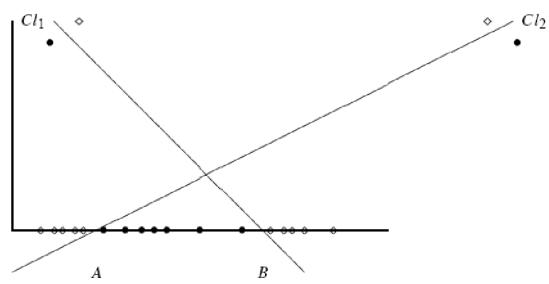
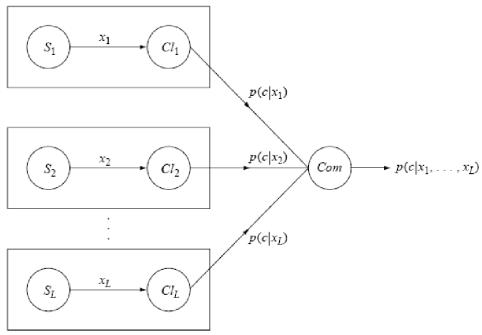
- Teorema No free lunch (Wolpert y MacReady, 1996):
  - No hay un algoritmo de aprendizaje que en cualquier dominio siempre induzca el clasificador más preciso
- Optar por una combinación de opiniones de expertos (modelos) antes de tomar una decisión final
- Cada paradigma tiene asociado una región de decisión de un determinado tipo
- Al combinar paradigmas tratar de obtener la región de decisión idónea para el problema

• Ejemplo:



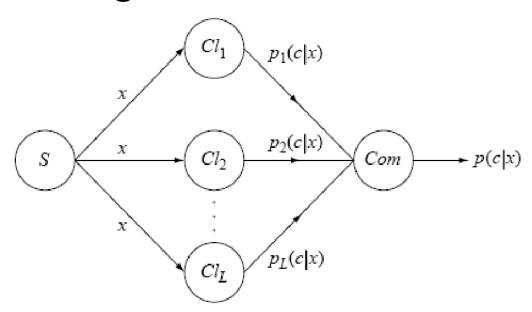
- Datos con fronteras complejas de decisión
- Ambos clasificadores (Cl<sub>1</sub> y Cl<sub>2</sub>) cometen fallos en la clasificación
  - CI<sub>1</sub>: "•" a la izquierda; "o" a la derecha
  - Cl<sub>2</sub>: "•" abajo; "o" arriba
- Las muestras mal clasificadas son distintas en cada uno
  - Dan información complementaria: al combinarlos son útiles
- Se pueden combinar con la regla:
  - "•" si tanto Cl₁ como Cl₂ predicen "•"; "o" en otro caso

Espacios de diferentes características:



- Com es la regla de combinación
  - Es, a su vez, un clasificador que combina las probabilidades para estimar  $p(c|x_1,...,x_L)$
- ¿Cuál es la mejor regla de combinación?

Espacios de iguales características:



- Clasificadores pueden ser de distinto tipo
- O del mismo tipo pero entrenados con distintas muestras: aleatorias (bagging), etc.
- Del mismo tipo pero con parámetros distintos

- Se pueden combinar:
  - Clasificadores distintos
  - Del mismo tipo, pero
    - Con distintos parámetros
    - Entrenados con distintas muestras
    - O entrenados distintas veces (si no determinísticos)
- Importante:
  - Precisión de cada uno:
    - Tasa de error de cada uno menor que el azar
  - Diversidad de cada uno:
    - Cometen errores distintos al predecir una clase
    - Si todos producen salidas idénticas, no se gana al combinarlos

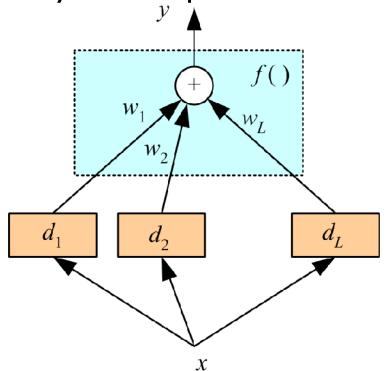
- Que cada clasificador sea razonablemente preciso
  - Pero no muy preciso individualmente (no hay que optimizarlo por separado para que optimice su comportamiento)
- Se escogen por su simplicidad
- Cada uno sea preciso en instancias diferentes, especializándose en subdominios del problema
- Al combinarlos disminuye el error esperado porque disminuye su componente de la varianza (debida al conjunto de entrenamiento particular con que se construyó el modelo, que puede no ser totalmente representativa de la población)

- Métodos básicos
  - Fusión de etiquetas
  - Fusión de salidas continuas
  - Stacking
  - Cascada
- Métodos avanzados:
  - Bagging
  - Aleatorización
  - Boosting
  - Híbridos

- Métodos básicos
  - Fusión de etiquetas
    - Voto por mayoría
    - Mayoría absoluta
    - Voto por mayoría con umbral
    - Voto por mayoría con peso
  - Fusión de salidas continuas
  - Stacking
  - Cascada
- Métodos avanzados:
  - Bagging
  - Aleatorización
  - Boosting
  - Híbridos

- Métodos básicos: Fusión de etiquetas:
  - Dados varios clasificadores, que clasifican la instancia x en distintas clases...
    - Voto por mayoría
      - Se asigna la clase más con más votos
    - Mayoría absoluta
      - · La clase debe conseguir al menos la mitad de los votos más uno
    - Voto por mayoría con umbral
      - La clase debe de conseguir un mínimo de votos
    - Voto por mayoría con peso
      - Se pondera el voto de cada clasificador
        - Generalmente, según la bondad
        - Se suelen normalizar estas ponderaciones

- Métodos básicos: Fusión de etiquetas:
  - Dados varios clasificadores, que clasifican la instancia x en distintas clases...
    - Voto por mayoría con peso



- Métodos básicos
  - Fusión de etiquetas
  - Fusión de salidas continuas
  - Stacking
  - Cascada
- Métodos avanzados:
  - Bagging
  - Aleatorización
  - Boosting
  - Híbridos

- Métodos básicos: Fusión de salidas continuas:
  - Dados varios clasificadores, que asignan la pertenencia de la instancia x en una determinada clase (de varias clases posibles) de forma numérica (como una RNA sin establecer umbral)
    - Ejemplo: la clasificación de la instancia x dada por 5 clasificadores distintos en cada una de las 3 posibles clases es:

	Clase I	Clase 2	Clase 3
Clasificador I	0.1	0.5	0.4
Clasificador 2	0	0	I
Clasificador 3	0.4	0.3	0.4
Clasificador 4	0.2	0.7	0.1
Clasificador 5	0.1	0.8	0.1

• Estos valores pueden ser combinados para producir una única salida de distintas maneras, como por ejemplo:

Métodos básicos: Fusión de salidas continuas:

	Clase I	Clase 2	Clase 3
Media aritmética	0.16	0.46	0.4
Mínimo	0	0	0.1
Máximo	0.4	0.8	I
Mediana	0.1	0.5	0.4
Trimmed media	0.1	0.8	0.1
Producto	0	0	0.0016

- Trimmed media:
  - Realizar la media quitando % extremo
    - En este ejemplo, se han eliminado los dos extremos

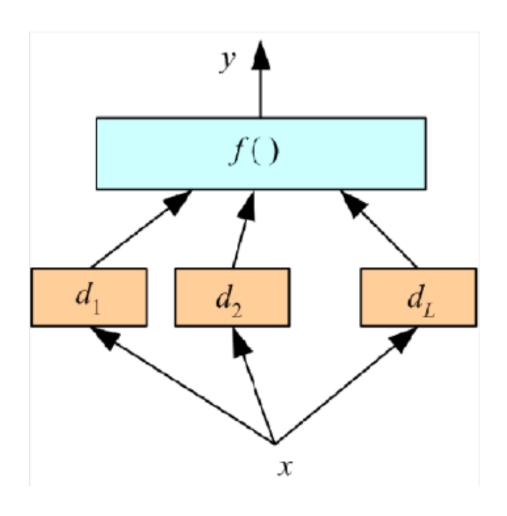
- Métodos básicos
  - Fusión de etiquetas
  - Fusión de salidas continuas
  - Stacking
  - Cascada
- Métodos avanzados:
  - Bagging
  - Aleatorización
  - Boosting
  - Híbridos

- Métodos básicos: Stacking o apilado (Wolpert, 1992):
  - Votando no deja claro en qué clasificador confiamos
    - Stacking intenta aprender qué clasificadores son los fiables descubriendo cómo combinar mejor sus salidas
  - Stacking construye otro clasificador con las salidas de los clasificadores base, en vez de votar
  - Menos usado que baggaging y boosting
  - Generalmente utilizado para combinar clasificadores de distinto tipo para que se complementen

- Métodos básicos: Stacking (Wolpert, 1992):
  - Idea general:
    - Diversas capas (o niveles) de clasificadores
      - Cada capa utiliza los resultados obtenidos por la capa anterior
    - La última capa está formada por un único clasificador que es el que toma la decisión final
    - Los clasificadores utilizados constituyen el nivel 0
    - Las salidas (predicciones) de estos modelos son la entrada al metamodelo: nivel 1.
      - Una instancia de nivel I tiene tantas características como clasificadores base haya

- Métodos básicos: Stacking (Wolpert, 1992):
  - Funcionamiento:
    - Llega una instancia
    - Cada modelo de nivel 0 predice la clase
    - Las predicciones entran al clasificador de nivel 1, que las combina y genera la predicción final

Métodos básicos: Stacking (Wolpert, 1992):



- Métodos básicos: Stacking (Wolpert, 1992):
  - ¿Cómo entrenar ese clasificador de nivel 1?
    - No deben usarse los mismos datos con que se entrenaron los del nivel 0, porque precisamente se intenta corregir sus sesgos, aprender cómo cometen errores, y pueden tener memoria del conjunto de entrenamiento
    - Puede utilizarse holdout o un k-fold cross-validation

- Métodos básicos: Stacking (Wolpert, 1992):
  - Por ejemplo: 4-fold cross-validation (1/2)
    - Se divide el conjunto de patrones en D<sub>1</sub>, D<sub>2</sub>, D<sub>3</sub>, D<sub>4</sub>

Entrenamiento	$\{D_1, D_2, D_3\}$	$\{D_2, D_3, D_4\}$	$\{D_3, D_4, D_1\}$	$\{D_4, D_1, D_2\}$
Test	$D_4$	D <sub>I</sub>	$D_2$	$D_3$

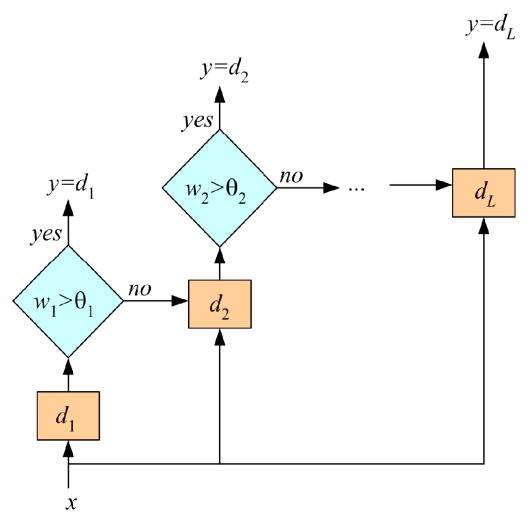
- Se pasa este esquema a todos los clasificadores y se obtiene 4 versiones de cada uno:
  - Entrenando con  $\{D_1, D_2, D_3\}$ , y haciendo test con  $D_4$
  - Entrenando con {D<sub>2</sub>, D<sub>3</sub>, D<sub>4</sub>}, y haciendo test con D<sub>1</sub>
  - Entrenando con  $\{D_3, D_4, D_1\}$ , y haciendo test con  $D_2$
  - Entrenando con  $\{D_4, D_1, D_2\}$ , y haciendo test con  $D_3$

- Métodos básicos: Stacking (Wolpert, 1992):
  - Por ejemplo: 4-fold cross-validation (2/2)
    - Se entrena el metaclasificador con todas las instancias.
      - Para cada instancia,
        - Por ejemplo, si la instancia está en  $D_1$ , se toman las salidas de los clasificadores entrenados en  $\{D_2, D_3, D_4\}$
      - Para no usar datos vistos en el entrenamiento del nivel 0, y que el nivel 1 refleje el rendimiento de los del nivel 0
  - Válido para salidas categóricas (etiquetas de clase) o probabilidades (a cada clase)

- Métodos básicos
  - Fusión de etiquetas
  - Fusión de salidas continuas
  - Stacking
  - Cascada
- Métodos avanzados:
  - Bagging
  - Aleatorización
  - Boosting
  - Híbridos

- Métodos básicos: Combinación en cascada:
  - Se tiene una secuencia de clasificadores ordenados
    - Distintos modelos
    - Se usa el clasificador j para la instancia x si los clasificadores previos no han proporcionado la suficiente confianza (probabilidad superior a cierto umbral) al clasificarla
  - Proceso:
    - Entrenar el clasificador d<sub>1</sub> y validarlo con otro conjunto
    - Las instancias en las que d<sub>1</sub> no es fiable (tanto las que no pasan el umbral como las mal clasificadas) entrenan d<sub>2</sub>, etc.

• Métodos básicos: Combinación en cascada:



- Métodos básicos: Combinación en cascada:
  - Se utilizan sucesivamente clasificadores más complejos porque uno simple clasificará bien la mayoría de instancias y uno complejo sólo se usará para un pequeño porcentaje
  - Para no incrementar mucho el número de clasificadores, las pocas instancias que no pasen ninguna prueba se almacenan como están y son tratadas por un clasificador no paramétrico como el k-NN
  - Las clases pueden explicarse por un pequeño conjunto de reglas de complejidad creciente, con un pequeño conjunto adicional de excepciones que estas reglas no cubren (mejor manejadas por métodos no paramétricos)

- Métodos básicos
  - Fusión de etiquetas
  - Fusión de salidas continuas
  - Stacking
  - Cascada
- Métodos avanzados:
  - Bagging
  - Aleatorización
  - Boosting
  - Híbridos

- Métodos avanzados: Bagging (Breiman, 1996):
  - Bagging = Bootstrap AGGregatING
  - Se combinan clasificadores obtenidos de réplicas bootstrap del conjunto de patrones
    - A partir del conjunto de patrones, se crean varios conjuntos bootstrap, que se utilizan para entrenar distintos clasificadores
      - El mismo tipo de clasificadores
  - Para generar la salida se selecciona la clase más frecuentemente predicha
  - Si el tamaño muestral es muy grande, los clasificadores salen parecidos y no suele merecer la pena hacer bagging

- Métodos avanzados: Bagging (Breiman, 1996):
  - Algoritmo:
    - Fase de entrenamiento:
      - Sea N el número de ejemplos en el conjunto de entrenamiento
      - Para k = I, ..., L (L clasificadores):
        - Tomar una muestra bootstrap  $S_k$  del conjunto de entrenamiento
          - (muestrear N instancias con reemplazamiento)
        - Construir un clasificador d<sub>k</sub> usando dicha muestra
        - Añadirlo al metaclasificador
    - Fase de clasificación:
      - Para cada clasificador, predecir la clase de la instancia usando el modelo
      - Devolver la clase que ha sido predicha más veces (más votada)

- Métodos avanzados: Bagging (Breiman, 1996):
  - La probabilidad de que una instancia del conjunto de entrenamiento sea seleccionada para formar parte de la muestra bootstrap es I-(I-I/N)<sup>N</sup>, que, para N grande, es aproximadamente 0.63
    - Esto quiere decir que cada muestra bootstrap se espera que contenga sólo un 63% de instancias diferentes del conjunto de entrenamiento
    - Esto hace que los clasificadores construidos sean distintos (se entrenan sobre conjuntos diferentes)
  - Si los clasificadores son inestables (ej: RNA), el metaclasificador debería ser mejor
  - En cambio, si son estables (ej: kNN), no van a ser muy distintas las predicciones
    - Poca mejora con el bagging

- Métodos avanzados: Bagging (Breiman, 1996):
  - Tipos de salidas a las que se aplica:
    - Etiquetas de clase
    - Probabilidades a posteriori: 2 opciones:
      - Usar la clase con mayor probabilidad. Votar después.
      - Promediar las probabilidades sobre las muestras bootstrap obteniendo unas nuevas probabilidades de cada clase y tomar la clase de la más grande.
      - Ambas producen tasas de error similares
    - Predicciones numéricas: tomar la mediana

- Métodos básicos
  - Fusión de etiquetas
  - Fusión de salidas continuas
  - Stacking
  - Cascada
- Métodos avanzados:
  - Bagging
  - Aleatorización
  - Boosting
  - Híbridos

- Métodos avanzados: Aleatorización:
  - Bagging introduce aleatorización en la entrada del algoritmo, con excelentes resultados
  - Pero hay muchas otras formas de crear diversidad introduciendo aleatoriedad
    - Cualquier algoritmo es susceptible de permitir algún tipo de aleatorización
      - Por ejemplo, un árbol de decisión que, al abrir las ramas en cada nodo, en lugar de escoger la variable ganadora, escoge una al azar entre las mejores
      - Precio a pagar: más diversidad pero menor uso de los datos, quizá disminuyendo el rendimiento de cada modelo
    - Aleatorización es más costosa que bagging porque hay que modificar el algoritmo
      - Sin embargo, puede aplicarse a clasificadores estables
      - El truco es aleatorizar para que haya diversidad sin sacrificar demasiado el rendimiento
    - Aleatorización y bagging pueden combinarse introduciendo aleatoriedad de forma complementaria y diferente.

- Métodos básicos
  - Fusión de etiquetas
  - Fusión de salidas continuas
  - Stacking
  - Cascada
- Métodos avanzados:
  - Bagging
  - Aleatorización
  - Boosting
  - Híbridos

- Métodos avanzados: Boosting (Freund y Shapire, 1996):
  - El metaclasificador se desarrolla de manera incremental, añadiendo uno en cada iteración
  - El clasificador en el paso t se entrena sobre un conjunto de entrenamiento muestreado de manera selectiva
    - Los objetos mal clasificados en la iteración anterior ven aumentada su probabilidad de ser seleccionados
      - Algoritmo AdaBoost
  - Se combinan modelos del mismo tipo
    - Esta técnica se basa en buscar explícita y activamente modelos que se complementen, en vez de dejarlo en manos del azar y de la inestabilidad del algoritmo (bagging)
  - Para combinar la salida, se utiliza un sistema de votación con pesado

- Comparación boosting / bagging:
  - Similitudes:
    - Combinar modelos del mismo tipo
    - Usar voto por mayoría para combinar las salidas
    - Los clasificadores base se generan usando la misma muestra de entrenamiento
  - Diferencias:
    - En bagging, las muestras de entrenamiento se generan aleatoriamente y puede generar los clasificadores en paralelo; boosting es determinístico y la generación es secuencial basada en los resultados previos
    - En bagging cada modelo individual se construye de manera separada; en boosting cada **nuevo modelo está influenciado** por el comportamiento de los anteriormente construidos
      - Boosting: los nuevos modelos tratan de ser expertos para instancias mal clasificadas por los anteriores modelos
    - En boosting la contribución final de cada modelo se basa en su bondad (en vez de dar igual peso a todos)

- Métodos básicos
  - Fusión de etiquetas
  - Fusión de salidas continuas
  - Stacking
  - Cascada
- Métodos avanzados:
  - Bagging
  - Aleatorización
  - Boosting
  - Híbridos

- Métodos avanzados: Hibridaciones:
  - El clasificador se induce teniendo en cuenta dos o más paradigmas, por ejemplo:
    - Lazy Bayesian Rules (Zheng y Webb, 2000):
      - Para cada ejemplo a clasificar obtiene un naive Bayes con aquellos casos más cercanos
    - Naive Bayes Tree (Kohavi, 1996):
      - Induce árboles cuyas hojas son clasificadores naive Bayes, los cuales se usarán en los ejemplos que alcancen dichas hojas
    - Logistic Model Trees (Landwehr, Hall y Frank, 2005):
      - Árboles en cuyas hojas se lleva a cabo la clasificación, de aquellos ejemplos que los alcancen, por medio de una regresión logística