

Vytěžování Dat

Přednáška 12 – Kombinování modelů

Miroslav Čepek
Pavel Kordík a Jan Černý (FIT)

Fakulta Elektrotechnická, ČVUT



Evropský sociální fond Praha & EU:
Investujeme do vaší budoucnosti

10.12.2012

- Aneb víc hlav, víc ví!

Ensembles (Kombinování modelů)

- Aneb víc hlav, víc ví!
- Co když jsme se dostali na hranice možností jednoho modelu?
- Co když už delší učení nebo složitější model vede už jen k přeučení modelu?

Ensembles (Kombinování modelů)

- Aneb víc hlav, víc ví!
- Co když jsme se dostali na hranice možností jednoho modelu?
- Co když už delší učení nebo složitější model vede už jen k přeučení modelu?
- Co s tím?

- Soutěž – Netflix prize (predikce, které filmy by se zákazníkovi mohli také líbit, když viděl a nějak ohodnotil jinou skupinu filmů?)

- Soutěž – Netflix prize (predikce, které filmy by se zákazníkovi mohli také líbit, když viděl a nějak ohodnotil jinou skupinu filmů?)
- Respektive – cílem je předpovědět hodnocení filmu konkrétním zákazníkem, když víme, jak hodnotil jiné filmy v minulosti.
- A cenu (2 000 000 USD) získá ten, kdo dokáže na testovací množině zlepšit přesnost o 5%.

Motivace (2)

Rank	Team Name	Best Test Score	% Improvement	Best Submit Time
Grand Prize - RMSE = 0.8567 - Winning Team: BellKor's Pragmatic Chaos				
1	BellKor's Pragmatic Chaos	0.8567	10.06	2009-07-26 18:18:28
2	The Ensemble	0.8567	10.06	2009-07-26 18:38:22
3	Grand Prize Team	0.8582	9.90	2009-07-10 21:24:40
4	Opera Solutions and Vandelay United	0.8588	9.84	2009-07-10 01:12:31
5	Vandelay Industries !	0.8591	9.81	2009-07-10 00:32:20
6	PragmaticTheory	0.8594	9.77	2009-06-24 12:06:56
7	BellKor in BigChaos	0.8601	9.70	2009-05-13 08:14:09
8	Dace	0.8612	9.59	2009-07-24 17:18:43
9	Feeds2	0.8622	9.48	2009-07-12 13:11:51
10	BigChaos	0.8623	9.47	2009-04-07 12:33:59
11	Opera Solutions	0.8623	9.47	2009-07-24 00:34:07
12	BellKor	0.8624	9.46	2009-07-26 17:19:11

- A všechny TOP týmy používají ensembles modelů.

- Kombinace modelů je cestou, jak získat lepší přesnost, než je přesnost nejlepšího z modelů.

Kombinace modelů

- Kombinace modelů je cestou, jak získat lepší přesnost, než je přesnost nejlepšího z modelů.
- Každý model dělá chyby pro trochu jiná data. A trochu jiné chyby.
- Čili, když se zkombinují dohromady, možná modely v ensemble své chyby eliminují.

Kombinace modelů

- Kombinace modelů je cestou, jak získat lepší přesnost, než je přesnost nejlepšího z modelů.
- Každý model dělá chyby pro trochu jiná data. A trochu jiné chyby.
- Čili, když se zkombinují dohromady, možná modely v ensemble své chyby eliminují.
- Také tím, že zkombinují různé modely, dokáže výsledný model aproximovat rozhodovací hranici, kterou by jinak samostatné modely nedokázaly proložit.

Kombinace modelů

- Kombinace modelů je cestou, jak získat lepší přesnost, než je přesnost nejlepšího z modelů.
- Každý model dělá chyby pro trochu jiná data. A trochu jiné chyby.
- Čili, když se zkombinují dohromady, možná modely v ensemble své chyby eliminují.
- Také tím, že zkombinují různé modely, dokáže výsledný model aproximovat rozhodovací hranici, kterou by jinak samostatné modely nedokázaly proložit.
- Analogie z idealizované zkoušky – každý student se naučí látku (každý s jinými chybami) a společně rozhodují o odpovědích na otázky. A v ideálním případě by měli u každé otázky odpovědět správně :).

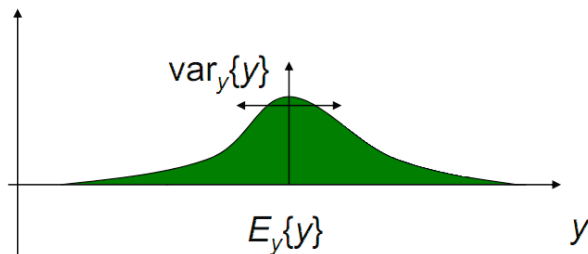
- Vraťme se ještě k chybám modelů.
- Jak jsem povídal posledně, když vytvořím různé modely (i na stejných datech), nebudou mít stejnou chybu, ale jejich chyby se budou lišit.

Variance modelů (rozptyl chyby modelů)

- Vraťme se ještě k chybám modelů.
- Jak jsem povídal posledně, když vytvořím různé modely (i na stejných datech), nebudou mít stejnou chybu, ale jejich chyby se budou lišit.
 - ▶ Například použiji jiné počáteční hodnoty,
 - ▶ nebo vezmu jinou podmnožinu trénovací množiny.

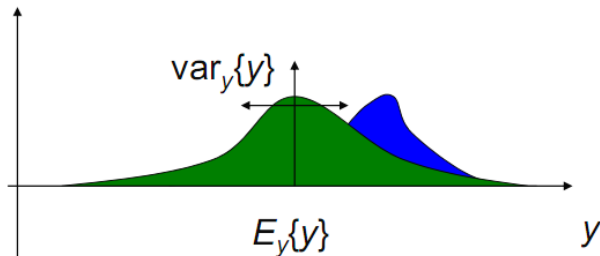
Variance modelů (rozptyl chyby modelů) (2)

- Nicméně chyby všech takto vytvořených modelů by měly být z normálního rozdělení se stejnou střední hodnotou a rozptylem.
- Čili rozptyl modelů udává jako moc se liší chyba jednotlivých modelů od ideální střední chyby.



Bias modelů (Zaujetí modelů)

- Bias (zaujetí) vyjadřuje systematickou chybu způsobenou (například) špatně zvolenou trénovací množinou.

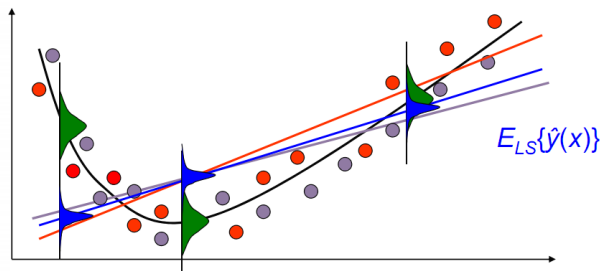


Nedoučení modelu (underfitting)

- Model (například lineární regrese) je příliš jednoduchý, aby dokázal popsat data.
- Modely budou mít nízkou varianci, ale vysoký bias.
- Co to znamená?

Nedoučení modelu (underfitting)

- Model (například lineární regrese) je příliš jednoduchý, aby dokázal popsat data.
- Modely budou mít nízkou varianci, ale vysoký bias.
- Co to znamená?
- Modely si budou podobné, ale mají velkou chybu proti původním datům.

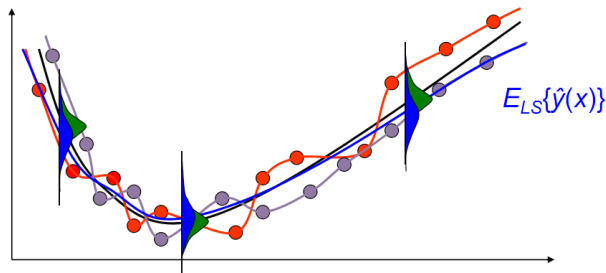


Přeučení modelu (overfitting, už zase)

- Model je příliš ohebný a naučil se i šum, který v datech ve skutečnosti není.
- Modely budou mít nízký bias, ale vysokou varianci, ale nízký bias.
- Co to znamená?

Přeučení modelu (overfitting, už zase)

- Model je příliš ohebný a naučil se i šum, který v datech ve skutečnosti není.
- Modely budou mít nízký bias, ale vysokou varianci, ale nízký bias.
- Co to znamená?
- Modely sice budou mít nízkou chybu na datech, ale jednotlivé modely budou hodně rozdílné.



Kombinování modelů – prevence přeučení

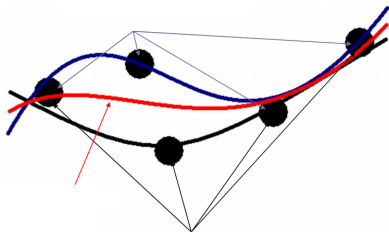
- Přeučení – model se naučí i šum v datech a na testovacích datech vykazuje velké chyby.

Kombinování modelů – prevence přeučení

- Přeučení – model se naučí i šum v datech a na testovacích datech vykazuje velké chyby.
- Mám skupinu modelů, a každý jsem naučil na jiné podmnožině trénovacích dat.
- A každý model jsem možná přeučil. Ale můžu něčeho dosáhnout jejich kombinací?

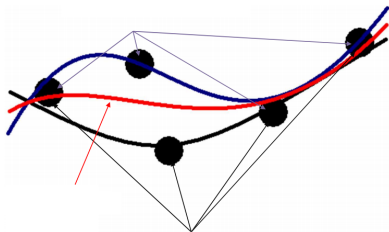
Kombinování modelů – prevence přeučení

- Přeučení – model se naučí i šum v datech a na testovacích datech vykazuje velké chyby.
- Mám skupinu modelů, a každý jsem naučil na jiné podmnožině trénovacích dat.
- A každý model jsem možná přeučil. Ale můžu něčeho dosáhnout jejich kombinací?



Kombinování modelů – prevence přeučení

- Přeučení – model se naučí i šum v datech a na testovacích datech vykazuje velké chyby.
- Mám skupinu modelů, a každý jsem naučil na jiné podmnožině trénovacích dat.
- A každý model jsem možná přeučil. Ale můžu něčeho dosáhnout jejich kombinací?

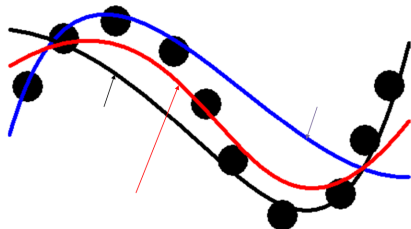


- Snížili jsme rozptyl modelů.

- Jednoduché modelovací metody s malou ohebností (opět naučené na různých podmnožinách dat) nedokáží dobře aproximovat rozhodovací hranici.

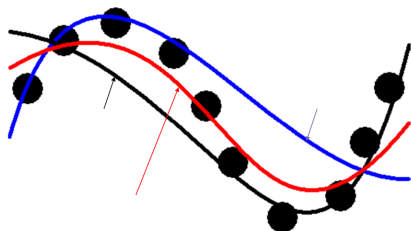
Kombinování modelů – snižování zaujetí

- Jednoduché modelovací metody s malou ohebností (opět naučené na různých podmnožinách dat) nedokáží dobře aproximovat rozhodovací hranici.



Kombinování modelů – snižování zaujetí

- Jednoduché modelovací metody s malou ohebností (opět naučené na různých podmnožinách dat) nedokáží dobře aproximovat rozhodovací hranici.



- Jejich kombinací opět dokáží získat mnohem "ohebnější" hranici a tedy i menší chybu.

- Síla seskupování modelů tkví v diverzitě (různorodosti) modelů.

Skupiny modelů

- Síla seskupování modelů tkví v diverzitě (různorodosti) modelů.
- Diverzity modelů můžeme dosáhnout dvěma cestami:
 - ▶ Vytvořit modely pomocí různých modelovacích technik.
 - ▶ Vytvořit modely nad různými podmnožinami trénovací množiny.

- Síla seskupování modelů tkví v diverzitě (různorodosti) modelů.
- Diverzity modelů můžeme dosáhnout dvěma cestami:
 - ▶ Vytvořit modely pomocí různých modelovacích technik.
 - ▶ Vytvořit modely nad různými podmnožinami trénovací množiny.
- Základní použití všech ensemblovacích algoritmů má následující schéma:
 - 1 Vyber stavební jednotky ensmbly (vhodné modely) a vytvoř pro každý trénovací množinu.

- Síla seskupování modelů tkví v diverzitě (různorodosti) modelů.
- Diverzity modelů můžeme dosáhnout dvěma cestami:
 - ▶ Vytvořit modely pomocí různých modelovacích technik.
 - ▶ Vytvořit modely nad různými podmnožinami trénovací množiny.
- Základní použití všech ensemblovacích algoritmů má následující schéma:
 - 1 Vyber stavební jednotky ensmbly (vhodné modely) a vytvoř pro každý trénovací množinu.
 - 2 Natrénuj všechny modely v ensmbly (učení jednotlivých modelů může být závislé na učení ostatních modelů v ensmbly).

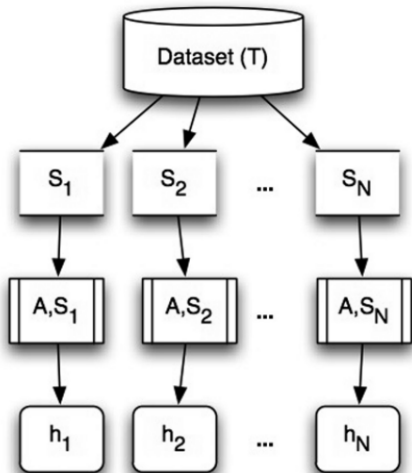
- Síla seskupování modelů tkví v diverzitě (různorodosti) modelů.
- Diverzity modelů můžeme dosáhnout dvěma cestami:
 - ▶ Vytvořit modely pomocí různých modelovacích technik.
 - ▶ Vytvořit modely nad různými podmnožinami trénovací množiny.
- Základní použití všech ensemblovacích algoritmů má následující schéma:
 - 1 Vyber stavební jednotky ensmbly (vhodné modely) a vytvoř pro každý trénovací množinu.
 - 2 Natrénuj všechny modely v ensmbly (učení jednotlivých modelů může být závislé na učení ostatních modelů v ensmbly).
 - 3 Výstup skupiny modelů – spočítej výstup všech modelů v ensmbly a jejich výstup skombinuj do výsledného výstupu.

- Pro klasifikační a regresní úlohy se dají použít:
 - ▶ Bagging
 - ▶ Boosting
 - ▶ Stacking
 - ▶ Cascade generalization

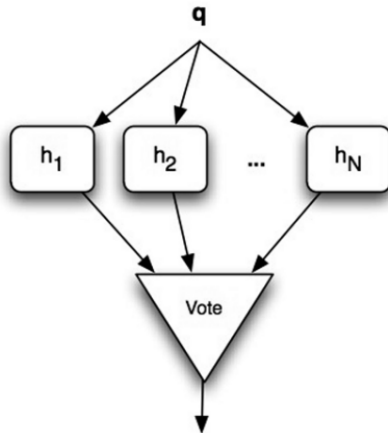
- Pro klasifikační a regresní úlohy se dají použít:
 - ▶ Bagging
 - ▶ Boosting
 - ▶ Stacking
 - ▶ Cascade generalization
- Pouze pro klasifikační úlohy se také dají použít:
 - ▶ Cascading
 - ▶ Delegating
 - ▶ Arbitrating

- Nejjednodušší ensemblovací metoda.
- Nezávysle naučím skupinu modelů.
- Výstup ensmbly se určí:
 - ▶ pro regresi – spočítám průměrnou hodnotu ze všech výstupů modelů v ensmbly.
 - ▶ pro klasifikaci – spočítám majoritu z výstupů modelů v ensmbly.

Bagging (2)



(Meta)Learning

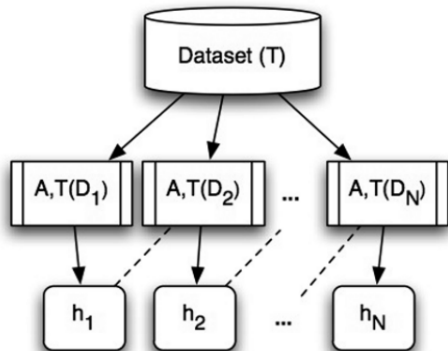


Classifying

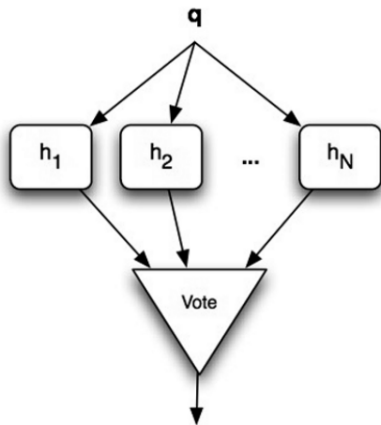
Boosting

- Naučím posloupnost modelů, každý další model se bude všímat té část vstupních dat, ve které předchozí modely chybovaly.
- To, jak moc si bude model všímat vstupních dat se vyjadřuje vahami vstupního vzoru.
- Oklasifikuji trénovací data všemy doposud naučenými modely a vzorům, na kterých jsem udělal chybu, přidám do trénovací množiny následujícího modelu.
- Z toho vyplývá, že se modely učí jeden po druhém.
- Výstup ensamble se spočítá jako vážený průměr (vážená majorita).
- Váhy pro majoritu se určí na základě přesnosti jednotlivých modelů.

Boosting (2)



(Meta)Learning



Classifying

Adaboost

- Nejznámější algoritmus pro Boosting se nazývá Adaboost.
- Základní algoritmus předpokládá klasifikaci do dvou tříd (+1 / -1).
- Značení n je počet vzorů v trénovací množině. h_t je model (klasifikátor).

1 Nastav konstantní váhy všech vzorů v trénovací množině na $D_1(i) = \frac{1}{n}$ a nastav $t = 1$.

2 Nauč klasifikátor h_t .

3 Spočítej globální chybu na trénovacích datech

$$\eta_t = \sum_{\forall i, h_t(x_i) \neq y_i} D_t(i)$$

4 Změň váhy všech vstupních vzorů, u kterých klasifikátor h_t udělal chybu. $D_{t+1}(i) = \frac{D_t(i)}{Z_t} \frac{\eta_t}{1-\eta_t}$. $\forall i$, kde $h_t(x_i) \neq y_i$.

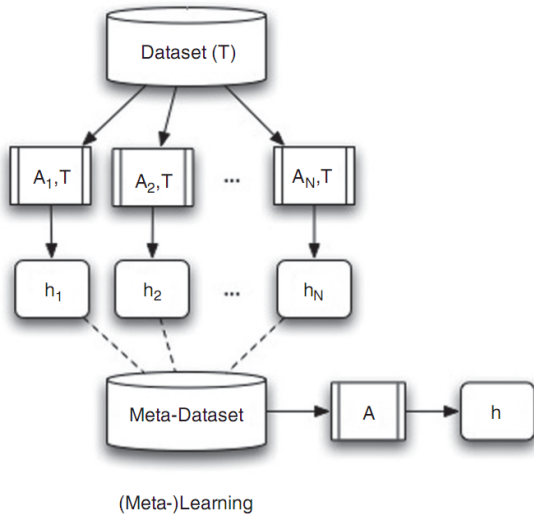
5 Pokud globální chyba η_t klesla pod stanovenou hranici, skonči. Jinak pokračuj bodem 2.

• Prezentace věnovaná přímo algoritmu Adaboost

http://www.robots.ox.ac.uk/~az/lectures/cv/adaboost_matas.pdf

- Nezávysle naučím skupinu modelů. Pro určení finálního výstupu použiji místo majority další model (meta model).
- Získám tím větší možnosti pro kombinaci výstupů jednotlivých modelů.
- Výstupy jednotlivých modelů slouží vstupy meta modelu.
- Při počítání výstupu spočítám výstupy jednotlivých modelů, které pak pustím do meta modelu, který spočítá skutečný výstup.

Stacking (2)

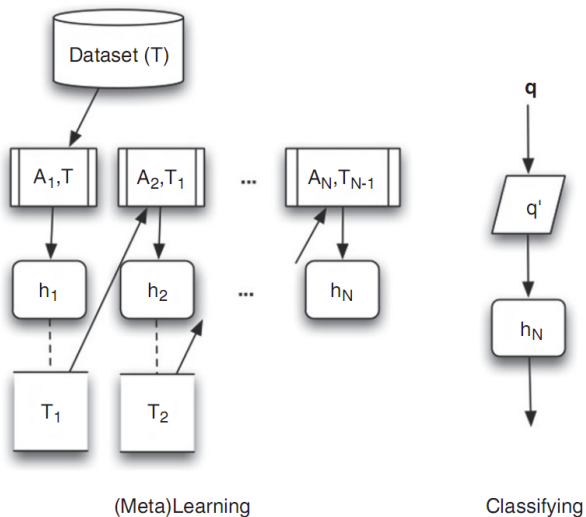


Classifying

Cascade generalization

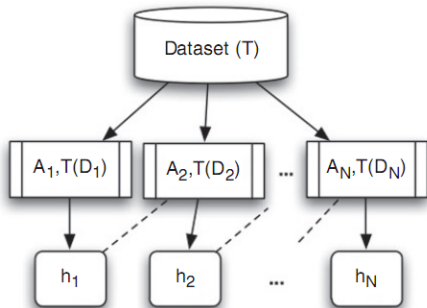
- Modely v ensamble tvořím postupně, ke vstupním proměnným postupně přidávám výstupy předchozích modelů.
- Vstupem i -tého modelu jsou tedy vstupní proměnné $(x_1, x_2, \dots, x_n, y_1, \dots, y_{i-1})$
- Kde y_1, \dots, y_{i-1} jsou výstupy předchozích modelů.
- Modely je tedy učí jeden po druhém a výstupem ensamble je výstup posledního modelu.

Cascade generalization (2)

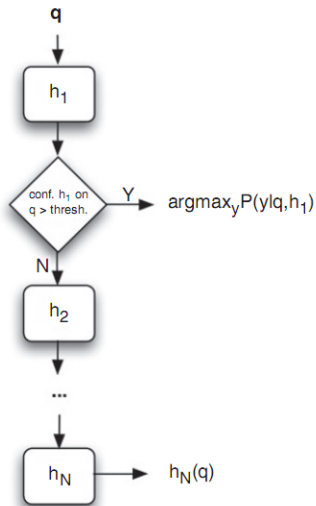


- Podobně jako u Boostingu se další modely specializují na vzory, které předchozí modely klasifikovaly špatně – které indikovaly nízkou pravděpodobnost přiřazení vzoru do dané třídy.
- Při počítání výstupu ensmbly se použije výstup modelu, který udává dostatečně vysokou ppst výstupní třídy.

Cascading (2)



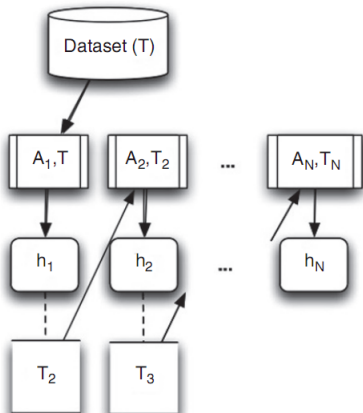
(Meta)Learning



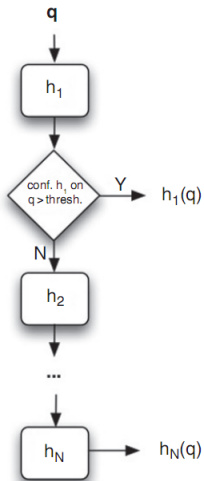
Classifying

- Trénovací množina prvního modelu je celá trénovací množina.
- Do trénovací množiny dalšího klasifikátoru se přiřadím stupní vzory, které byly klasifikovány špatně nebo ppst jejich zařazení do správné třídy je menší než určený práh.
- Výstup ensamble je výstup modelu, který indikuje dostatečně vysokou ppst přiřazení do dané třídy.

Delegating (2)



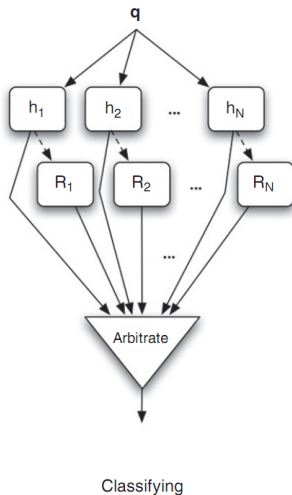
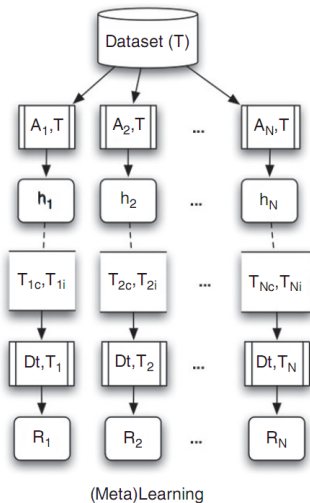
(Meta)Learning



Classifying

- Trochu zvláštní metoda, kde jsou dva typy modelů
 - ▶ standardní modely, predikující cílovou proměnnou,
 - ▶ rozhodčí modely, které predikují úspěšnost standardních modelů.
- Každý standardní model má svůj rozhodčí model.
- Každá dvojice standardní+rozhodčí model je učena nezávisle.
- Výstupem ensamble je model, jehož rozhodčí predikuje nejvyšší míru úspěchu.

Arbitrating (2)



Výběr relevantních příznaků

- Poslední téma tohoto kurzu – opravdu všechny vstupní proměnné potřebuji ke klasifikaci?

Výběr relevantních příznaků

- Poslední téma tohoto kurzu – opravdu všechny vstupní proměnné potřebuji ke klasifikaci?
- Při klasifikaci zdravých a nemocných lidí asi bude hrát větší roli jejich teplota a tlak, než barva vlasů.

Výběr relevantních příznaků

- Poslední téma tohoto kurzu – opravdu všechny vstupní proměnné potřebují ke klasifikaci?
- Při klasifikaci zdravých a nemocných lidí asi bude hrát větší roli jejich teplota a tlak, než barva vlasů.
- Techniky, které vybírají vhodné vstupní proměnné, se označují jako feature selection (případně feature ranking) metody.
- A dělí se do dvou hlavních kategorií:
 - ▶ feature selection – tyto metody dodají seznam vstupních proměnných (atributů), které považují za důležité,
 - ▶ feature ranking – tyto metody přiřadí každému atributu skóre, který indikuje vliv atributu na výstupní třídu.

- Typicky hledají podmnožinu atributů, na které model ještě funguje dobře. Dělí se do 3 hlavních kategorií:
 - ▶ Wrappers – vyberou skupinu atributů, nad ní naučí nějaký model, spočítají jeho přesnost a podle přesnosti upraví skupinu atributů, atd...

- Typicky hledají podmnožinu atributů, na které model ještě funguje dobře. Dělí se do 3 hlavních kategorií:
 - ▶ Wrappers – vyberou skupinu atributů, nad ní naučí nějaký model, spočítají jeho přesnost a podle přesnosti upraví skupinu atributů, atd...
 - ▶ Filters – fungují dost podobně, jen místo modelů se vyhodnocují tzv. filtry.
 - ★ Filtry se v této souvislosti rozumí například korelace mezi vybranou skupinou vstupů a výstupem nebo vzájemná informace, ...

- Typicky hledají podmnožinu atributů, na které model ještě funguje dobře. Dělí se do 3 hlavních kategorií:
 - ▶ Wrappers – vyberou skupinu atributů, nad ní naučí nějaký model, spočítají jeho přesnost a podle přesnosti upraví skupinu atributů, atd...
 - ▶ Filters – fungují dost podobně, jen místo modelů se vyhodnocují tzv. filtry.
 - ★ Filtry se v této souvislosti rozumí například korelace mezi vybranou skupinou vstupů a výstupem nebo vzájemná informace, ...
 - ▶ Embedded techniques – tento způsob je zabudován do učícího algoritmu modelu a podle toho, které proměnné model využívá, se sestavuje seznam důležitých atributů.

Feature selection (2)

- Při hledání vhodné kombinace se často uplatňuje "hladový" přístup.
- Nejprve hledám množinu s jedním atributem, která má nejvyšší skóre (například nejvyšší přesnost modelu).
- K této jednoprvkové množině zkouším přidávat další atribut a hledám, který přinese největší zlepšení modelu.
- Pak hledám třetí, a tak dále, dokud se model nepřestane zlepšovat.

Feature ranking

- Přiřazuje každé vstupní proměnné skóre, které určuje její významnost.

- Přiřazuje každé vstupní proměnné skóre, které určuje její významnost.
- Často se používají stejné metody, které se na předchozím slajdu označovaly jako filters:
 - ▶ vzájemná informace mezi jednotlivými atributy a výstupem,
 - ▶ korelace,
 - ▶ informační entropie,
 - ▶ přesnost perceptronu s jedním vstupem.

- Přiřazuje každé vstupní proměnné skóre, které určuje její významnost.
- Často se používají stejné metody, které se na předchozím slajdu označovaly jako filters:
 - ▶ vzájemná informace mezi jednotlivými atributy a výstupem,
 - ▶ korelace,
 - ▶ informační entropie,
 - ▶ přesnost perceptronu s jedním vstupem.
- Je pak na člověku, jak těchto informací využije.