie - si observam care sunt performantele lui:

In [10]:
```
from sklearn import model_selection
from sklearn.tree import DecisionTreeClassifier
```

In [11]:
```
# Separa datele de intrare de etichete
X = values[:,0:-1]
Y = values[:,-1]
```

In [12]:
```
seed = 7
```

In [13]:
```
kfold = model_selection.KFold(n_splits=10, random_state=seed, shuffle=True)
cart = DecisionTreeClassifier()
pipeline = Pipeline([('imputer', SimpleImputer()), ('scaler', MinMaxScaler()),
('cart', cart)])
results = model_selection.cross_val_score(pipeline, X, Y, cv=kfold)
print(f'Acuratetea modelului singular: {results.mean()}')
```

```
Acuratetea modelului singular: 0.9527950310559007
```

Ansamblu prin bagging

In [14]:
```
from sklearn.ensemble import BaggingClassifier
```

In [15]:
```
num_trees = 20
model = BaggingClassifier(base_estimator=pipeline, n_estimators=num_trees, ran
dom_state=seed)
results = model_selection.cross_val_score(model, X, Y, cv=kfold)
print(f'Acuratetea ansamblului obtinut prin bagging: {results.mean()}')
```

```
Acuratetea ansamblului obtinut prin bagging: 0.9613250517598344
```

Ansamblu prin AdaBoost

In [16]:
```
from sklearn.ensemble import AdaBoostClassifier
num_trees = 20
kfold = model_selection.KFold(n_splits=10, random_state=seed, shuffle=True)
model = AdaBoostClassifier(n_estimators=num_trees, random_state=seed)
results = model_selection.cross_val_score(pipeline, X, Y, cv=kfold)
print(f'Acuratetea ansamblului obtinut prin AdaBoost: {results.mean()}')
```

```
Acuratetea ansamblului obtinut prin AdaBoost: 0.9499171842650103
```

Ansamblu prin votare

Pregatim mai multe modele diferite. Rezultatele acestora sunt agregate prin votare.

In [17]:
```
from sklearn.linear_model import LogisticRegression
from sklearn.tree import DecisionTreeClassifier
from sklearn.svm import SVC
from sklearn.ensemble import VotingClassifier

kfold = model_selection.KFold(n_splits=10, random_state=seed, shuffle=True)
# creare modele de nivel 0
estimators = []
model1 = LogisticRegression(solver='lbfgs')
pipeline1 = Pipeline([('imputer', SimpleImputer()), ('scaler', MinMaxScaler
()), ('logistic_regression', model1)])
estimators.append(('logistic', pipeline1))

model2 = DecisionTreeClassifier()
pipeline2 = Pipeline([('imputer', SimpleImputer()), ('scaler', MinMaxScaler
()), ('decision_tree', model2)])
estimators.append(('cart', pipeline2))

model3 = SVC(gamma='auto')
pipeline3 = Pipeline([('imputer', SimpleImputer()), ('scaler', MinMaxScaler
()), ('SVC', model3)])
estimators.append(('svm', pipeline3))

# creare ansamblu de tip stack
ensemble = VotingClassifier(estimators)
results = model_selection.cross_val_score(ensemble, X, Y, cv=kfold)
print(f'Acuratetea ansamblului obtinut prin votare: {results.mean()}')
```

```
Acuratetea ansamblului obtinut prin votare: 0.964223602484472
```

De retinut

1. Nu este adevarat ca *intotdeauna* ensemble learning functioneaza mai bine. Frecvent insa, acest lucru e adevarat, dar fara a putea spune apriori ce strategie de ensemble e cea mai buna.
2. Daca modelele au varianta mare (aka au tendinta de a face overfit), atunci bagging e mai indicat. Daca modele sunt biased (fac underfitting), atunci boosting e mai indicat.
3. Nu orice strategie de asamblare se potriveste cu orice tip de model: modele biased (care fac underfitting) impreuna cu bagging nu functioneaza in practica prea bine.

In [ ]: