MÔ HÌNH VÀ BÀI TOÁN MÁY HỌC

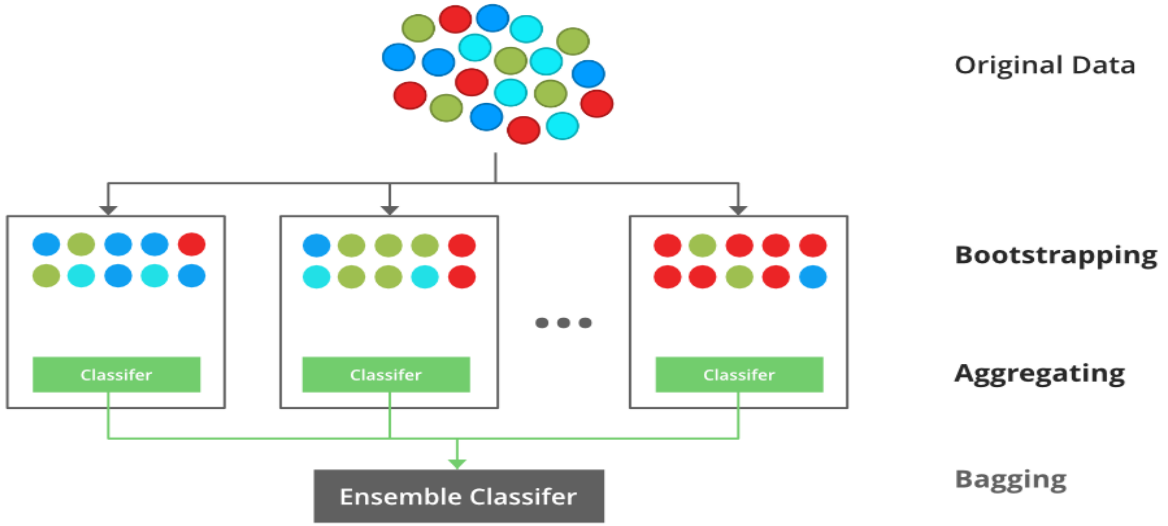
TS. Nguyễn Vinh Tiệp

NỘI DUNG

I. Bài toán máy học
II. Mô hình máy học
    A. Nền tảng
    B. Bagging and Boosting
    C. Mô hình cây (tree-based)
III. Máy học tự động (Auto Machine learning)

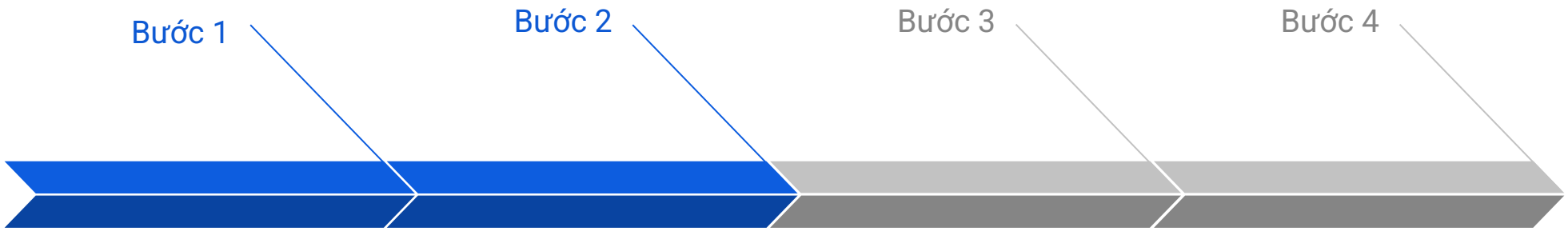
Bagging

- Thuộc vào nhóm mô hình học kết hợp (ensemble-based learning)
- Các mô hình **Weak learners** mà chừng học **song song** và **độc lập**, kết hợp các mô hình để xác định dự đoán trung bình của mô hình
- Vd: **Random Forest**



https://www.geeksforgeeks.org/bagging-vs-boosting-in-machine-learning/

Các bước thực hiện của mô hình Bagging



Nhiều tập hợp con được tạo từ tập dữ liệu gốc với các bộ dữ liệu bằng nhau, chọn các quan sát **có thể thay thế**

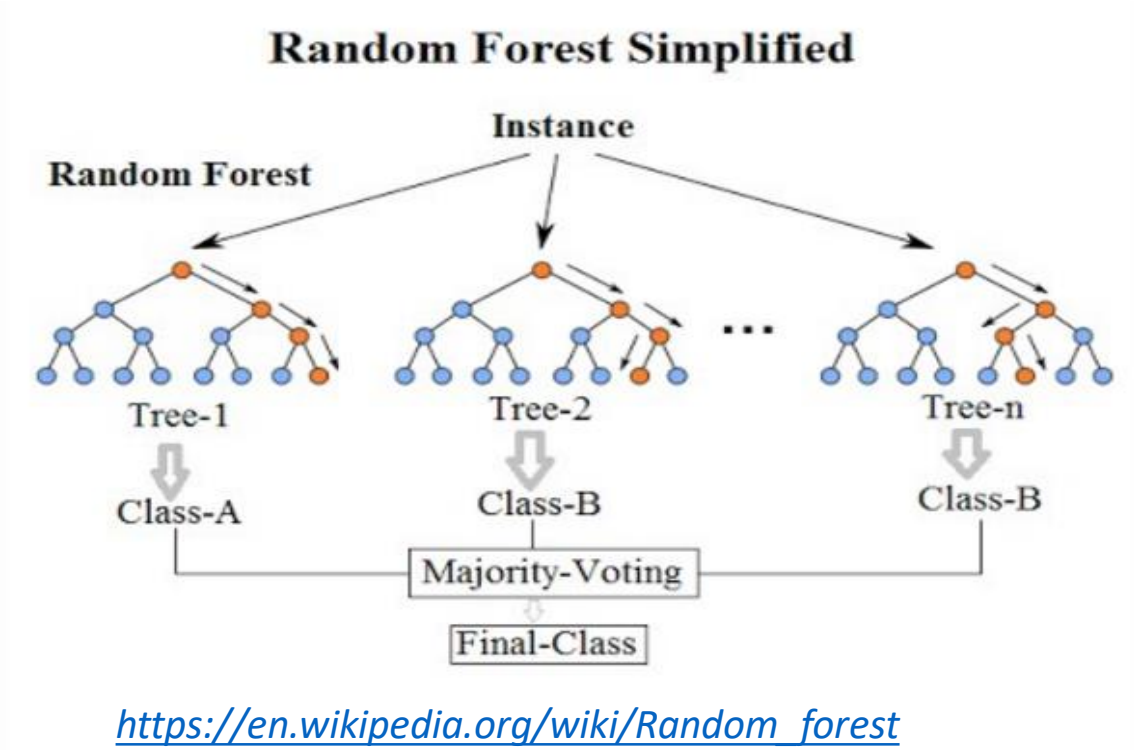
Một mô hình cơ sở được tạo trên mỗi tập hợp con này

Mỗi mô hình được học song song với mỗi tập huấn luyện và độc lập với nhau

Các dự đoán cuối cùng được xác định bằng cách kết hợp các dự đoán từ tất cả các mô hình

Random Forest

- Sử dụng Bagging (Bootstrap Aggregating) để huấn luyện từng mô hình Decision Tree trên một tập hợp con dữ liệu ngẫu nhiên khác nhau
- Giảm sự tương quan giữa các cây và làm cho ensemble trở nên mạnh mẽ hơn



https://en.wikipedia.org/wiki/Random_forest

Siêu tham số quan trọng

- Siêu tham số để tăng khả năng dự đoán
- Random Forest sklearn

n_estimators
Số cây trong rừng - The number of trees in forest

max_features
Số lượng đặc trưng cần xem xét khi tìm kiếm sự phân chia tốt nhất

min_samples_leaf
Số lượng mẫu tối thiểu cần có ở một nút lá

criterion
Chức năng đo lường chất lượng của sự phân chia

max_depth
Độ sâu tối đa của cây. Nếu Không, thì các nút sẽ được mở rộng cho đến khi tất cả các lá đều thuần túy hoặc cho đến khi tất cả các lá chứa ít hơn min_samples_split

max_leaf_nodes
Phát triển với max_leaf_nodes theo cách tốt nhất đầu tiên

Ưu điểm

Hiệu quả

Được coi là mô hình rất chính xác và mạnh mẽ và chạy hiệu quả trên tập dữ liệu lớn

Xử lý chiều dữ liệu cao (high dimensionality)

Có thể xử lý các tập dữ liệu có số lượng đặc trưng cao và không yêu cầu chia tỷ lệ đặc trưng

Tính linh hoạt

Có thể được sử dụng cho bài toán hồi quy và phân loại, đồng thời chúng tương đối dễ điều chỉnh vì không yêu cầu điều chỉnh siêu tham số nhiều

Ưu điểm

Mạnh mẽ với dữ liệu outlier & non-linear

Ít có xu hướng overfitting và mạnh mẽ đối với các ngoại lệ, cũng như có khả năng mô hình hóa mối quan hệ phi tuyến tính, phức tạp

Parallelizable

Việc huấn luyện các cây khác nhau có thể được thực hiện song song vì mỗi cây được xây dựng độc lập

Feature Importance

Đưa ra ước tính tốt về những đặc trùng nào là quan trọng trong dữ liệu cơ bản đang được lập mô hình hóa
→ lựa chọn tính năng

Nhược điểm

Interpretability

Khó diễn giải so với cây quyết định

Computational complexity

Có thể tạo số lượng cây quyết định khá lớn và tốn nhiều bộ nhớ

Bias with imbalanced data

Có thể có bias đối với lớp chiếm đa số khi xử lý các tập dữ liệu mất cân bằng

Ví dụ

[Notebook example]

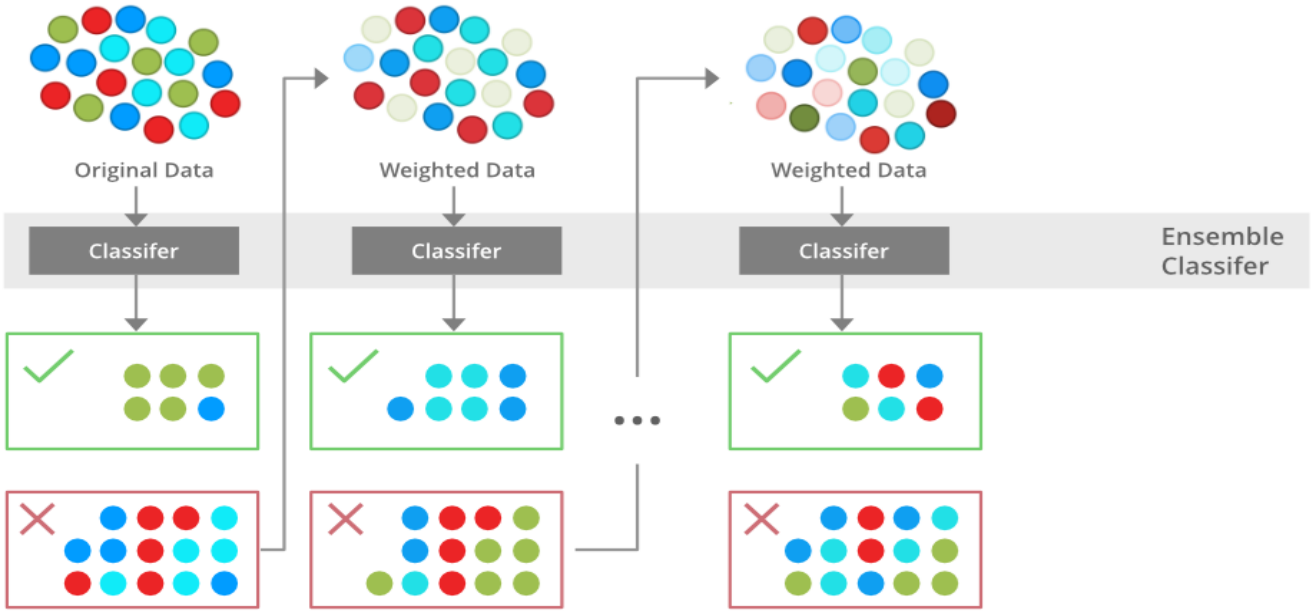
```
from sklearn.ensemble import RandomForestClassifier

rf = RandomForestClassifier(criterion='gini',
                            n_estimators=700,
                            min_samples_split=10,
                            min_samples_leaf=1,
                            max_features='auto',
                            oob_score=True,
                            random_state=1,
                            n_jobs=-1)
rf.fit(train.iloc[:, 1:], train.iloc[:, 0])
print("%.4f" % rf.oob_score_)
```

```
0.8294
```

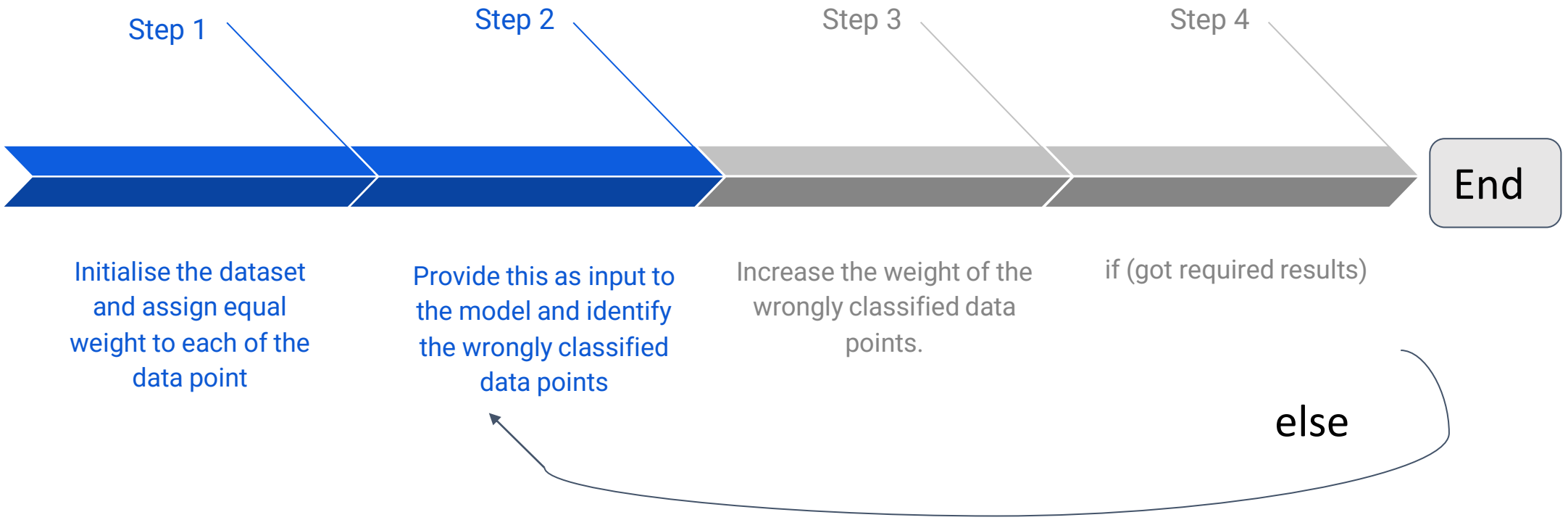
Boosting

- Thuộc vào nhóm mô hình học kết hợp (ensemble-based learning)
- Weak learners học tuần tự và thích ứng để cải thiện dự đoán mô hình của thuật toán học
- AdaBoost, XGBoost, LightGBM, CatBoost

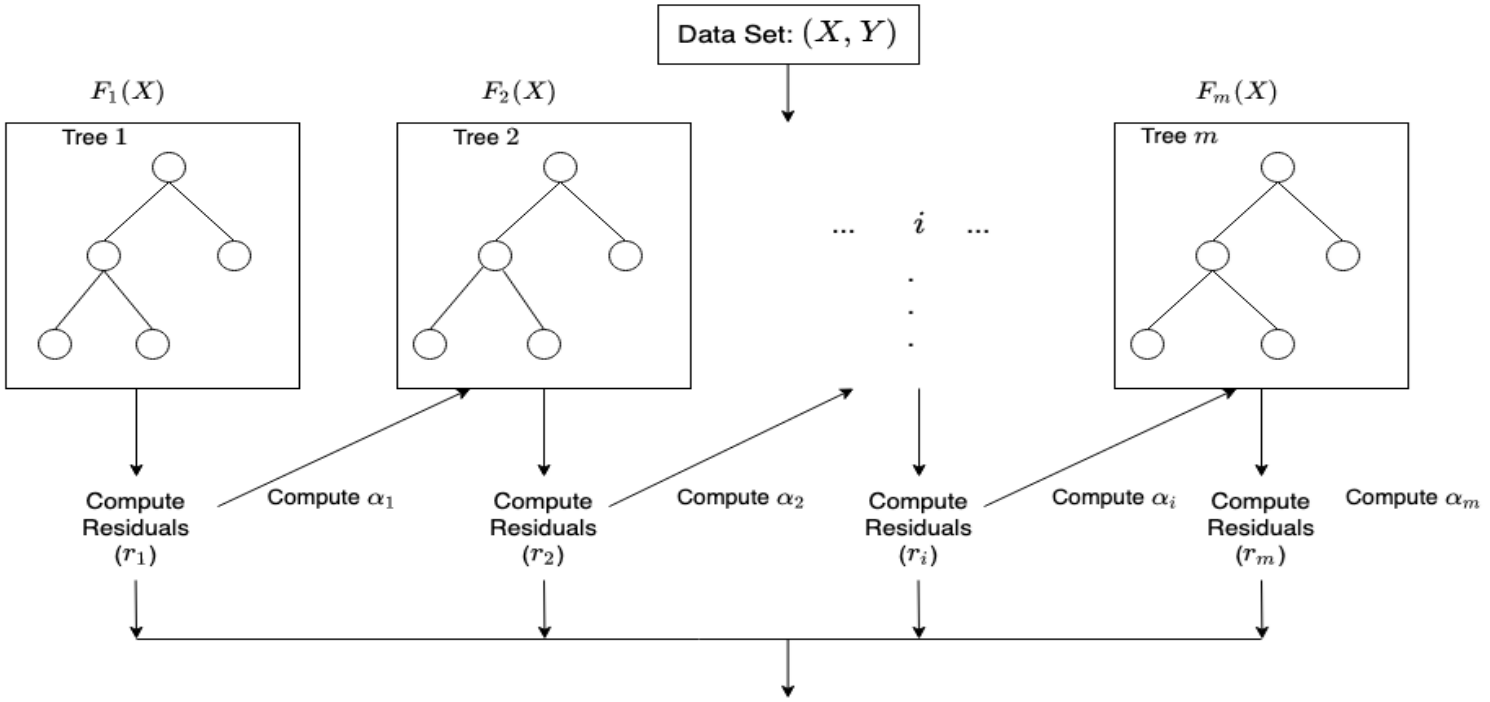


https://www.geeksforgeeks.org/bagging-vs-boosting-in-machine-learning/

Các bước cài đặt phương pháp Boosting



How Gradient Boosting Work?



$$F_m(X) = F_{m-1}(X) + \alpha_m h_m(X, r_{m-1}),$$

where α_i, and r_i are the regularization parameters and residuals computed with the i^{th} tree respectfully, and h_i is a function that is trained to predict residuals, r_i using X for the i^{th} tree. To compute α_i we use the residuals computed, r_i and compute the following: $arg \min_{\alpha} = \sum_{i=1}^{m} L(Y_i, F_{i-1}(X_i) + \alpha h_i(X_i, r_{i-1}))$ where $L(Y, F(X))$ is a differentiable loss function.

https://docs.aws.amazon.com/sagemaker/latest/dg/xgboost-HowItWorks.html

Gradient Boosting: Ví dụ

Bạn có thể xây dựng mô hình Gradient Boosting để dự đoán mức lương dựa trên số năm kinh nghiệm không?

Year	Salary (1000 $)
5	82
7	80
12	103
23	118
25	172
28	127
29	204
34	189
35	99
40	166

Gradient Boosting: Ví dụ

- Bước đầu tiên: mô hình nên được khởi tạo bằng một hàm F0(x).
- Tính toán sai số dư cho từng trường hợp (y - F0(x)).

$$F_0(x) = argmin_\gamma \sum_{i=1}^{n} L(y_i, \gamma)$$

$$argmin_\gamma \sum_{i=1}^{n} L(y_i, \gamma) = argmin_\gamma \sum_{i=1}^{n} (y_i - \gamma)^2$$

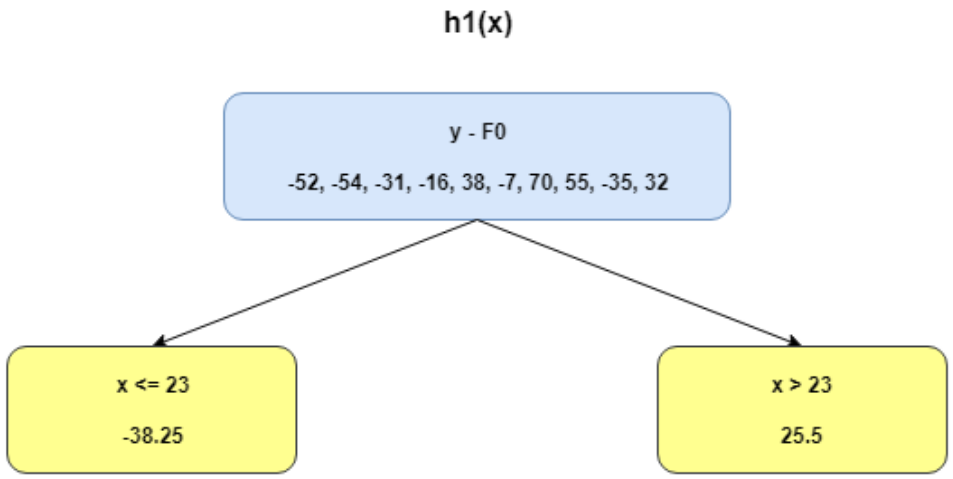
$$F_0(x) = \frac{\sum_{i=1}^{n} y_i}{n}$$

x	y	F0	y - F0
5	82	134	-52
7	80	134	-54
12	103	134	-31
23	118	134	-16
25	172	134	38
28	127	134	-7
29	204	134	70
34	189	134	55
35	99	134	-35
40	166	134	32

https://www.analyticsvidhya.com/blog/2018/09/an-end-to-end-guide-to-understand-the-math-behind-xgboost/

Gradient Boosting: Ví dụ

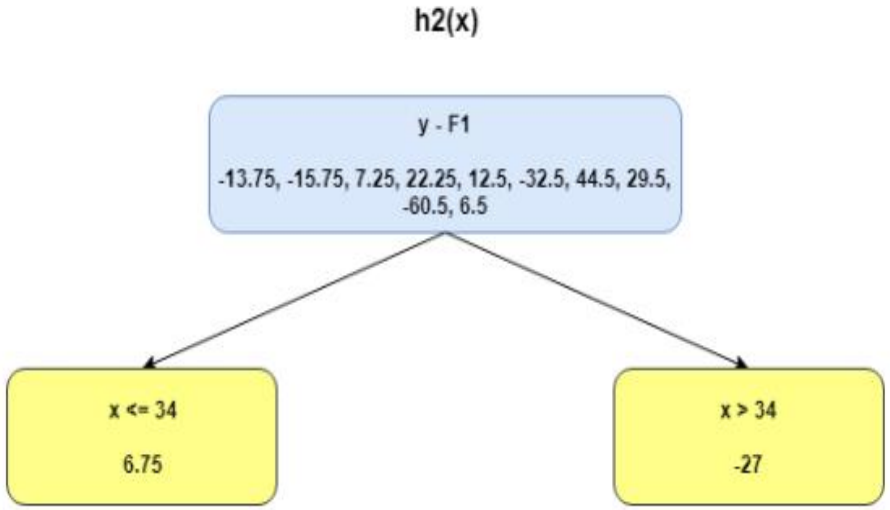
- Sử dụng sai số dư (y - F0(x)) để tạo một bộ học yếu h1(x)
- Dự đoán được tính: F1(x) = F0(x) + h1(x)

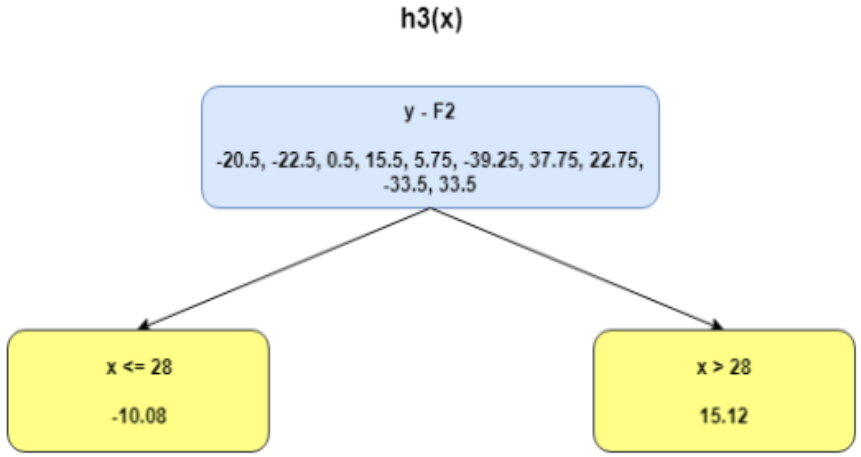


x	y	F0	y-F0	h1	F1
5	82	134	-52	-38.25	95.75
7	80	134	-54	-38.25	95.75
12	103	134	-31	-38.25	95.75
23	118	134	-16	-38.25	95.75
25	172	134	38	25.50	159.50
28	127	134	-7	25.50	159.50
29	204	134	70	25.50	159.50
34	189	134	55	25.50	159.50
35	99	134	-35	25.50	159.50
40	166	134	32	25.50	159.50

Gradient Boosting: Ví dụ

- Việc này có thể lặp lại thêm 2 lần để tính toán h2(x) và h3(x).





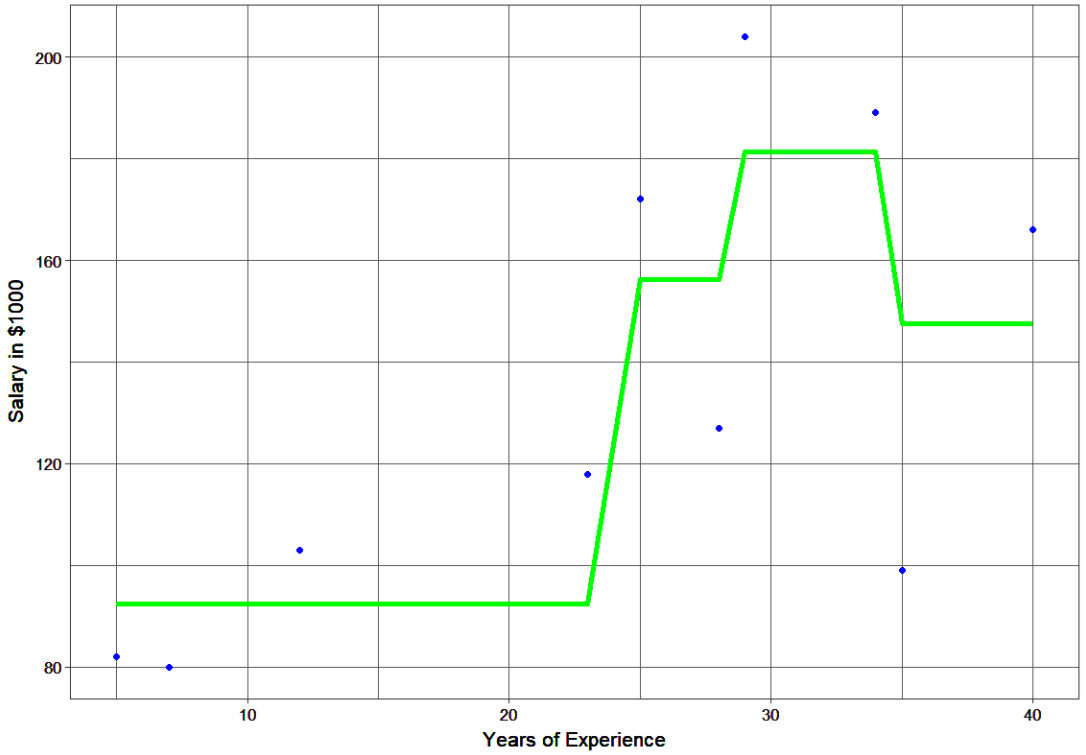
Gradient Boosting: Ví dụ

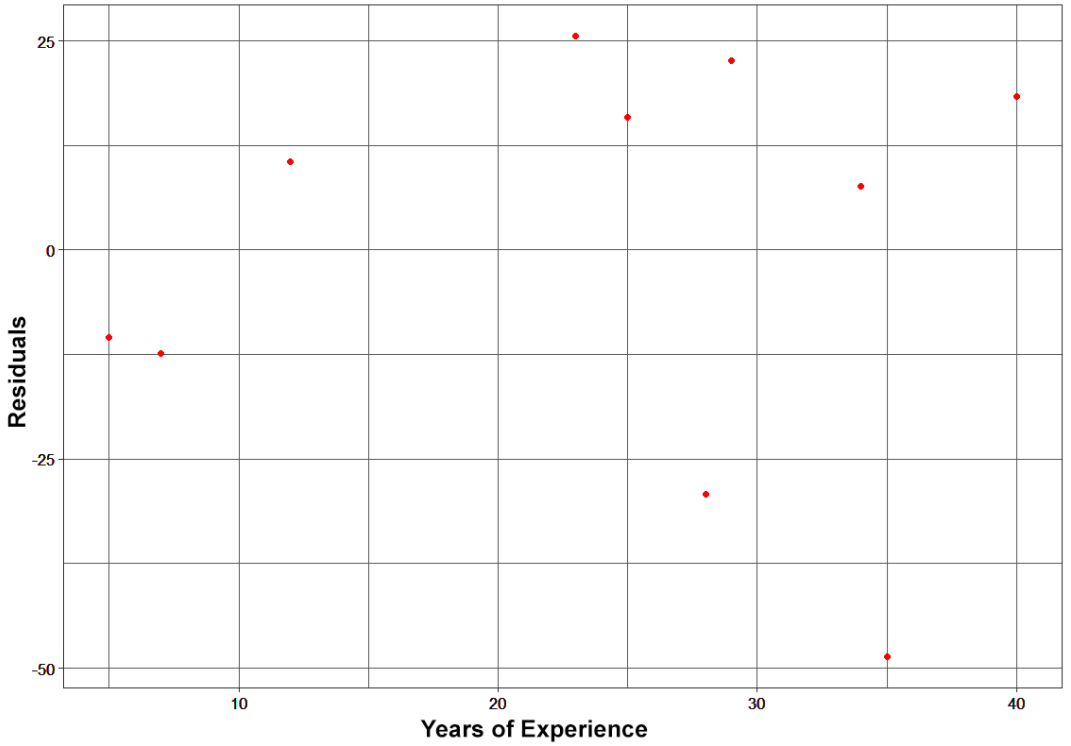
- MSE cho F0(x), F1(x) và F2(x) lần lượt là 875, 692 và 540 → Xây dựng h4(x), h5(x) .. và so sánh MSE?

x	y	F0	y-F0	h1	F1	y-F1	h2	F2	y-F2	h3	F3
5	82	134	-52	-38.25	95.75	-13.75	6.75	102.50	-20.50	-10.08333	92.41667
7	80	134	-54	-38.25	95.75	-15.75	6.75	102.50	-22.50	-10.08333	92.41667
12	103	134	-31	-38.25	95.75	7.25	6.75	102.50	0.50	-10.08333	92.41667
23	118	134	-16	-38.25	95.75	22.25	6.75	102.50	15.50	-10.08333	92.41667
25	172	134	38	25.50	159.50	12.50	6.75	166.25	5.75	-10.08333	156.16667
28	127	134	-7	25.50	159.50	-32.50	6.75	166.25	-39.25	-10.08333	156.16667
29	204	134	70	25.50	159.50	44.50	6.75	166.25	37.75	15.12500	181.37500
34	189	134	55	25.50	159.50	29.50	6.75	166.25	22.75	15.12500	181.37500
35	99	134	-35	25.50	159.50	-60.50	-27.00	132.50	-33.50	15.12500	147.62500
40	166	134	32	25.50	159.50	6.50	-27.00	132.50	33.50	15.12500	147.62500

Gradient Boosting: Residual Error

- Tại giai đoạn mà độ chính xác tối đa được đạt bằng phương pháp boosting, các sai số dư xuất hiện có vẻ được phân bố ngẫu nhiên mà không có bất kỳ mẫu nào.



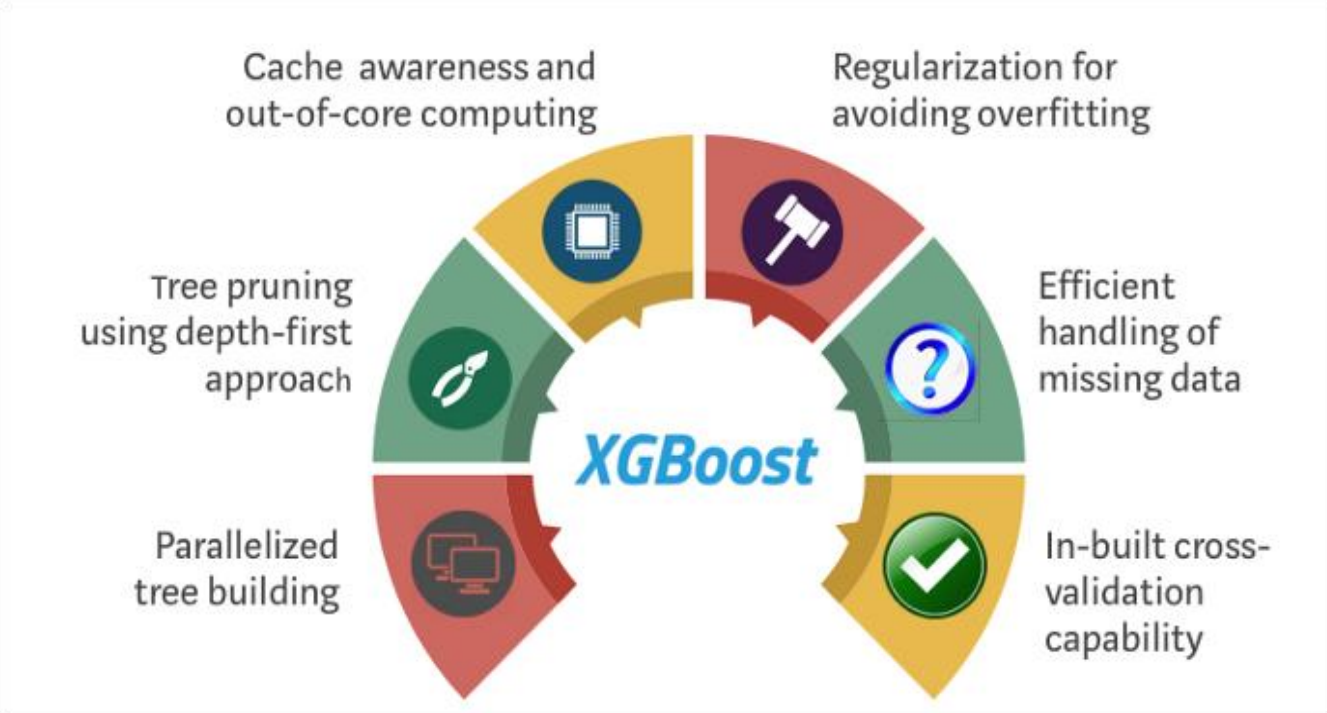


Sự khác biệt giữa Bagging và Boosting

Bagging	Boosting
Giảm sự biến động	Giảm sự thiên vị
Mỗi mô hình được xây dựng độc lập	Các mô hình mới bị ảnh hưởng bởi hiệu suất của các mô hình được xây dựng trước đó
Các mô hình yếu (weak models) được huấn luyện song song	Các mô hình yếu (weak models) được huấn luyện tuần tự

XGBoost (Extreme Gradient Boosting)

- Các mô hình XGBoost (regularizing gradient boosting) được sử dụng nhiều ở các cuộc thi Kaggle Competitions
- Documentations & paper



XGBoost: Tối ưu hóa & cải tiến

01	Regularization	Hợp tác của các mô học yếu → dẫn đến một mô hình rất phức tạp → XGBoost sử dụng cả L1 và L2 để trừng phạt mô hình rất phức tạp.
02	Parallelization and Cache block	Chúng ta không thể huấn luyện nhiều cây cùng lúc, nhưng nó có thể tạo ra các nút khác nhau của cây một cách song song → dữ liệu cần được sắp xếp theo thứ tự.

XGBoost: Tối ưu hóa & cải tiến

03 Sparity Awareness

- XGBoost có thể xử lý **dữ liệu thưa thớt** có thể được tạo ra từ các bước tiền xử lý hoặc giá trị thiếu. Nó sử dụng một thuật toán tìm phân chia đặc biệt.

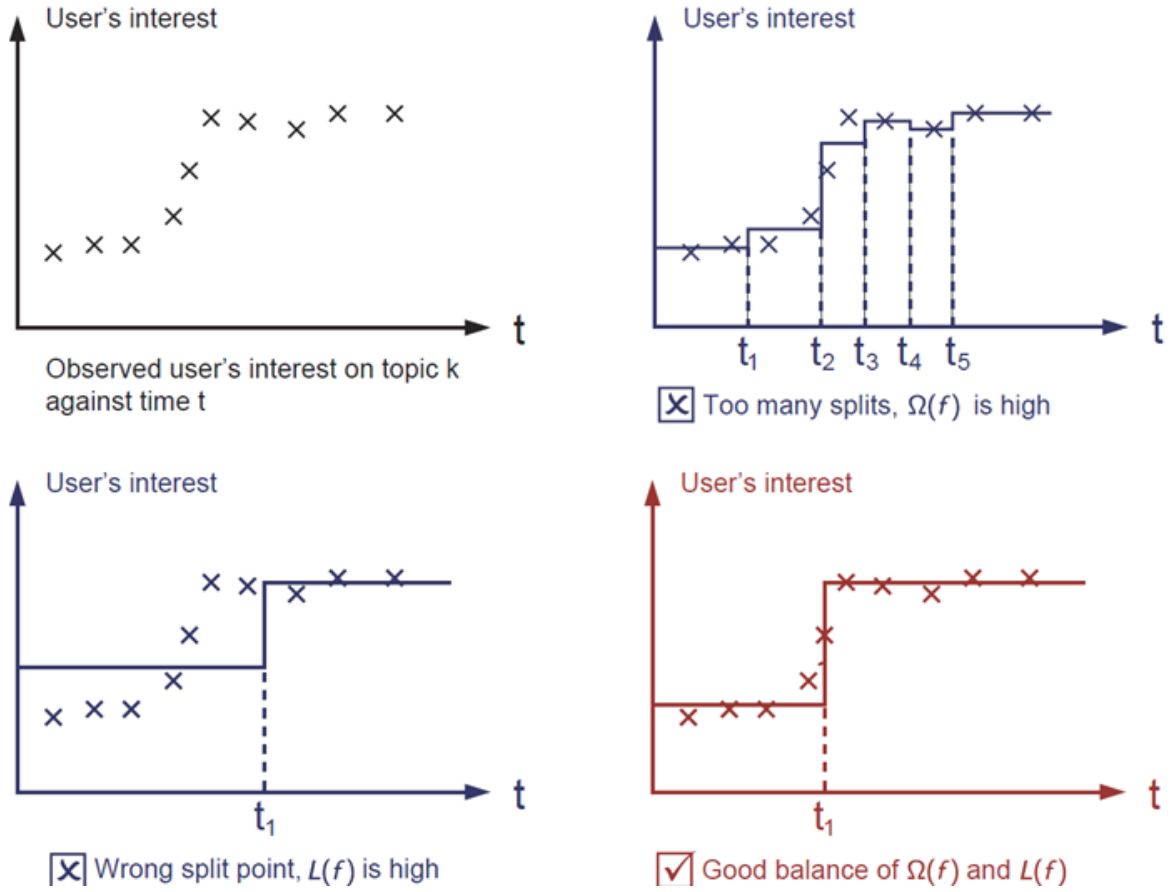
04 Tree Pruning

- XGBoost sử dụng **tham số max_depth** để xác định **điều kiện dừng** cho việc chia nhánh và bắt đầu **tỉa cây** từ phía sau.
- Tiếp cận **theo chiều sâu** này **cải thiện đáng kể hiệu suất tính toán.**

XGBoost: Tối ưu hóa & cải tiến

05	In-build Cross Validation	XGBoost có tích hợp tính năng xác thực chéo được thực hiện ở mỗi vòng lặp trong quá trình tạo mô hình. Điều này ngăn chặn tình trạng quá khớp khi tập dữ liệu không quá lớn.
06	Weighted Quantile Sketch	XGBoost tích hợp sẵn thuật toán weighted quantile sketch có tính phân phối, giúp dễ dàng tìm các điểm chia tối ưu trong các tập dữ liệu có trọng số.
07	Cache awareness and Out-of-core computing	XGBoost tận dụng **tài nguyên** phần cứng một cách hiệu quả và hợp lý. XGBoost sử dụng tính năng tính toán ngoài bộ nhớ để tối ưu hóa không gian đĩa có sẵn → XGBoost cố gắng giảm tập dữ liệu bằng cách nén nó.

Hiệu quả của việc chính quy hóa trong XGBoost



https://xgboost.readthedocs.io/en/stable/tutorials/model.html

Tìm kiếm phân tách nhận biết thưa thớt

Có nhiều nguyên nhân có thể gây ra tình trạng thưa thớt

- Sự xuất hiện của các giá trị thiếu trong dữ liệu.
- Các mục nhập không thường xuyên có giá trị bằng không trong thống kê.
- Các hiện tượng tạo ra từ kỹ thuật đặc trưng như mã hóa one-hot.

XGBoost xử lý các giá trị bị thiếu như thế nào?

Cải tiến quan trọng là chỉ xem xét các mục không bị thiếu, **xem việc** không xuất hiện như một giá trị thiếu và **học** cách xử lý giá trị thiếu **một cách tốt nhất**.

Algorithm 3: Sparsity-aware Split Finding

Input: I, instance set of current node
Input: $I_k = \{i \in I | x_{ik} \neq \text{missing}\}$
Input: d, feature dimension
Also applies to the approximate setting, only collect statistics of non-missing entries into buckets
$gain \leftarrow 0$
$G \leftarrow \sum_{i \in I}, g_i, H \leftarrow \sum_{i \in I} h_i$
for $k = 1$ ***to*** m **do**
  // enumerate missing value goto right
  $G_L \leftarrow 0,\ H_L \leftarrow 0$
  for j *in sorted*$(I_k,$ *ascent order by* $\mathbf{x}_{jk})$ **do**
    $G_L \leftarrow G_L + g_j,\ H_L \leftarrow H_L + h_j$
    $G_R \leftarrow G - G_L,\ H_R \leftarrow H - H_L$
    $score \leftarrow \max(score, \frac{G_L^2}{H_L+\lambda} + \frac{G_R^2}{H_R+\lambda} - \frac{G^2}{H+\lambda})$
  end
  // enumerate missing value goto left
  $G_R \leftarrow 0,\ H_R \leftarrow 0$
  for j *in sorted*$(I_k,$ *descent order by* $\mathbf{x}_{jk})$ **do**
    $G_R \leftarrow G_R + g_j,\ H_R \leftarrow H_R + h_j$
    $G_L \leftarrow G - G_R,\ H_L \leftarrow H - H_R$
    $score \leftarrow \max(score, \frac{G_L^2}{H_L+\lambda} + \frac{G_R^2}{H_R+\lambda} - \frac{G^2}{H+\lambda})$
  end
end
Output: Split and default directions with max gain

https://arxiv.org/pdf/1603.02754.pdf

Tùy chỉnh hàm mục tiêu

Chúng ta cần tính toán độ dốc (gradient) và ma trận Hessian của hàm mục tiêu (objective function).

$$\frac{1}{2}[log(pred + 1) - log(label + 1)]^2$$

https://www.kaggle.com/competitions/m5-forecasting-accuracy/discussion/140564

```python
import numpy as np
import xgboost as xgb
from typing import Tuple

def gradient(predt: np.ndarray, dtrain: xgb.DMatrix) -> np.ndarray:
    '''Compute the gradient squared log error.'''
    y = dtrain.get_label()
    return (np.log1p(predt) - np.log1p(y)) / (predt + 1)

def hessian(predt: np.ndarray, dtrain: xgb.DMatrix) -> np.ndarray:
    '''Compute the hessian for squared log error.'''
    y = dtrain.get_label()
    return ((-np.log1p(predt) + np.log1p(y) + 1) /
            np.power(predt + 1, 2))

def squared_log(predt: np.ndarray,
                dtrain: xgb.DMatrix) -> Tuple[np.ndarray, np.ndarray]:
    '''Squared Log Error objective. A simplified version for RMSLE used as
    objective function.
    '''
    predt[predt < -1] = -1 + 1e-6
    grad = gradient(predt, dtrain)
    hess = hessian(predt, dtrain)
    return grad, hess
```

```python
xgb.train({'tree_method': 'hist', 'seed': 1994},  # any other tree method is fine.
          dtrain=dtrain,
          num_boost_round=10,
          obj=squared_log)
```

https://xgboost.readthedocs.io/en/stable/tutorials/custom_metric_obj.html

Tùy chỉnh độ đo đánh giá

- Sau khi có một hàm mục tiêu mới, chúng ta có thể cần một độ đo tương ứng để theo dõi hiệu suất của mô hình của chúng ta.

```python
def rmsle(predt: np.ndarray, dtrain: xgb.DMatrix) -> Tuple[str, float]:
    ''' Root mean squared log error metric.'''
    y = dtrain.get_label()
    predt[predt < -1] = -1 + 1e-6
    elements = np.power(np.log1p(y) - np.log1p(predt), 2)
    return 'PyRMSLE', float(np.sqrt(np.sum(elements) / len(y)))
```

```python
xgb.train({'tree_method': 'hist', 'seed': 1994,
           'disable_default_eval_metric': 1},
          dtrain=dtrain,
          num_boost_round=10,
          obj=squared_log,
          feval=rmsle,
          evals=[(dtrain, 'dtrain'), (dtest, 'dtest')],
          evals_result=results)
```

Ưu điểm của XGBoost

Hiệu suất

Tạo ra các kết quả chất lượng cao trong các nhiệm vụ học máy đa dạng (ví dụ: Cuộc thi Kaggle).

Khả năng mở rộng

Được thiết kế để huấn luyện hiệu quả và có khả năng mở rộng của các mô hình học máy, làm cho nó phù hợp cho các tập dữ liệu lớn.

Khả năng tùy chỉnh

Sự đa dạng các siêu tham số có thể được điều chỉnh để tối ưu hiệu suất, làm cho XGBoost có tính tùy chỉnh cao

Giải quyết giá trị thiếu

Hỗ trợ tích hợp sẵn để xử lý giá trị thiếu, giúp làm việc với dữ liệu thực tế dễ dàng.

Nhược điểm của XGBoost

Độ phức tạp tính toán

Vẫn có thể mất thời gian và đòi hỏi tài nguyên tính toán đáng kể đối với các tập dữ liệu lớn hoặc các mô hình phức tạp.

Overfitting

Nếu không được điều chỉnh một cách thích hợp hoặc nếu dữ liệu có nhiễu, tập dữ liệu huấn luyện nhỏ nhưng sử dụng mô hình phức tạp có thể dẫn đến hiện tượng overfitting

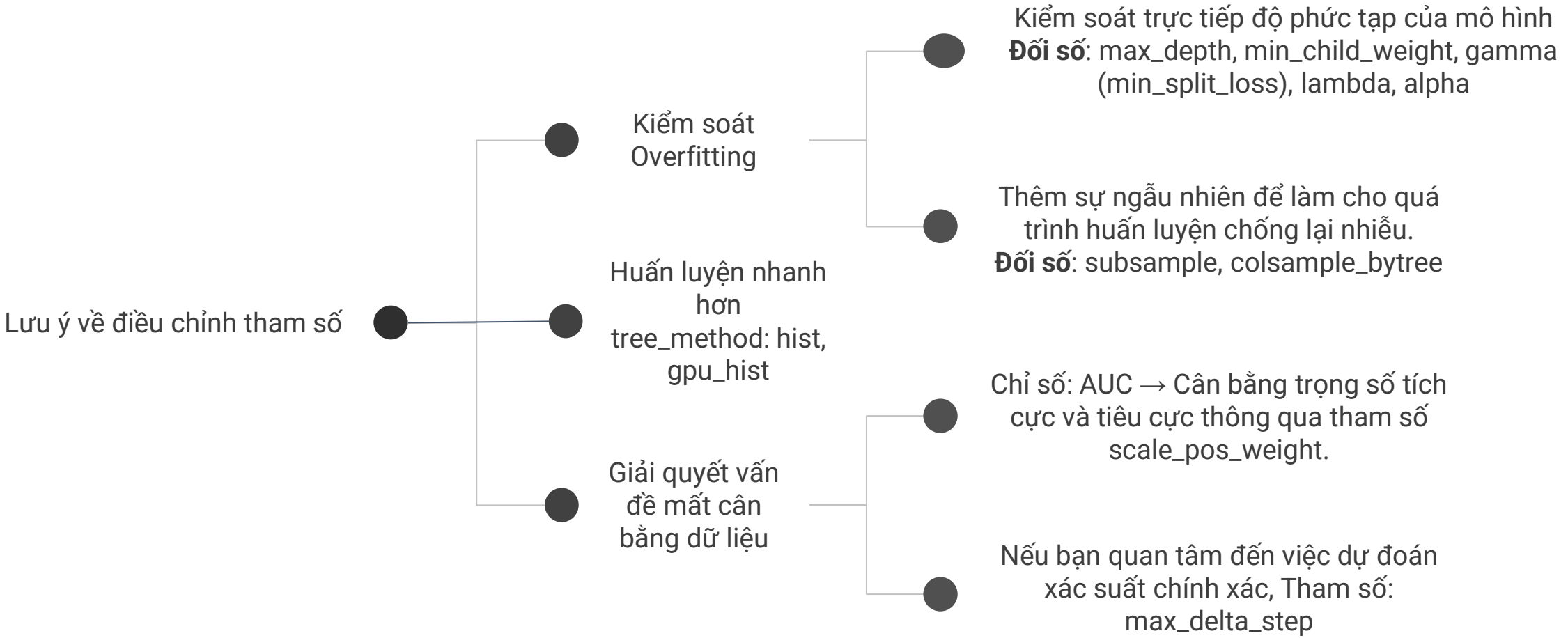
Tinh chỉnh siêu tham số

Yêu cầu hiểu biết tốt về các siêu tham số và việc điều chỉnh và tối ưu hóa cẩn thận.

Lack of Interpretability

Tương tự như nhiều phương pháp hợp tác khác, các dự đoán được thực hiện bởi XGBoost không dễ dàng có thể giải thích.

Lưu ý về điều chỉnh tham số



XGBoost: Tips for Hyperparameters Tuning

Tuning parameters – expert approach (xgboost)

Tuning parameters = experience + intuition + resources at hand

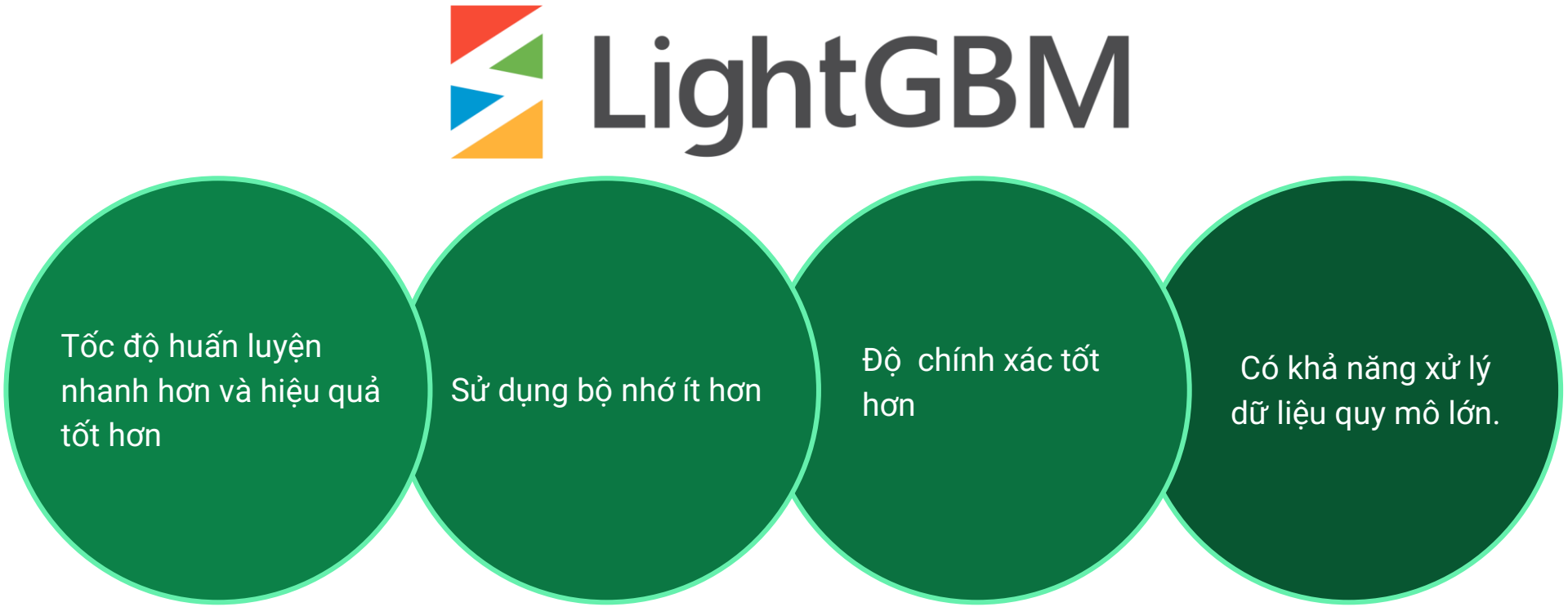
Typical routine:

1. Set learning rate (*eta*) parameter 0.1-0.2 (based on dataset size and available resources); all other parameters at default;
   personal experience: *eta* does not influence other parameter tuning!
2. Test maximum tree depth parameter, rule: 6-8-10-12-14; pick best performing on CV
3. Introduce regularization on leaf splits (alpha/lambda), rule: 2^k; **IF it helps on CV**, try to tune it as much as possible!
4. Tune min leaf node size (min_child_weight), rule: 1-0-5-10-20-50; **IF it helps on CV**, try to tune it as much as possible; **IF it does not help**, use value 0 (default = 1 is worse most of the times!); If 3-4 works – repeat step 2.
5. Tune randomness of each iteration (column/row sampling); Usually 0.7/0.7 is best and rarely needs to be tuned
6. Decrease *eta* to value which you are comfortable with your hardware; 0.025 is typically a good choice; lower values than 0.01 don't provide significant score uplift
7. If training time is reasonable, introduce bagging (num_parallel_trees) – how many models should be averaged in each training iteration; random forests + gradient boosting ☺ recommended value - up to 5.

https://www.slideshare.net/DariusBaruauskas/tips-and-tricks-to-win-kaggle-data-science-competitions

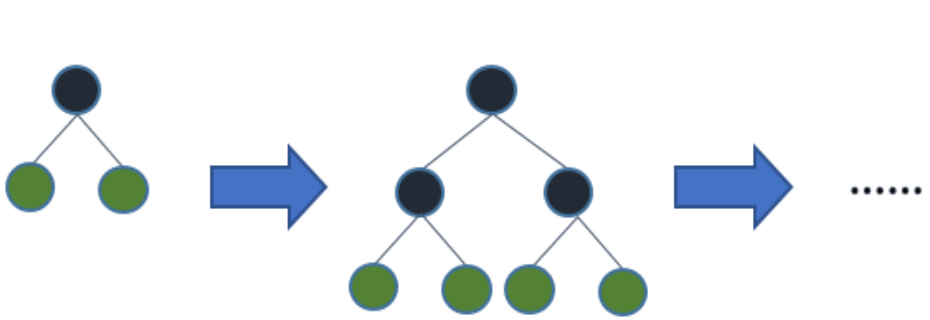
LightGBM

- Tương tự như XGBoost, LightGBM (do Microsoft phát triển) là một framework phân tán hiệu năng cao sử dụng cây quyết định cho nhiệm vụ xếp hạng, phân loại và hồi quy.
- Documentations

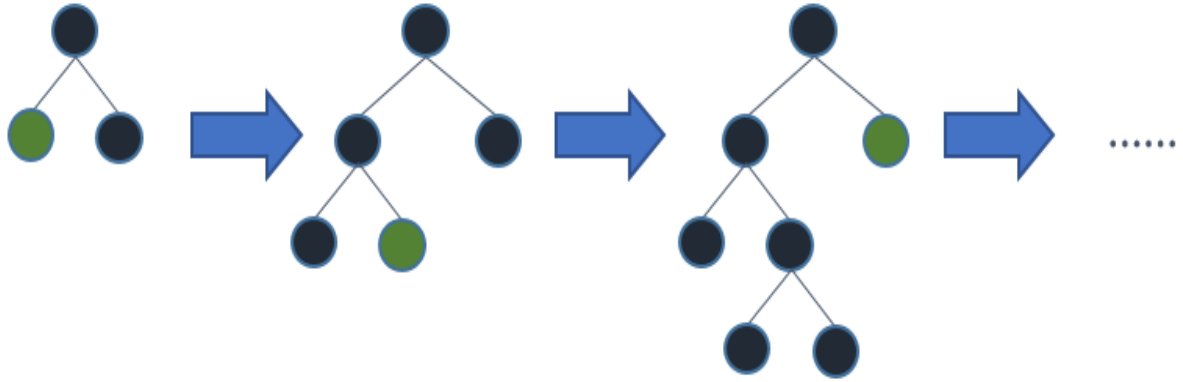


Leaf-wise (Best-first) Tree growth

- Nó sẽ chọn lá có độ lỗi delta tối đa để phát triển.
- Giữ nguyên số lá, thuật toán dựa trên lá thường đạt được tỷ lệ mất mát thấp hơn so với thuật toán dựa trên mức.
- Dựa trên lá có thể gây ra tình trạng overfiting khi tập dữ liệu nhỏ, vì vậy LightGBM bao gồm tham số max_depth để giới hạn độ sâu của cây.



Level-wise tree growth



Leaf-wise tree growth

Optimization in Speed and Memory usage

- Nhiều công cụ boosting sử dụng thuật toán dựa trên sắp xếp trước (ví dụ: thuật toán mặc định trong xgboost) để học cây quyết định
- LightGBM sử dụng thuật toán dựa trên biểu đồ histogram → nhóm các giá trị đặc trùng (thuộc tính) liên tục vào các thùng riêng biệt

Reduce cost of calculating the gain for each split

Histogram-based O(bins) > pre-sort based O(data)

Use histogram subtraction for further speedup

To get one leaf's histograms in a binary tree, use the histogram subtraction of its parent and its neighbor

Reduce memory usage

No need to store additional information for pre-sorting feature values
Use small data type to store data (int8: bins)

Phân chia tối ưu cho các đặc trưng hạng mục

- Không sử dụng mã hóa one-hot (không tối ưu cho các mô hình học cây)
- Sắp xếp các danh mục theo mục tiêu huấn luyện tại mỗi phân chia
- LightGBM sắp xếp biểu đồ (cho một đặc trưng hạng mục) dựa trên giá trị tích lũy của nó (sum_gradient / sum_hessian) và sau đó tìm điểm chia tốt nhất trên biểu đồ đã được sắp xếp.

Điều gì làm cho LightGBM nhanh?

- Reference
- **GOSS** (Gradient Based One Side Sampling)
  - Giữ lại các trường hợp có gradient lớn trong khi thực hiện lấy mẫu ngẫu nhiên trên các trường hợp có độ dốc nhỏ.
- **EFB** (Exclusive Feature Bundling)
  - Giảm số lượng đặc trưng bằng cách gom các đặc trưng lại với nhau.
  - Dữ liệu có nhiều đặc trưng mà chúng là đặc trưng độc quyền lẫn nhau, tức là chúng không bao giờ có giá trị bằng không cùng một lúc → gom chúng thành một đặc trưng duy nhất.

Lưu ý khi tinh chỉnh tham số

Tốc độ học và số lượng ước lượng

Tốc độ học thấp → thường mang lại kết quả tốt hơn nhưng yêu cầu nhiều tài nguyên tính toán hơn.

Kiểm soát độ phức tạp của các cây.

max_depth
num_leaves (<= 2^max_depth)

Ngăn chặn Overfitting

min_data_in_leaf
feature_fraction (~colsample_bytree)
bagging_fraction
regularization: lambda_l1, lambda_l2

Early Stopping

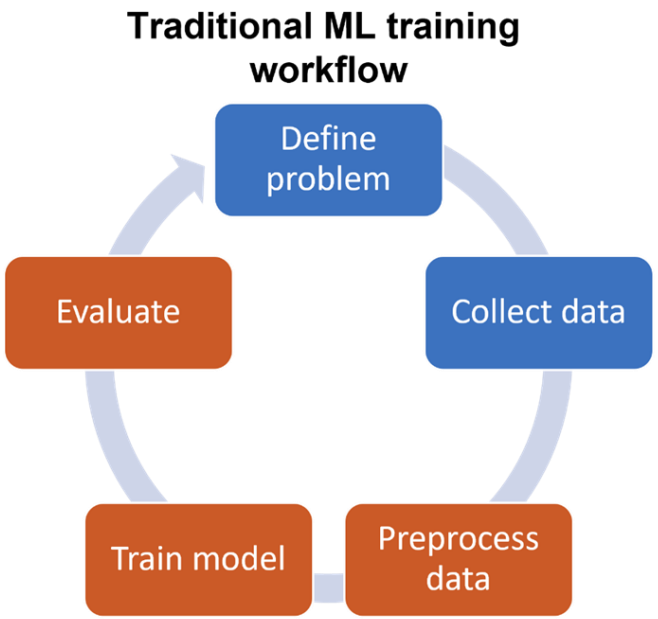
early_stopping_rounds: 50, 100

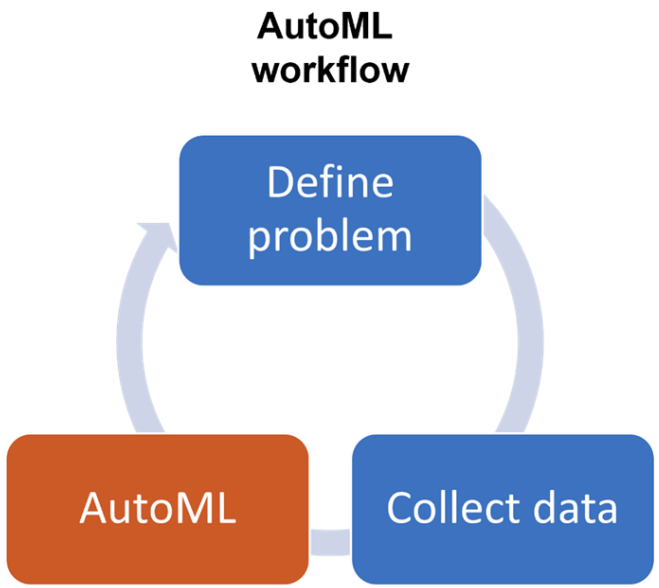
CatBoost

- Tự động xử lý các đặc trưng hạng mục.
- Cho phép Fast Gradient Boosting trên Cây quyết định bằng cách sử dụng GPU.
- Github
- Documentations

AutoML

- Quá trình tự động hóa toàn bộ quy trình áp dụng máy học cho các bài toán thực tế.
- AutoML Tools: H2O AutoML, PyCaret, AutoGluon, Auto-sklearn,..





Tại sao cần AutoML?

H2O AutoML

- Có thể sử dụng để tự động hóa luồng làm việc trong học máy, bao gồm việc tự động huấn luyện và điều chỉnh nhiều mô hình trong một thời gian được người dùng chỉ định.
- Đề xuất nhiều phương pháp giải thích mô hình - model explainability

H2O AutoML: Ví dụ

- Example notebook

Nhận diện biến dự đoán và biến phản hồi.

```
x = train.columns[:-1]
y = 'isFraud'
# For binary classification, response should be a factor
train[y] = train[y].asfactor()
```

Chạy AutoML cho 30 mô hình cơ sở.

```
aml = H2OAutoML(max_models=30, seed=55, max_runtime_secs=30000)
aml.train(x=x, y=y, training_frame=train)
```

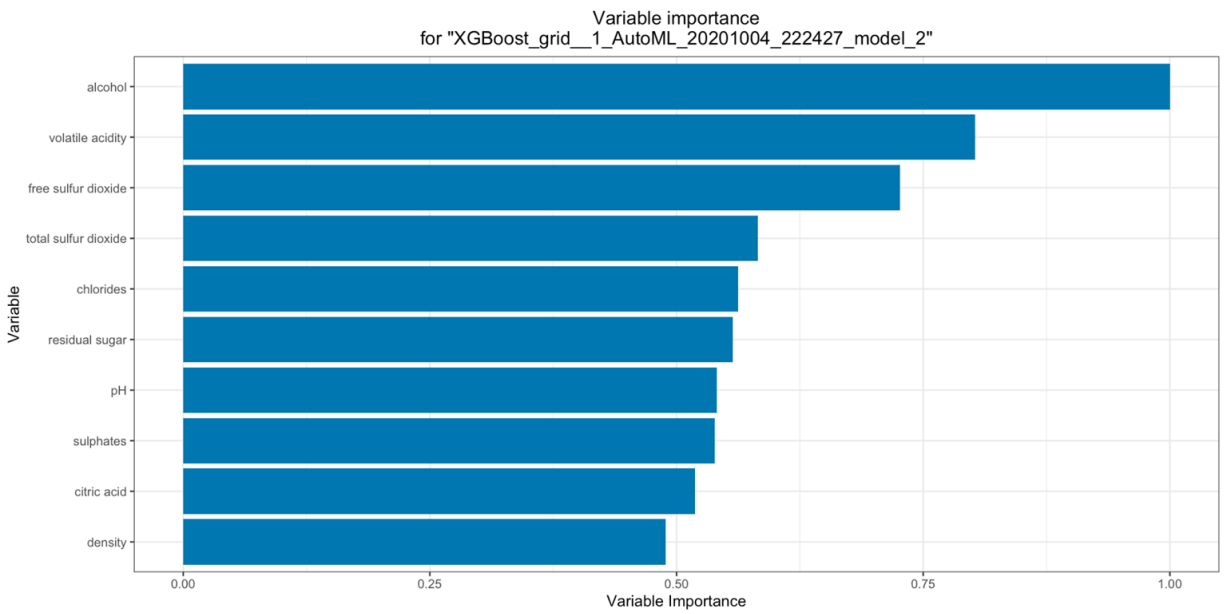
Xem bảng xếp hạng AutoML.

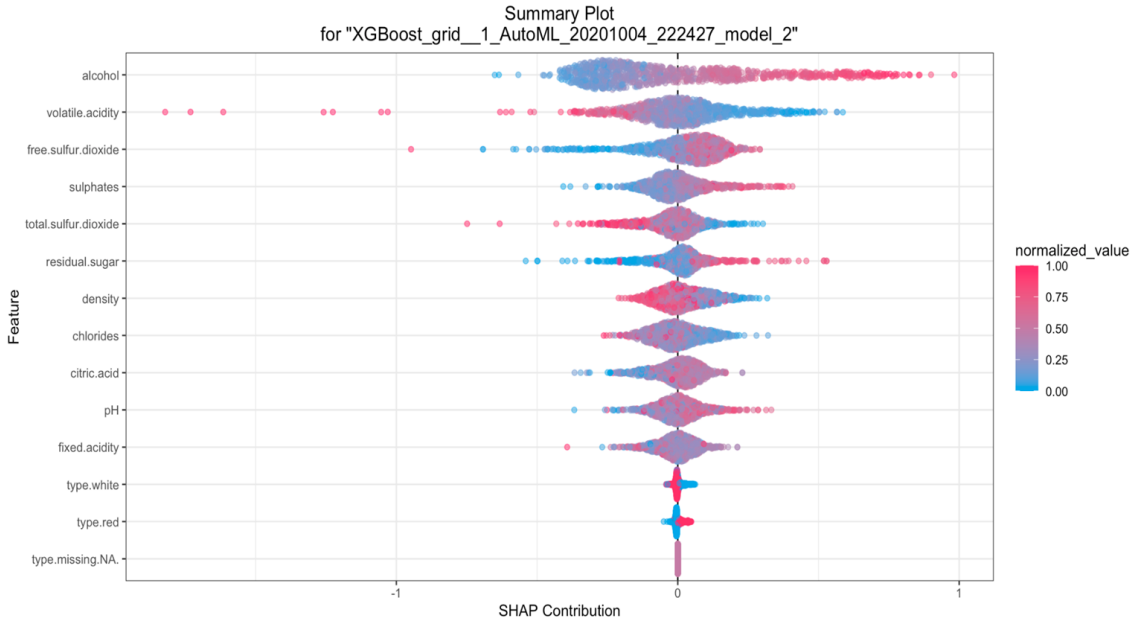
```
# View the AutoML Leaderboard
lb = aml.leaderboard
lb.head(rows=lb.nrows)  # Print all rows instead of default (10 rows)
```

model_id	auc	logloss	mean_per_class_error	rmse	mse
XGBoost_1_AutoML_20200722_023615	0.958309	0.0586498	0.168992	0.118115	0.0139513
StackedEnsemble_AllModels_AutoML_20200722_023615	0.957977	0.0649631	0.169127	0.118389	0.014016
StackedEnsemble_BestOfFamily_AutoML_20200722_023615	0.957977	0.0649631	0.169127	0.118389	0.014016
XGBoost_2_AutoML_20200722_023615	0.903715	0.110041	0.225731	0.144857	0.0209837

H2O AutoML: Giải thích mô hình

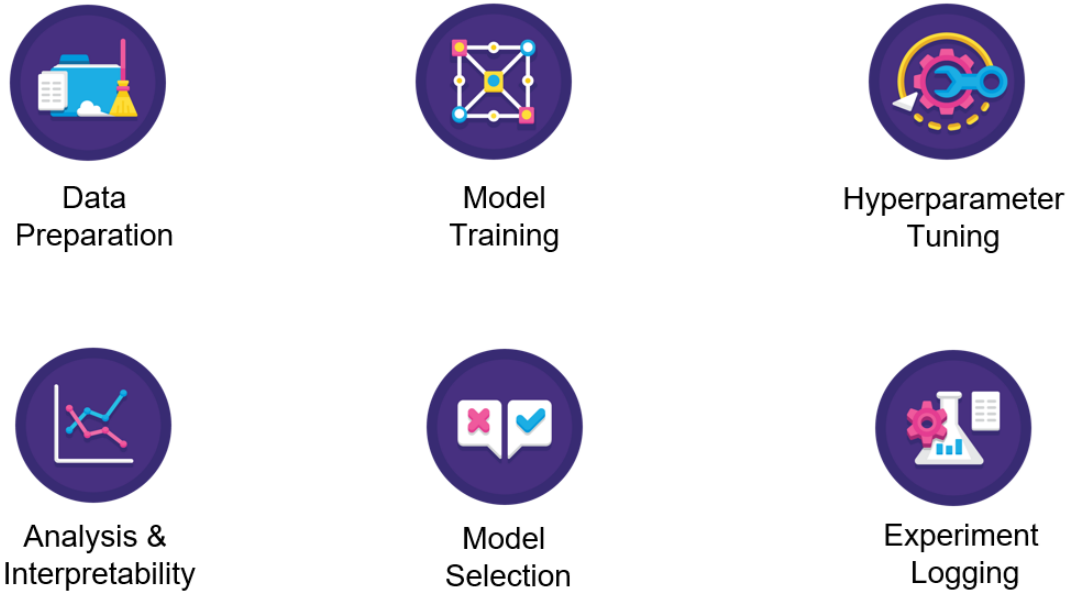
- Hỗ trợ giải thích mô hình đơn và nhiều mô hình





PyCaret AutoML

- PyCaret là thư viện máy học mã nguồn mở, thư viện máy học ngôn ngữ thấp Python cho phép tự động hóa quy trình máy học
- Github
- Documentations



PyCaret: Xử lý dữ liệu

- Details

Chuẩn bị dữ liệu	Quy mô và chuyển đổi	Thiết kế đặc trưng	Lựa chọn đặc trưng
Dữ liệu bị thiếu Categorical encoding: One-hot, Label encoder,.. Target imbalanced Remove outliers	Normalization Feature Transformation Target Transformation	Feature Interaction Group Aggregations Binning Feature Cluster Feature	Feature Selection Method: univariate, sequential,.. Remove Multicollinearity PCA Ignore Low Variance

PyCaret: Tính năng

- Details

Khởi tạo	Huấn luyện	Tối ưu	Phân tích	Triển khai
Tạo ra các pipeline biến đổi đến tất cả tham số đưa vào của hàm Đối số yêu cầu: data, target	Huấn luyện và đánh giá hiệu suất của tất cả các bộ ước lượng có sẵn trong thư viện mô hình bằng cách sử dụng kiểm tra chéo.C So sánh mô hình, tạo mô hình	Hàm này tinh chỉnh các siêu tham số của mô hình. Tinh chỉnh mô hình, tạo mô hình kết hợp và tối ưu hóa ngưỡng,...	Phân tích và giải thích mô hình Vẽ đồ thị mô hình, diễn giải mô hình, kiểm tra tính công bằng,...	Các chức năng triển khai như mô hình dự đoán, lưu mô hình, kiểm tra sự thay đổi dữ liệu, triển khai trên AWS, Azure, Tạo API, Docker

PyCaret: Ví dụ

- Notebook example
- Example github

- Normalization of the numerical features with Z-Score.
- Feature Selection with permutation importance techniques.
- Outliers Removal.
- Features Removal based on Multicollinearity.
- Features Scalling Transformation.
- Ignore low variance on Features.
- PCA for Dimensionality Reduction, as the dataset has many features.
- Numeric binning on the features `MonthlyCharges` and `TotalCharges`.
- 70% of samples for Train and 30% for test.
- Fix Imbalance with SMOTE.

```
exp01 = setup(data=data, target="Churn", session_id=RANDOM_SEED, ignore_features=["customerID"],
              numeric_features=["SeniorCitizen"], normalize=True,
              feature_selection=True, remove_outliers=True,
              remove_multicollinearity=True, fix_imbalance=True,
              transformation=True, ignore_low_variance=True, pca=True,
              bin_numeric_features=["MonthlyCharges", "TotalCharges"],
              silent=True, experiment_name="customer-churn-prediction",
              log_experiment=True)
```

PyCaret: Ví dụ

- So sánh các mô hình, điều chỉnh siêu tham số, mô hình tập hợp (bagging, boosting, blending)
- Example github

```
top_model = compare_models(fold=K_FOLDS,
                           sort="F1",
                           n_select=1,
                           blacklist=["gbc", "catboost"])
```

	Model	Accuracy	AUC	Recall	Prec.	F1	Kappa	MCC	TT (Sec)
0	Logistic Regression	0.7516	0.8373	0.7777	0.5349	0.6336	0.4553	0.4739	0.0468
1	Ridge Classifier	0.7416	0.0000	0.7897	0.5216	0.6279	0.4424	0.4653	0.0136
2	Linear Discriminant Analysis	0.7414	0.8358	0.7897	0.5213	0.6277	0.4421	0.4650	0.0485
3	SVM - Linear Kernel	0.7419	0.0000	0.7356	0.5253	0.6115	0.4267	0.4417	0.0532
4	Ada Boost Classifier	0.7464	0.8042	0.7004	0.5313	0.6040	0.4226	0.4316	1.3652

```
tuned_model = tune_model(estimator=top_model, fold=K_FOLDS,
                         optimize="F1", choose_better=True,
                         verbose=False)
```

```
bagged_model = ensemble_model(tuned_model, fold=K_FOLDS)
```

```
boosted_model = ensemble_model(tuned_model, fold=K_FOLDS,
                               method="Boosting")
```

```
blended_model = blend_models(estimator_list=[tuned_model, boosted_model],
                             fold=K_FOLDS)
```

AutoGluon AutoML

- Auto ML cho hình ảnh, văn bản, chuỗi thời gian và dữ liệu dạng bảng
- Documentations
- https://github.com/autogluon/autogluon

AutoGluon: Tính năng

- Details

Thiết kế đặc trưng tùy chỉnh

Giá trị bị mất
Mã hóa phân loại: One-hot, Mã hóa nhãn,..
Mục tiêu mất cân bằng
Xóa các ngoại lệ

Điều chỉnh siêu tham số

Chuẩn hóa
Chuyển đổi đặc trưng
Chuyển đổi mục tiêu

Kết hợp mô hình

Bagging
Stacking
Weighted Ensemble

Khác

Khả năng giải thích (độ quan trọng của đặc trưng)
Tăng tốc suy luận
Chưng cất mẫu
Hỗ trợ đa dữ liệu: tabular+image+text

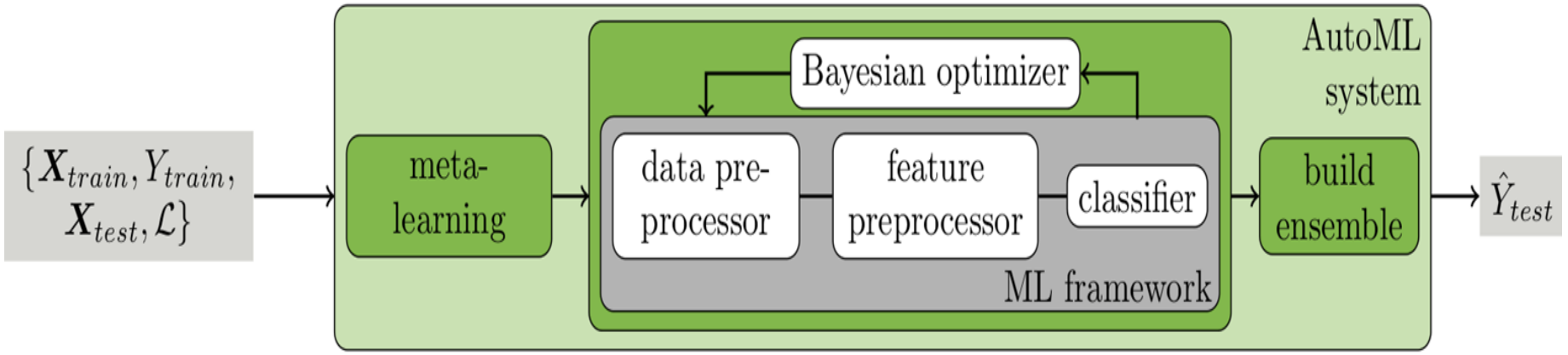
AutoGluon: Ví dụ

- Example notebook

```
# Fit end-to-end with raw data in under 1 hour, with one line of code
predictor = TabularPredictor(
    label=label,
    eval_metric='log_loss',
    learner_kwargs={'ignored_columns': ['id']}
).fit(
    train_data,
    presets='best_quality',
    hyperparameters={
        KNNRapidsModel: {},
        LinearRapidsModel: {},
        'RF': {},
        'XGB': {'ag_args_fit': {'num_gpus': 1}},
        'CAT': {'ag_args_fit': {'num_gpus': 1}},
        'GBM': [{}, {'extra_trees': True, 'ag_args': {'name_suffix': 'XT'}}, 'GBMLarge'],
        'NN': {'ag_args_fit': {'num_gpus': 1}},
        'FASTAI': {'ag_args_fit': {'num_gpus': 1}},
    },
)
```

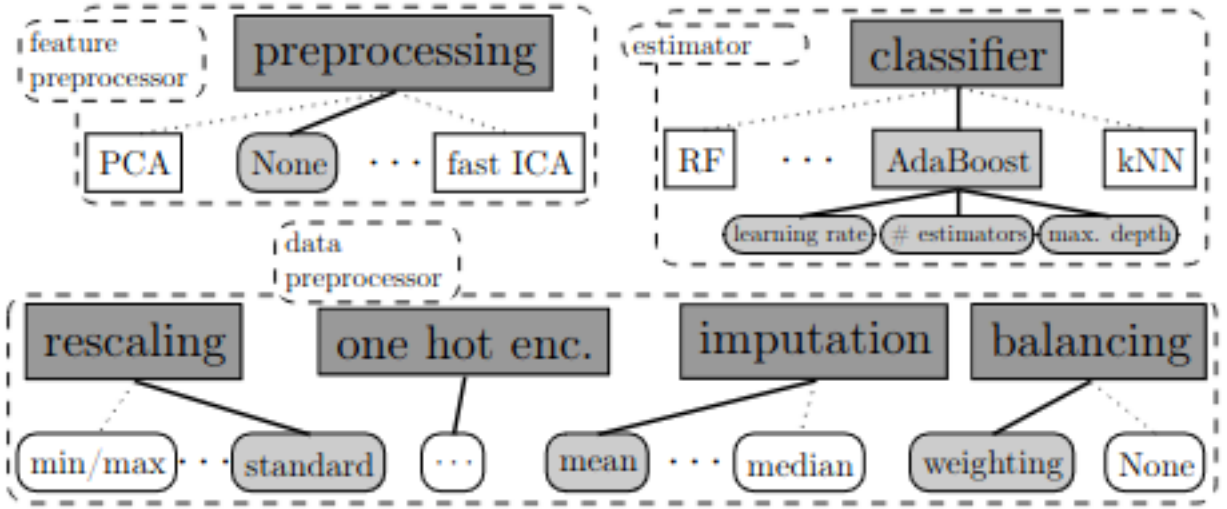
Auto-sklearn

- Bộ công cụ máy học tự động và một công cụ thay thế sẵn có cho công cụ ước tính scikit-learn.
- github



https://github.com/automl/auto-sklearn

Auto-sklearn: Làm sao sử dụng?




```
import autosklearn.classification
cls = autosklearn.classification.AutoSklearnClassifier()
cls.fit(X_train, y_train)
predictions = cls.predict(X_test)
```

Tài liệu tham khảo

- https://web.stanford.edu/class/stats202/intro.html
- https://towardsdatascience.com/what-makes-lightgbm-lightning-fast-a27cf0d9785e
- http://arogozhnikov.github.io/2016/06/24/gradient_boosting_explained.html
- https://aman.ai/cs229/ensemble-methods/
- https://web.stanford.edu/class/stats202/notes/Tree/Boosting.html
- https://www.geeksforgeeks.org/xgboost/
- https://neptune.ai/blog/xgboost-vs-lightgbm
- Cheat Sheet: https://drive.google.com/drive/folders/1IGiethDMHashf9Gsfx3sPTsJOnl15Zvx

HỎI ĐÁP