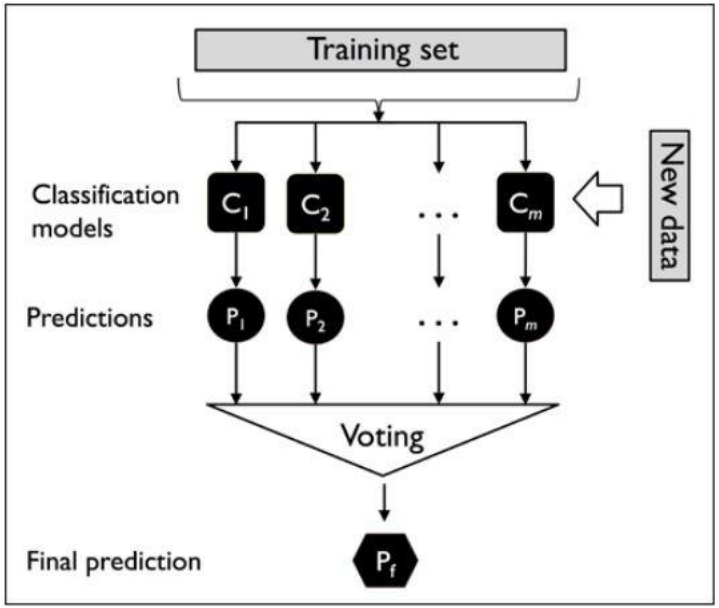
Ensambles:
Bagging -
Boosting -
XGBoost -
Stacking

Ensambles

- Entrenar muchos modelos y hacerlos votar.La clasificación resultante es la que reciba más votos.



Aún mejor, si los modelos devuelven scores, se puede hacer una votación ponderada.

Ensambles

Si todos los modelos son muy parecidos, no van a agregar mucha información nueva en la votación.

Necesitamos modelos diferentes entre sí, poco correlacionados.
Los modelos pueden ser diferentes entre sí por una variedad de razones:

- Puede haber diferencia en la población de datos
- Puede haber una técnica de modelado utilizada diferente
- Puede haber una hipótesis diferente

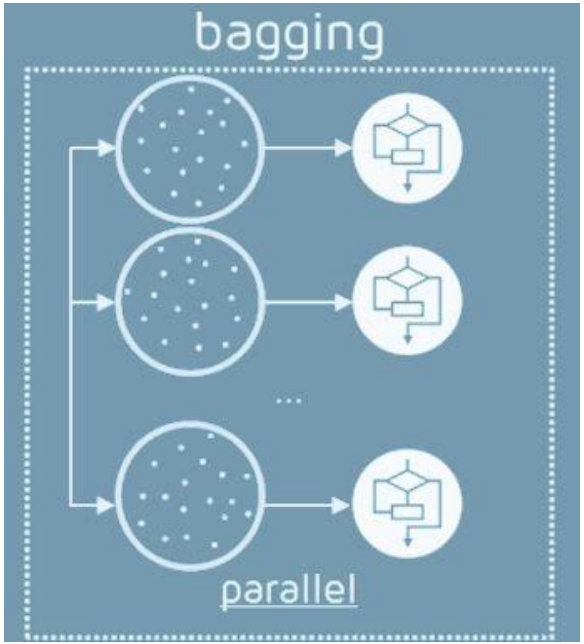
Bagging o Bootstrap Aggregation

El Bagging es una de las técnicas de construcción de conjuntos que también se conoce como Agregación Bootstrap.

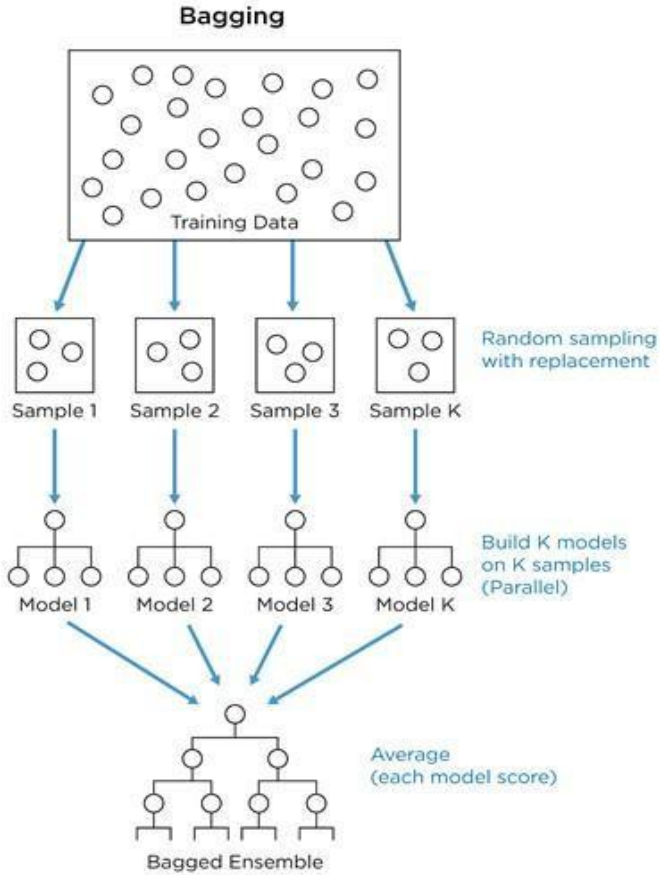
- Implementa predictores similares en poblaciones de muestras pequeñas y luego vota entre todas las predicciones.
- Combina Bootstrapping (muestreo de datos con reemplazo) y Aggregation (votación) para formar un modelo de ensamble.
- Reduce el error de varianza y ayuda a evitar el sobreajuste.

Bagging o Bootstrap Aggregation

- Dada una muestra de datos, se extraen varias muestras, *bootstrapped*
- Esta selección se realiza de manera aleatoria.
- Una vez que forman las muestras *bootstrapped*, se entrenan los modelos de manera separada. En general, estos modelos serán modelos con mucha varianza.
- La predicción de salida final se combina en las proyecciones de todos los submodelos.



Bagging o Bootstrap Aggregation



Bagging o Bootstrap Aggregation

Ésta técnica se puede usar con cualquier tipo de modelo: Árboles, KNN, SVM, etc.

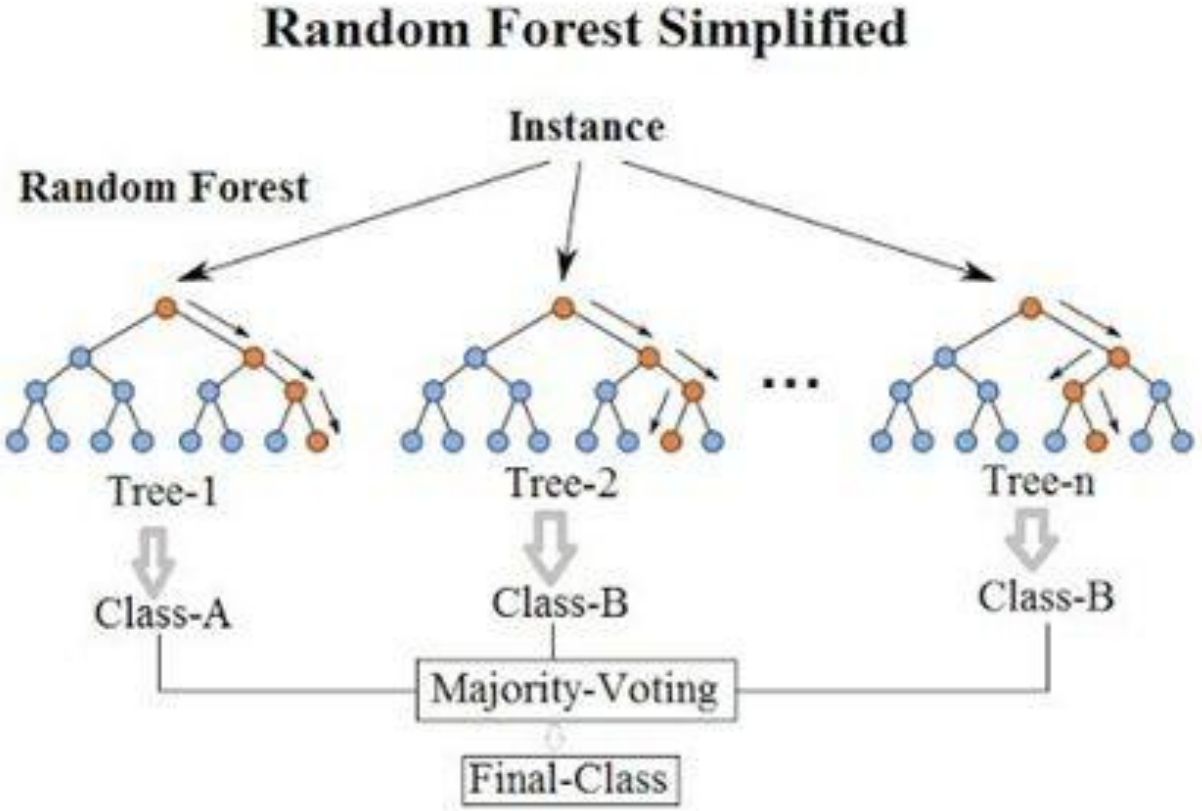
Pero lo más común es que se aplique en árboles, para crear bosques.

Random Forest

¿Cómo surge Random Forest?

Uno de los problemas que aparecía con la creación de un árbol de decisión es que si le damos la profundidad suficiente, el árbol tiende a "memorizar" las soluciones en vez de generalizar el aprendizaje (*overfitting*).

La solución para evitar esto es la de crear muchos árboles y que trabajen en conjunto.


Random Forest Simplified
Instance
Random Forest
Tree-1
Tree-2
Tree-n
Class-A
Class-B
Class-B
Majority-Voting
Final-Class

Random Forest

Problema: si pocos atributos (features) son predictores fuertes, todos los árboles se van a parecer entre sí. Esos atributos terminarán cerca de la raíz para todos los conjuntos generados con bootstrap.

Random Forest

Problema: si pocos atributos (features) son predictores fuertes, todos los árboles se van a parecer entre sí. Esos atributos terminarán cerca de la raíz para todos los conjuntos generados con bootstrap.

Random Forest es igual a bagging, pero en cada nodo, hay que considerar sólo un subconjunto de *m* atributos elegidos al azar (random feature selection)

¿Cómo funciona Random Forest?

- Se seleccionan ***k*** **features de las** ***m*** **totales** (siendo *k* menor a *m*) y se crea un árbol de decisión con esas *k* features.
- Se crean ***n*** **árboles** variando siempre la cantidad de ***k*** **features**
- Se guarda el resultado de cada árbol obteniendo ***n*** **salidas.**
- Se calculan los votos obtenidos para cada “clase” seleccionada y se considera a la más votada como la clasificación final de nuestro “bosque”.

Random Forest · Ventajas

1. Bastante robusto frente a outliers y ruido

2. Provee buenos estimadores de error (oob_score) e importancia de variables

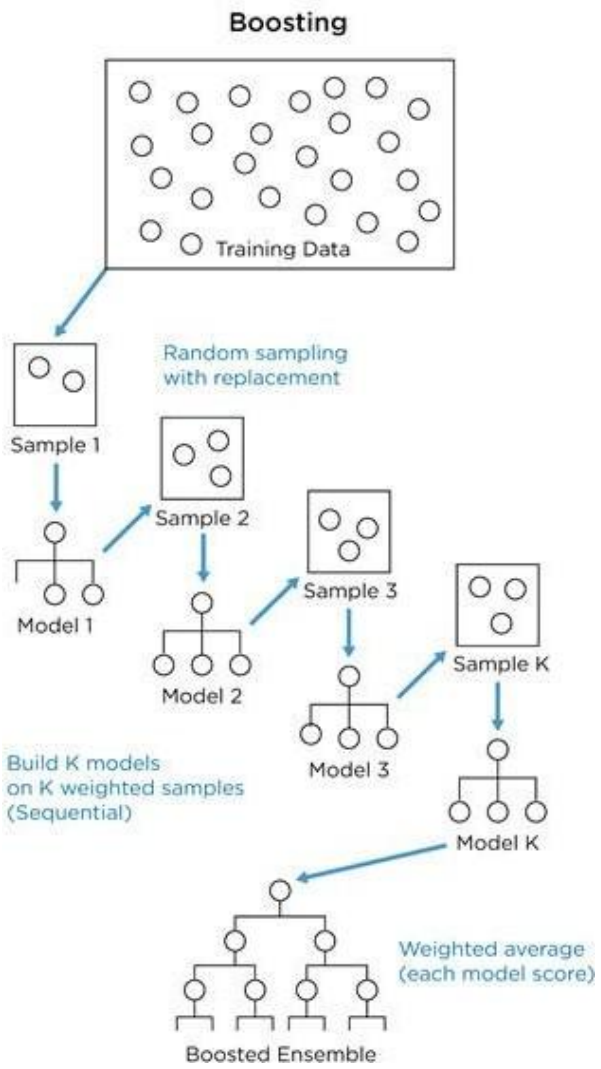
3. Si bien entrenar muchos árboles puede llevar mucho tiempo, es fácilmente paralelizable.

Ensambles: Boosting

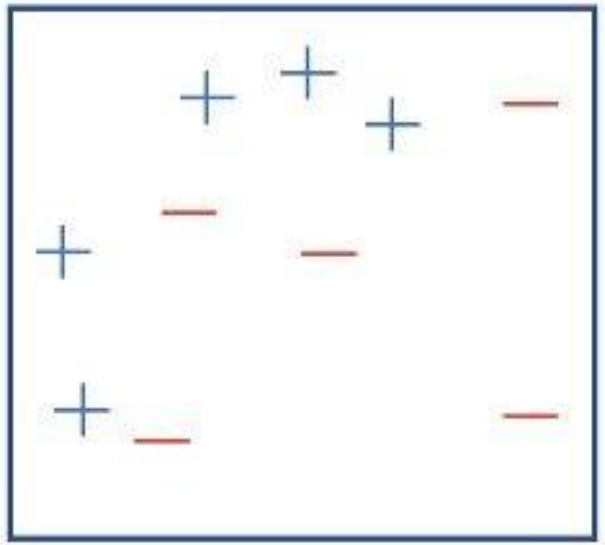
Ensambles · Boosting

Se entrena una secuencia de modelos donde se da más peso a los ejemplos que fueron clasificados erróneamente por iteraciones anteriores.

Al igual que con bagging, las tareas de clasificación se resuelven con una mayoría ponderada de votos, y las tareas de regresión se resuelven con una suma ponderada para producir la predicción final.

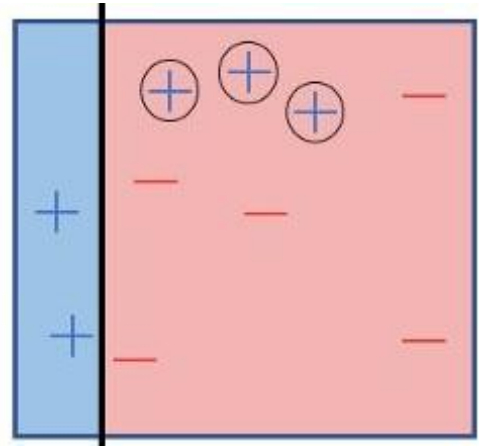


BOOSTING: AdaBoost (1 / 5)



Para explicar un poco el funcionamiento de **AdaBoost** consideremos el siguiente problema de clasificación binaria con 10 ejemplos de entrenamiento, **5 positivos y 5 negativos.**

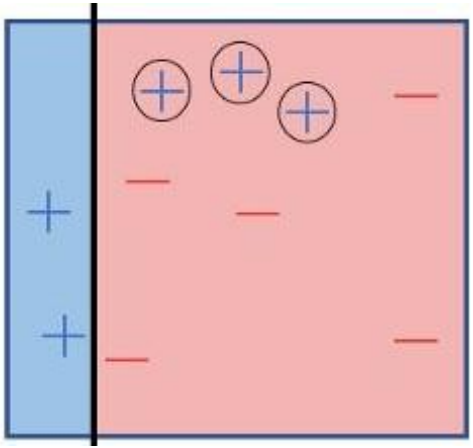
BOOSTING: AdaBoost (2 / 5)



A la izquierda el primer clasificador débil, una recta vertical. A la derecha de la recta, consideramos que todos los ejemplos son negativos, mientras que a la izquierda son positivos.

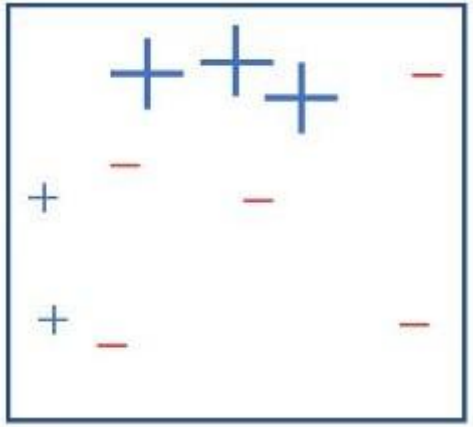
La recta clasifica mal a tres positivos.

BOOSTING: AdaBoost (2 / 5)



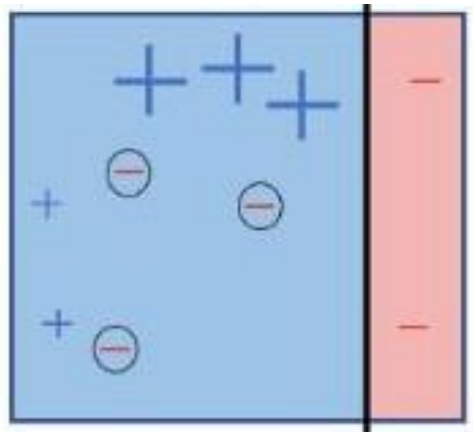
A la izquierda el primer clasificador débil, una recta vertical. A la derecha de la recta, consideramos que todos los ejemplos son negativos, mientras que a la izquierda son positivos.

La recta clasifica mal a tres positivos.

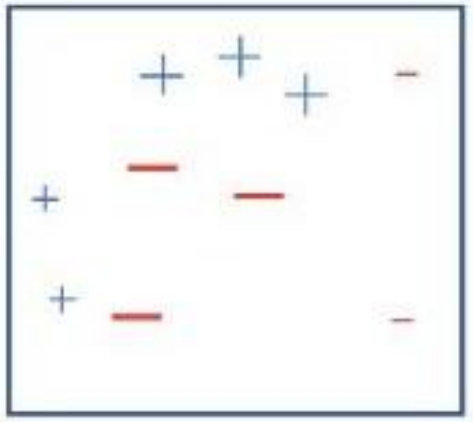


Aquí vemos como los tres ejemplos mal clasificados aparecen ahora de un mayor tamaño que el resto de los ejemplos.
Esto simboliza que dichos ejemplos tendrán una mayor importancia al momento de seleccionar el clasificador débil de la segunda iteración.

BOOSTING: AdaBoost (3 / 5)

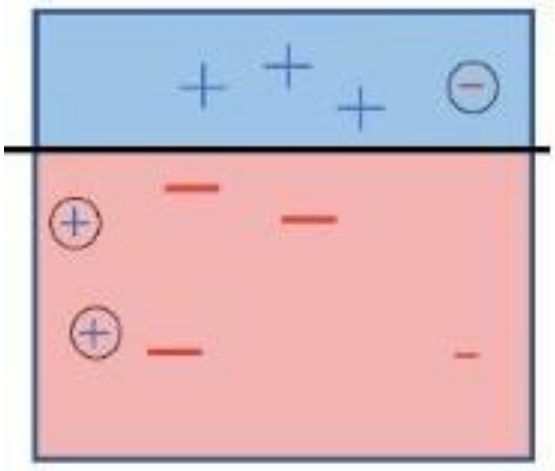


Aquí vemos al segundo clasificador débil, que es otra recta vertical colocada más hacia la derecha.
Este segundo clasificador se equivoca también en tres ejemplos,
ya que clasifica mal ejemplos negativos.



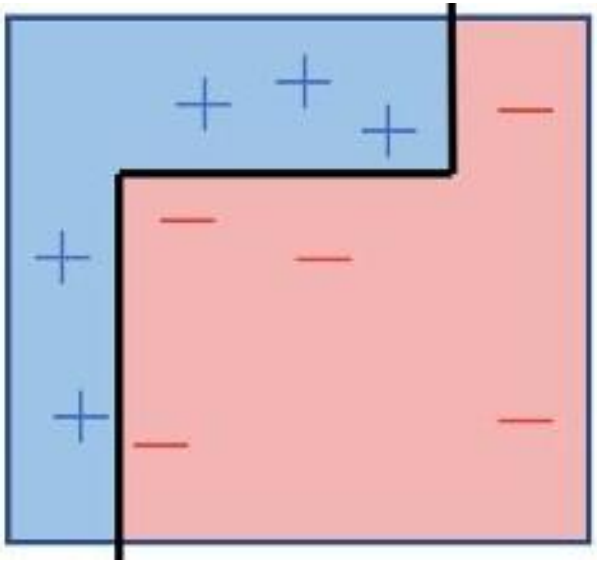
Aquí vemos que para la tercera iteración los ejemplos negativos mal clasificados tienen ahora el mayor tamaño, es decir, tendrán mayor importancia en la siguiente iteración.

BOOSTING: AdaBoost (4 / 5)



En la tercera iteración el clasificador débil resultante es una recta horizontal, como se puede observar en el cuadro de la derecha.
Este clasificador se equivoca en la clasificación de un ejemplo negativo y dos positivos, que de igual forma aparecen encerrados en un círculo.

BOOSTING: AdaBoost (5 / 5)



Finalmente, se ilustra el clasificador fuerte que resulta de crear un ensamble con tres clasificadores débiles. La forma en que utilizamos estos tres clasificadores débiles es mediante una decisión por mayoría.

Cuando deseamos clasificar un nuevo ejemplo, le preguntamos a cada uno de nuestros tres clasificadores débiles su opinión. Si la mayoría opina que el nuevo ejemplo es positivo, pues entonces la decisión del clasificador fuerte será que es un ejemplo positivo.

Adaboost con

The following example shows how to fit an AdaBoost classifier with 100 weak learners:

```
>>> from sklearn.model_selection import cross_val_score
>>> from sklearn.datasets import load_iris
>>> from sklearn.ensemble import AdaBoostClassifier

>>> iris = load_iris()
>>> clf = AdaBoostClassifier(n_estimators=100)
>>> scores = cross_val_score(clf, iris.data, iris.target, cv=5)
>>> scores.mean()
0.9...
```

The number of weak learners is controlled by the parameter `n_estimators`. The `learning_rate` parameter controls the contribution of the weak learners in the final combination. By default, weak learners are decision stumps. Different weak learners can be specified through the `base_estimator` parameter. The main parameters to tune to obtain good results are `n_estimators` and the complexity of the base estimators (e.g., its depth `max_depth` or minimum required number of samples to consider a split `min_samples_split`).

Ensambles:
Boosting XG Boost
(Extreme Gradient Boosting)

- XGBoost es un algoritmo que recientemente ha dominado el aprendizaje automático y sobre todo las competiciones de Kaggle (para datos estructurados).
- XGBoost es una implementación de árboles de decisión potenciados por el algoritmo de descenso por gradiente, diseñado para aumentar la velocidad y mejorar el rendimiento.
- XGBoost es una librería de software que se puede descargar e instalar y luego acceder desde una variedad de interfaces: CLI, C++, Python, R, Julia, etc.
- No sólo tiene buena performance computacional, también posee un muy buen desempeño con el manejo de los datos.

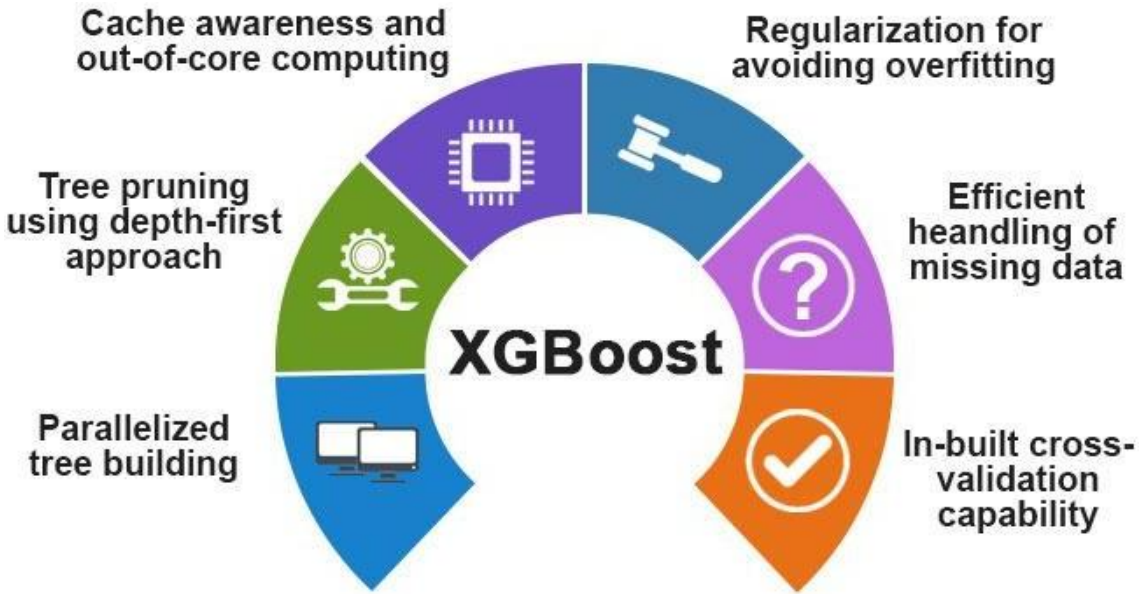
- XGBoost es un algoritmo que recientemente ha dominado el aprendizaje automático y sobre todo las competiciones de Kaggle (para datos estructurados).
- XGBoost es una implementación de árboles de decisión potenciados por el algoritmo de descenso por gradiente, diseñado para aumentar la velocidad y mejorar el rendimiento.
- XGBoost es una librería de software que se puede descargar e instalar y luego acceder desde una variedad de interfaces: CLI, C++, Python, R, Julia, etc.
- No sólo tiene buena performance computacional, también posee un muy buen desempeño con el manejo de los datos.

Se puede usar con Python, **como si fuera un modelo de Scikit-Learn.**

Características principales

- **Paralelización** de la construcción de árboles utilizando todos los núcleos de la CPU durante el entrenamiento.
- **Computación distribuida** para el entrenamiento de modelos muy grandes utilizando clusters de máquinas.
- **Computación "fuera de núcleo"** para conjuntos de datos muy grandes que no caben en la memoria.
- **Optimización de caché** de estructuras de datos y algoritmos para aprovechar al máximo el hardware.

Características principales



XG Boost en Python

Instalación: sudo pip install xgboost

Ejemplos: https://github.com/tqchen/xgboost/tree/master/demo/guide-python

```
diabetes = load_diabetes()

X = diabetes.data
y = diabetes.target

xgb_model = xgb.XGBRegressor(objective="reg:linear", random_state=42)

xgb_model.fit(X, y)

y_pred = xgb_model.predict(X)
```

¿Qué es mejor, Bagging o Boosting?

Depende

.

Bagging vs. Boosting

- Modelos entrenados de manera independiente.
- Resuelve promediando los N modelos.
- Enfocado en reducir la varianza. Ayuda a prevenir overfitting.
- Se suele usar con modelos de bajo Sesgo y alta varianza.
- Fácilmente paralelizable.

- Bastante Modelos entrenados enfocados en mejorar las fallas de los anteriores.
- Promedio pesado de los N modelos (su peso depende de su performance).
- Enfocado en reducir el Sesgo. En casos puede causar overfitting.
- Se suele usar con modelos de baja varianza y alto sesgo.
- No se puede paralelizar fácilmente.

Un último ensamble: STACKING.

Stacking

Se crea una función de ensamble que combina los resultados de varios modelos base, en uno sólo.

Los modelos de nivel de base se entrenan con un conjunto de datos completo, y luego sus salidas se utilizan como características de entrada para entrenar una función de ensamble.

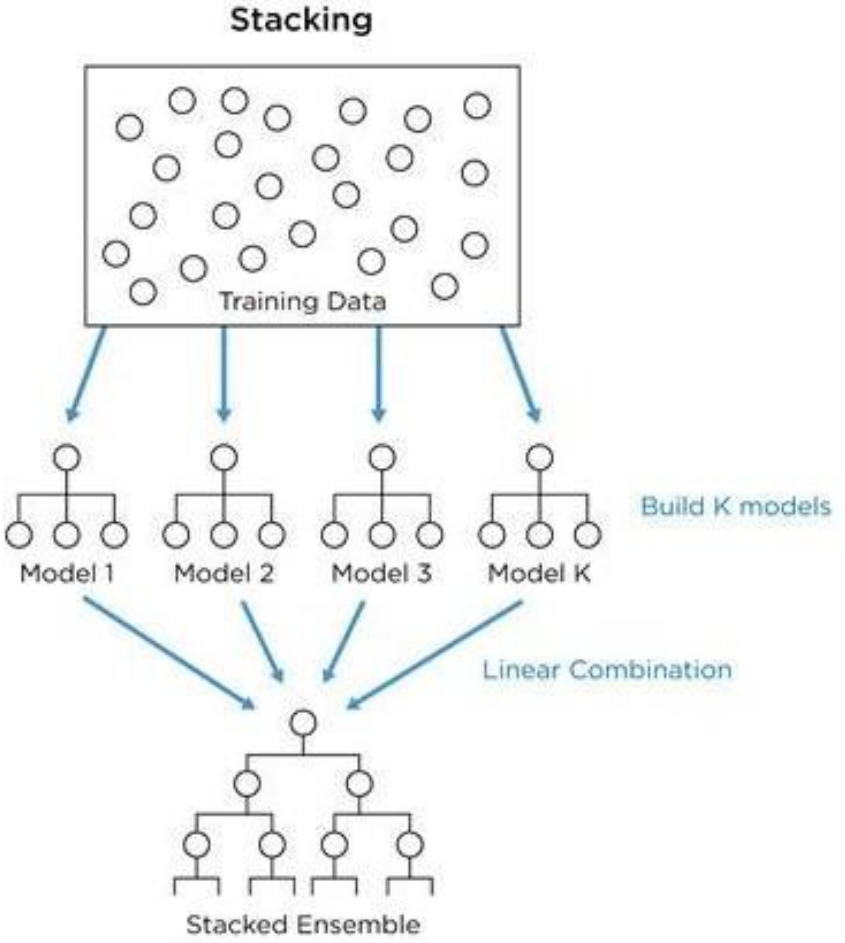
Normalmente, la función de ensamble es una simple combinación lineal de las puntuaciones del modelo base.

Stacking

Se crea una función de ensamble que combina los resultados de varios modelos base, en uno sólo.

Los modelos de nivel de base se entrenan con un conjunto de datos completo, y luego sus salidas se utilizan como características de entrada para entrenar una función de ensamble.

Normalmente, la función de ensamble es una simple combinación lineal de las puntuaciones del modelo base.



Recursos

Recursos:

- Ensemble methods: bagging, boosting and stacking: Excelente artículo (nivel intermedio/avanzado). https://towardsdatascience.com/ensemble-methods-bagging-boosting-and-stacking-c9214a10a205
- Understanding Random Forest: Explicación (nivel básico) y ejemplo. https://towardsdatascience.com/understanding-random-forest-58381e0602d2
- Ensamble de clasificadores usando AdaBoost: Explicación (nivel básico). https://medium.com/soldai/ensamble-de-clasificadores-usando-adaboost-50bc2ca47640
- A Gentle Introduction to XGBoost for Applied Machine Learning: Introducción con referencias a material extra (nivel básico/intermedio). https://machinelearningmastery.com/gentle-introduction-xgboost-applied-machine-learning/