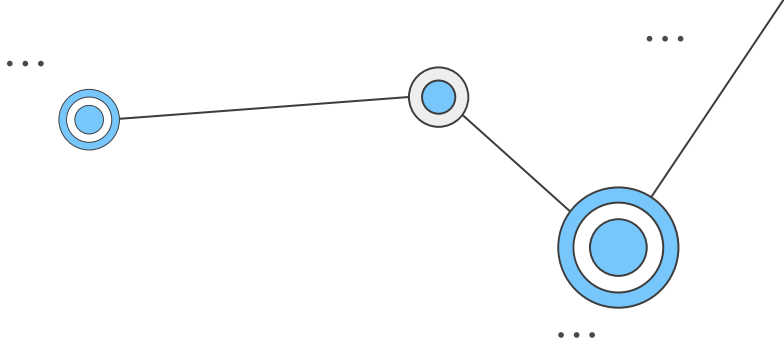
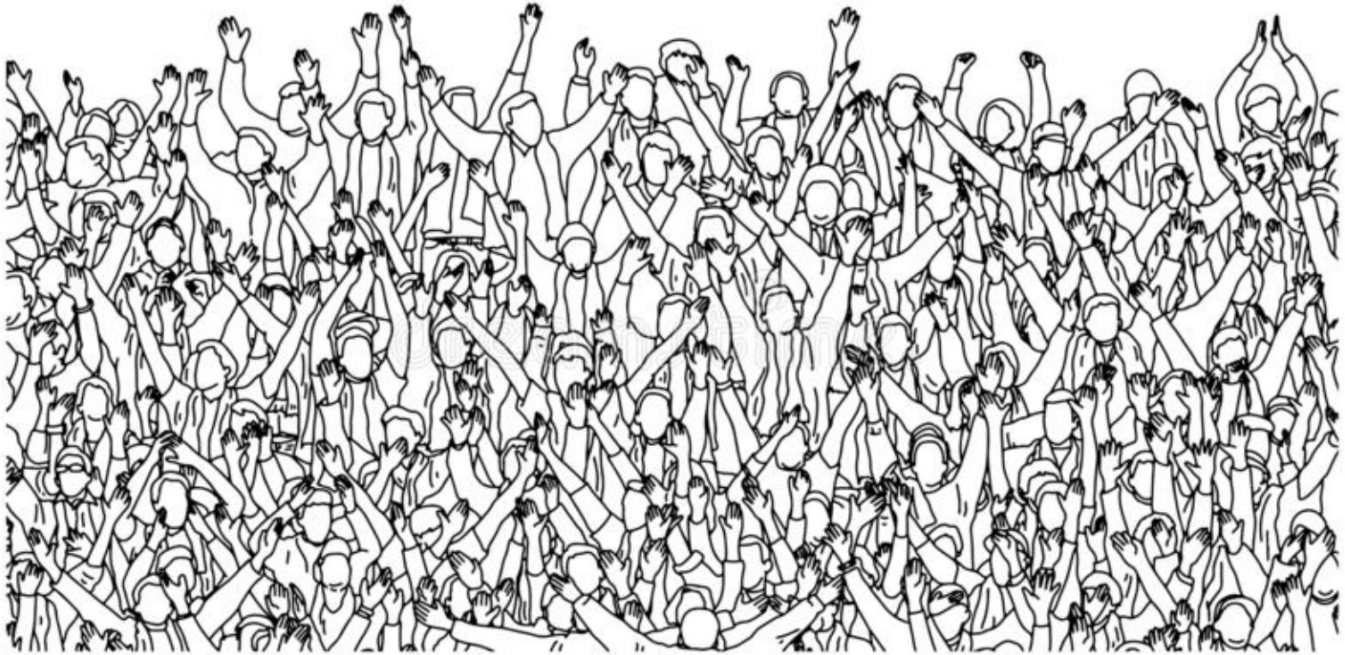


Métodos de Ensamble

UNIVERSIDAD CATÓLICA DE CÓRDOBA
JESUITAS

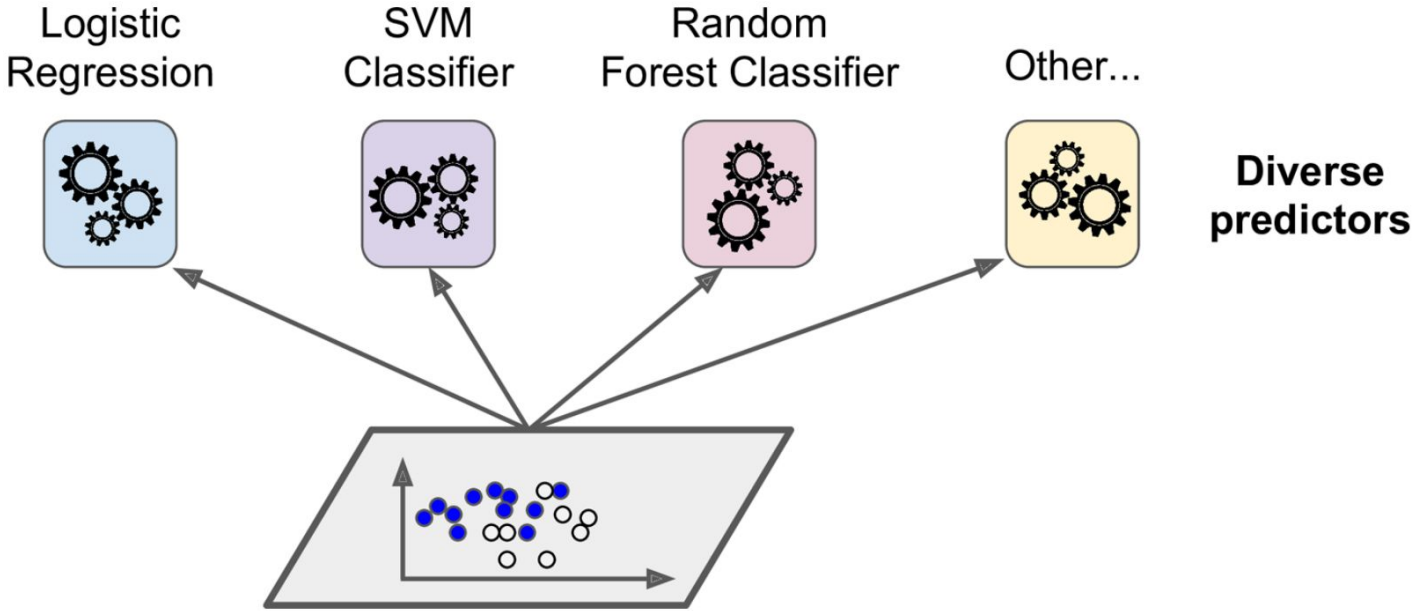
Dr. Francisco Arduh
2023

¿Cuál es la idea de los métodos de ensamble?



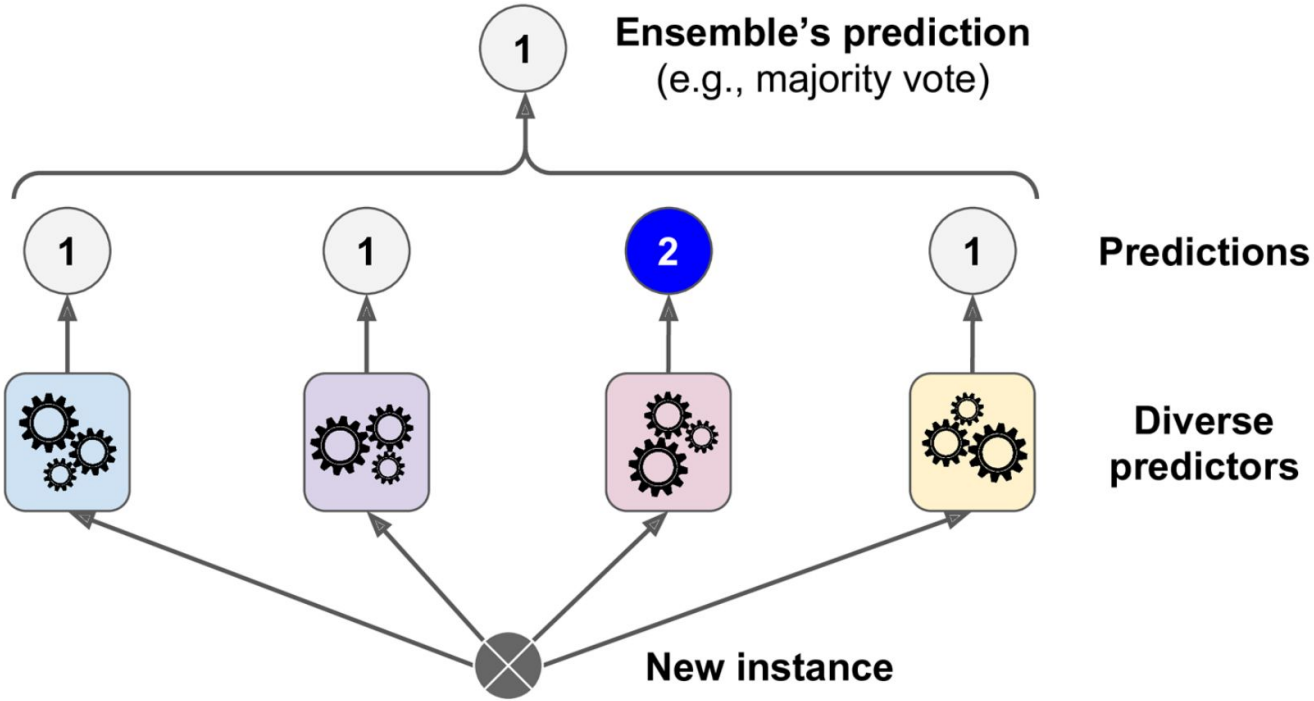
Votación por mayoría

Por ej: Se cuenta con varios clasificadores entrenados con un accuracy del 80%



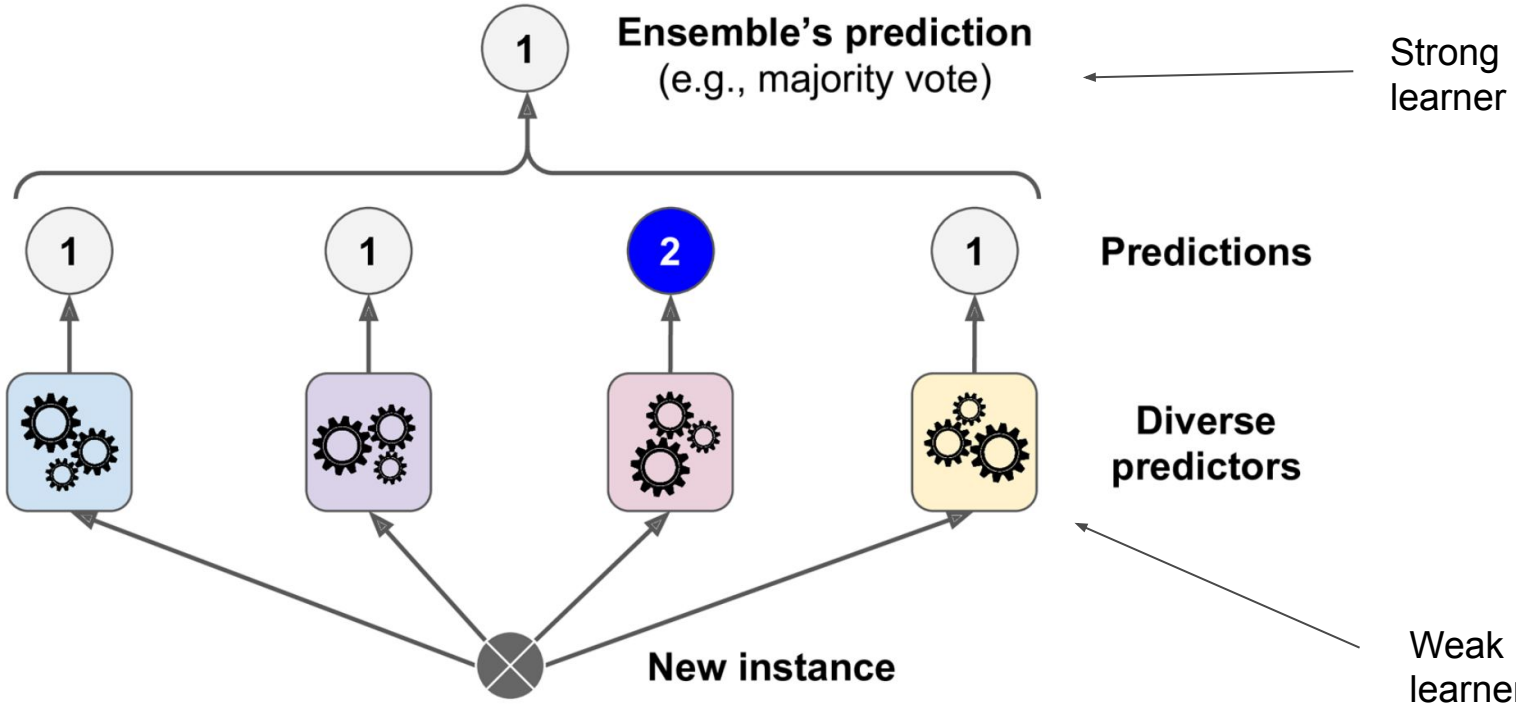
Votación por mayoría

A partir de estos clasificadores, se construye uno nuevo que toma la clase más votada como predicción (**hard voting classifier**)



Votación por mayoría

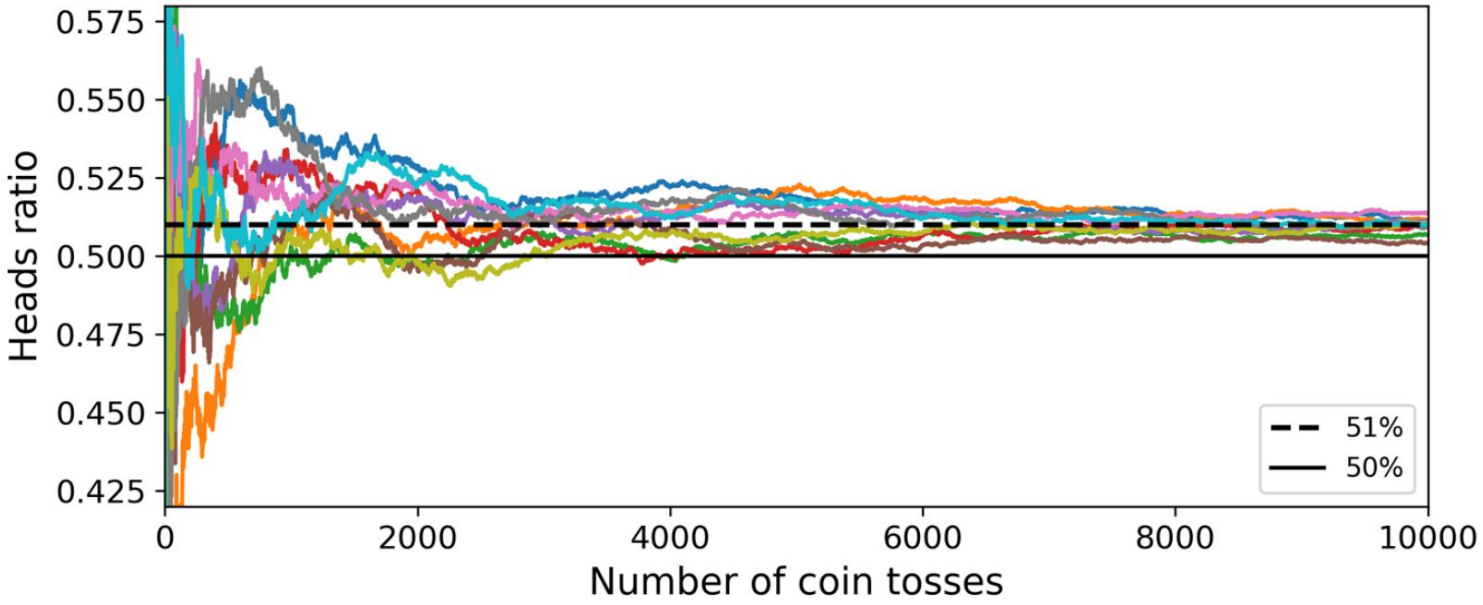
A partir de estos clasificadores, se construye uno nuevo qué toma la clase más votada como predicción (**hard voting classifier**)



¿Por qué funciona esto?

Supongamos qué tenemos un moneda con bias: P(cara)=51%, P(cruz)=49%

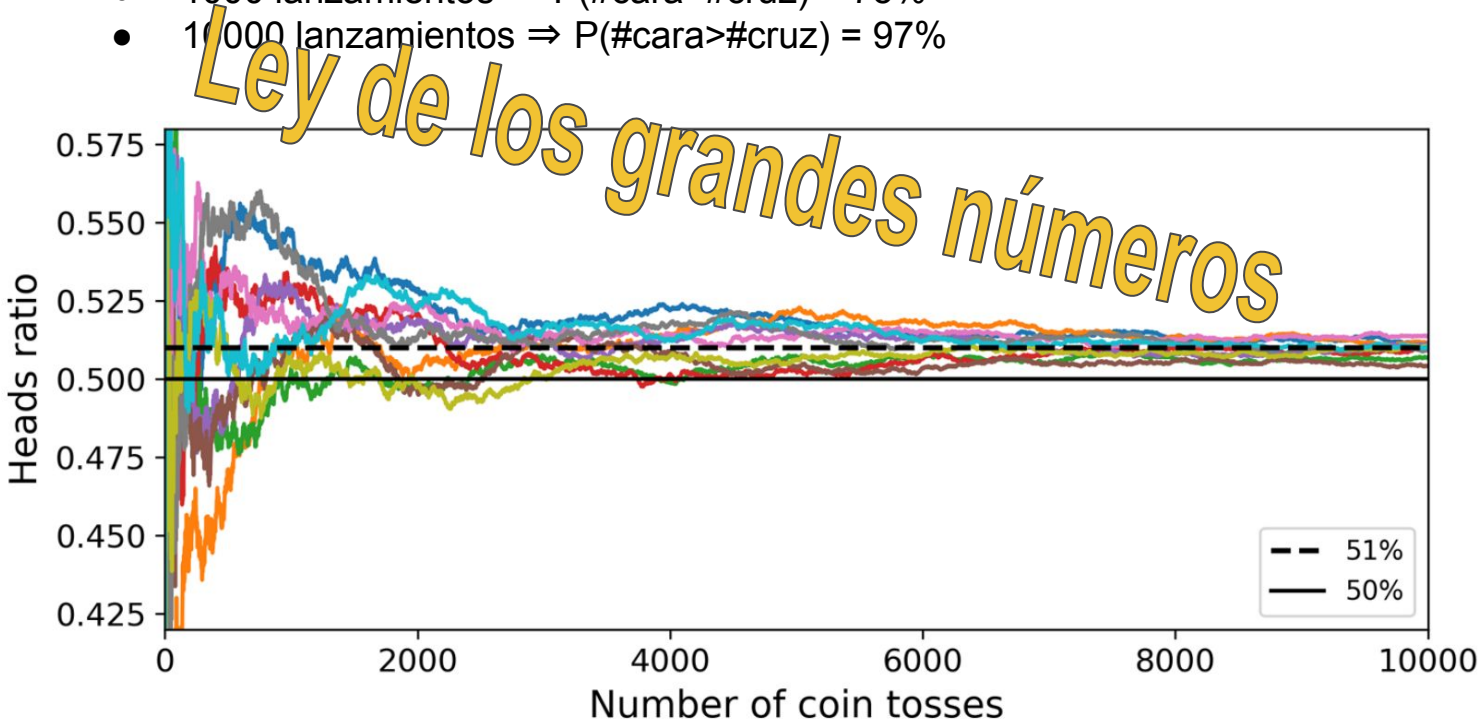
- 1000 lanzamientos ⇒ P(#cara>#cruz) = 75%
- 10000 lanzamientos ⇒ P(#cara>#cruz) = 97%



¿Por qué funciona esto?

Supongamos qué tenemos un moneda con bias: P(cara)=51%, P(cruz)=49%

- 1000 lanzamientos ⇒ P(#cara>#cruz) = 75%
- 10000 lanzamientos ⇒ P(#cara>#cruz) = 97%

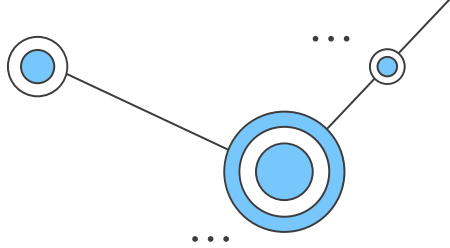


¿Por qué funciona esto?

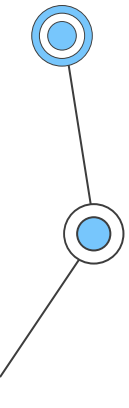
La misma lógica funciona con los clasificadores.

- Si construimos 1000 clasificadores con un accuracy del 51%, tomando el voto de la mayoría llegaríamos al 75%.
- Lo anterior es verdad solo si los clasificadores son independientes.
- Una forma de tratar que sean lo más independientes posibles es utilizar distintos tipos de clasificadores, los cuales van a cometer distintos tipos de errores.

Votación por mayoría: en Scikit-Learn



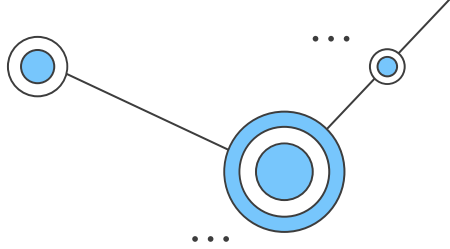
```
from sklearn.ensemble import RandomForestClassifier
from sklearn.ensemble import VotingClassifier
from sklearn.linear_model import LogisticRegression
from sklearn.svm import SVC

log_clf = LogisticRegression()
rnd_clf = RandomForestClassifier()
svm_clf = SVC()

voting_clf = VotingClassifier(
    estimators=[('lr', log_clf), ('rf', rnd_clf), ('svc', svm_clf)],
    voting='hard')
voting_clf.fit(X_train, y_train)
```



Utilizando el test set:

```
>>> from sklearn.metrics import accuracy_score
>>> for clf in (log_clf, rnd_clf, svm_clf, voting_clf):
...     clf.fit(X_train, y_train)
...     y_pred = clf.predict(X_test)
...     print(clf.__class__.__name__, accuracy_score(y_test, y_pred))
...
LogisticRegression 0.864
RandomForestClassifier 0.896
SVC 0.888
VotingClassifier 0.904
```

Votación por mayoría: en Scikit-Learn



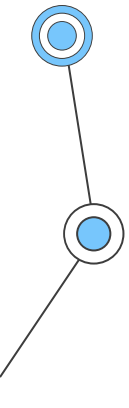
```
from sklearn.ensemble import RandomForestClassifier
from sklearn.ensemble import VotingClassifier
from sklearn.linear_model import LogisticRegression
from sklearn.svm import SVC

log_clf = LogisticRegression()
rnd_clf = RandomForestClassifier()
svm_clf = SVC()

voting_clf = VotingClassifier(
    estimators=[('lr', log_clf), ('rf', rnd_clf), ('svc', svm_clf)],
    voting='hard')
voting_clf.fit(X_train, y_train)
```

Es posible utilizar soft voting, cambiando esta variable por 'soft'

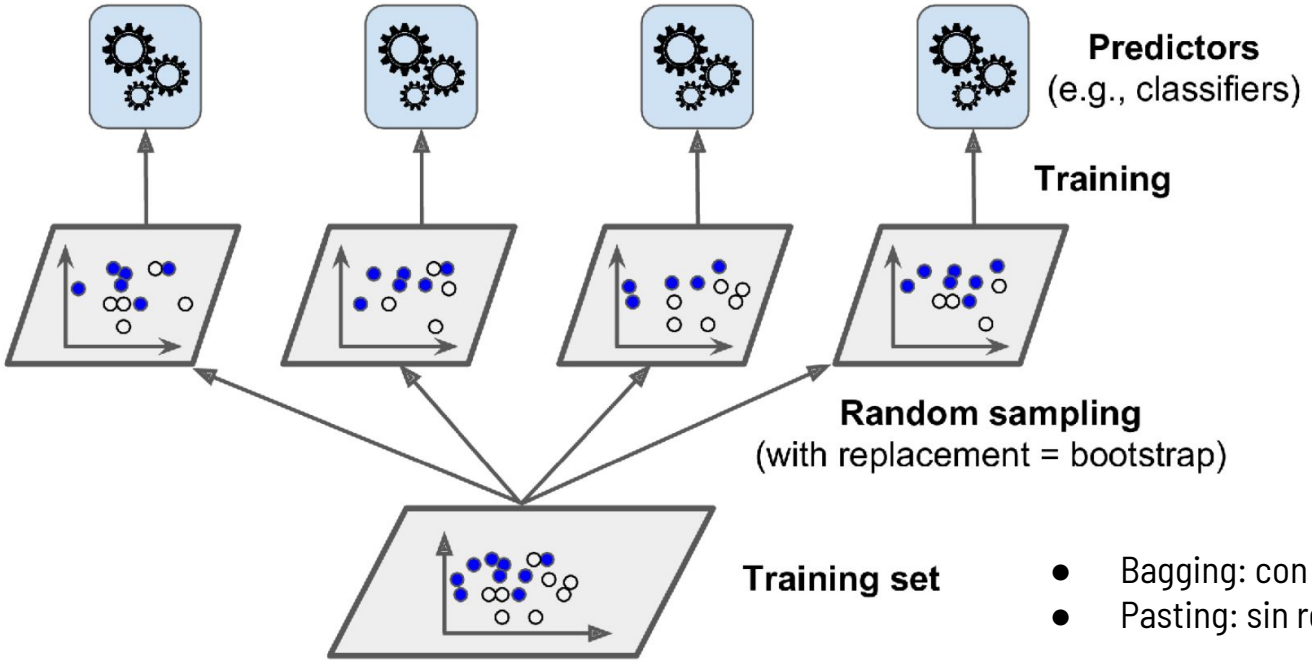
Utilizando el test set:

```
>>> from sklearn.metrics import accuracy_score
>>> for clf in (log_clf, rnd_clf, svm_clf, voting_clf):
...     clf.fit(X_train, y_train)
...     y_pred = clf.predict(X_test)
...     print(clf.__class__.__name__, accuracy_score(y_test, y_pred))
...
LogisticRegression 0.864
RandomForestClassifier 0.896
SVC 0.888
VotingClassifier 0.904
```

Soft voting: elige la clase con probabilidad más alta entre todos los clasificadores individuales



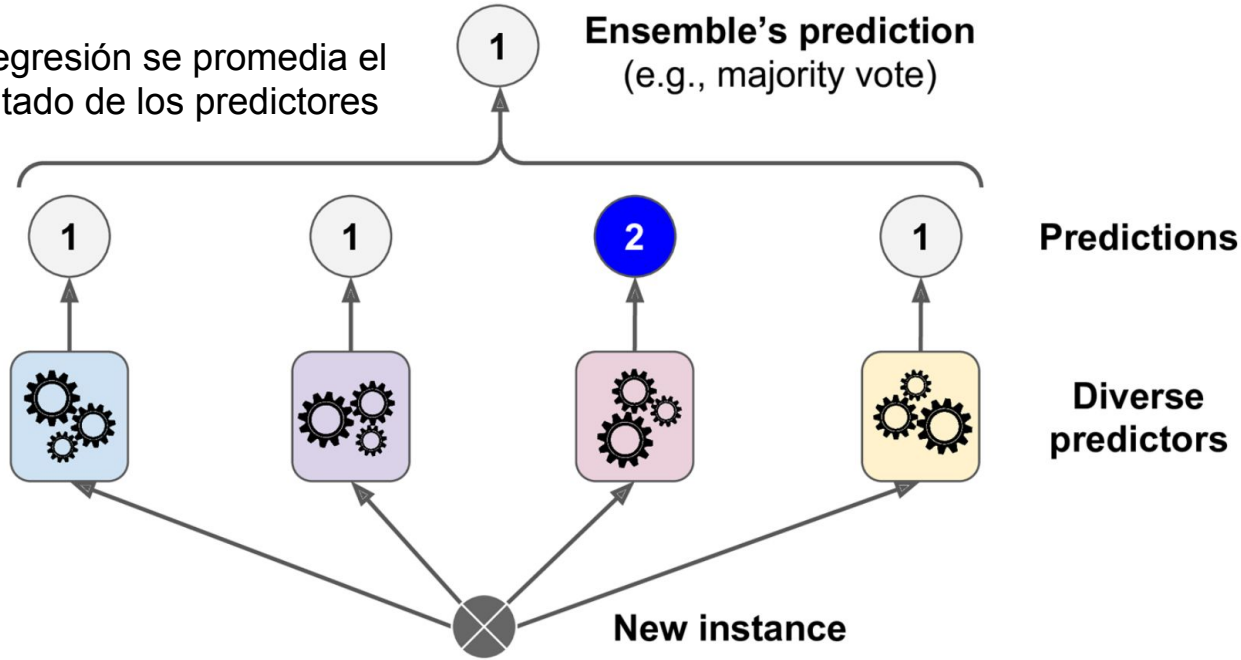
Bagging y Pasting



- Bagging: con reemplazo
- Pasting: sin reemplazo

Bagging y Pasting

En regresión se promedia el resultado de los predictores

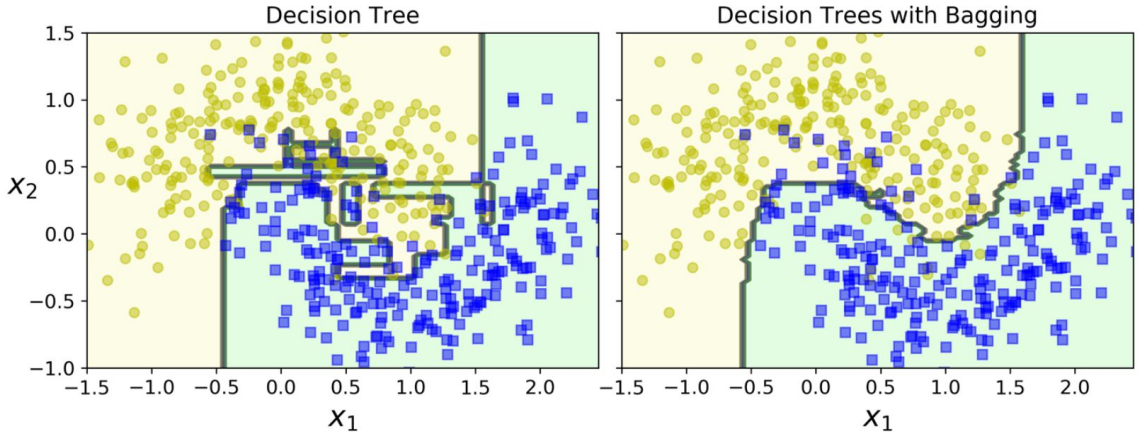


Nota: cada predictor tiene un mayor bias que si se hubiese entrenado con el dataset original, pero la combinación de todos los predictores tiene menor bias y varianza.

Bagging y Pasting: en Scikit-learn

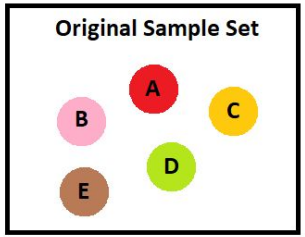
```
from sklearn.ensemble import BaggingClassifier
from sklearn.tree import DecisionTreeClassifier

bag_clf = BaggingClassifier(
    DecisionTreeClassifier(), n_estimators=500,
    max_samples=100, bootstrap=True, n_jobs=-1)
bag_clf.fit(X_train, y_train)
y_pred = bag_clf.predict(X_test)
```

- Pasting: bootstrap='False'
- Realiza soft voting siempre que los predictores contenga el método **predict_proba**()



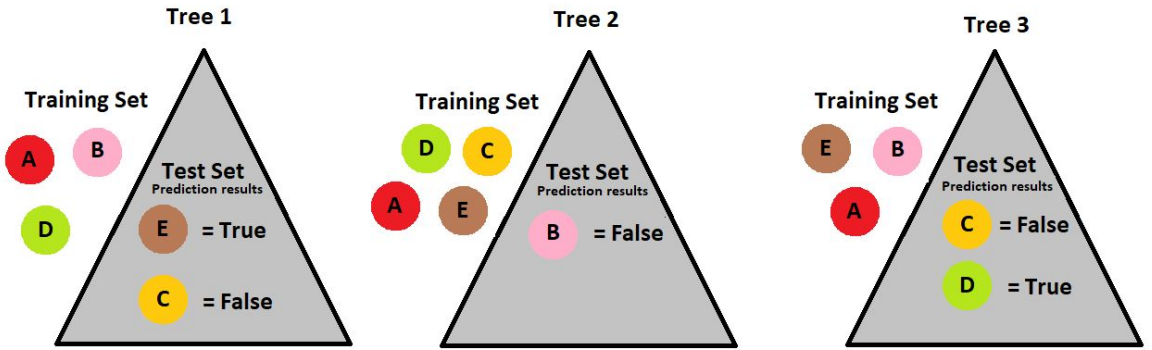
Evaluación Out-of-Bag

- En promedio cada predictor utiliza un ~63.2% de la muestra.
- El ~36.8% restante qué no se utiliza se denomina out-of-bag.

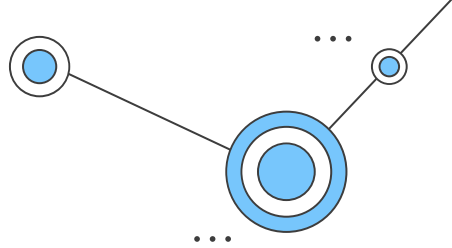


Samples	Majority Vote
A	True
B	False
C	False
D	True
E	True

2/5 Out of Bag Error



Evaluación Out-of-Bag: en Scikit-learn



Con oob_score, obtengo la accuracy en out-of-bag set:

```
>>> bag_clf = BaggingClassifier(
...     DecisionTreeClassifier(), n_estimators=500,
...     bootstrap=True, n_jobs=-1, oob_score=True)
...
>>> bag_clf.fit(X_train, y_train)
>>> bag_clf.oob_score_
0.90133333333333332
```

Comparo con lo que obtengo en el test set:

```
>>> from sklearn.metrics import accuracy_score
>>> y_pred = bag_clf.predict(X_test)
>>> accuracy_score(y_test, y_pred)
0.91200000000000003
```

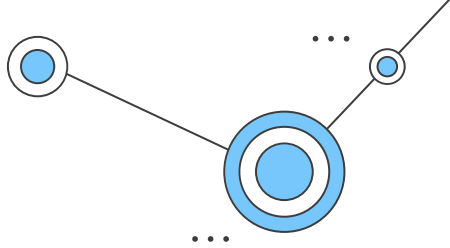
También puedo obtener el valor de la función de decisión:

```
>>> bag_clf.oob_decision_function_
array([[0.31746032, 0.68253968],
       [0.34117647, 0.65882353],
       [1.        , 0.        ],
       ...
       [1.        , 0.        ],
       [0.03108808, 0.96891192],
       [0.57291667, 0.42708333]])
```

Random Patches y Random Subspaces

- Con max_features y bootstrap_feature puedo controlar la utilización de las características. Esto es útil cuando se trabaja con muchas características.
- Variando la utilización de las características y las instancias se denomina Random Patches.
- Variando la utilización sólo de las características se denomina Random Subpaces.
- Variando la utilización de las características se cambia un poco de bias por disminución de la varianza

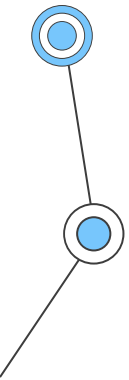
Random Forest



Random Forest no es otra cosa que utilizar el método de bagging en Decision Trees.

Utilizar:

```
from sklearn.ensemble import RandomForestClassifier

rnd_clf = RandomForestClassifier(n_estimators=500, max_leaf_nodes=16, n_jobs=-1)
rnd_clf.fit(X_train, y_train)

y_pred_rf = rnd_clf.predict(X_test)
```



Es equivalente a:

```
bag_clf = BaggingClassifier(
    DecisionTreeClassifier(splitter="random", max_leaf_nodes=16),
    n_estimators=500, max_samples=1.0, bootstrap=True, n_jobs=-1)
```

Extra-Trees

Extra-Trees (Extremete Randomized Trees)

- Utilizan selecciones aleatorias en las características (No optimiza).
- Son más rápidos de entrenar que RandomForest

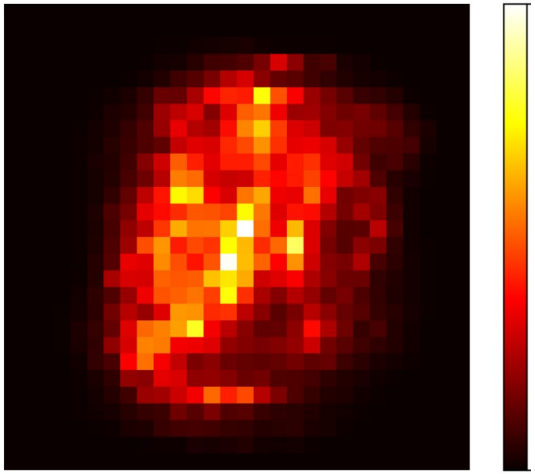
```
>>> from sklearn.ensemble import ExtraTreesClassifier
>>> from sklearn.datasets import make_classification
>>> X, y = make_classification(n_features=4, random_state=0)
>>> clf = ExtraTreesClassifier(n_estimators=100, random_state=0)
>>> clf.fit(X, y)
ExtraTreesClassifier(random_state=0)
>>> clf.predict([[0, 0, 0, 0]])
array([1])
```

Random Forest: importancia de características

Random Forest computa la importancia de la característica en función de cuanto se reduce la impureza Gini (en promedio en todo los DT).

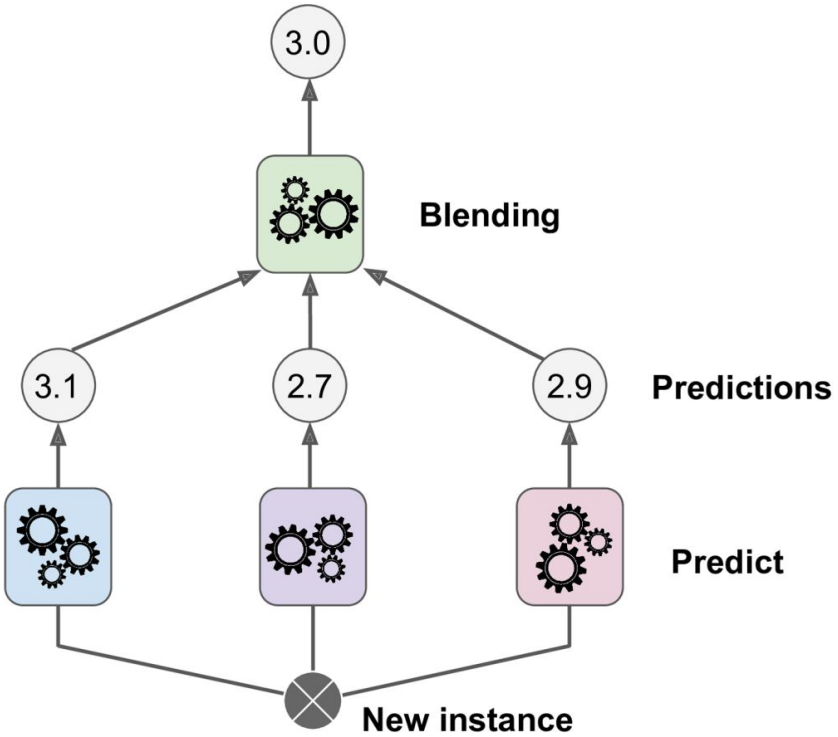
```
>>> from sklearn.datasets import load_iris
>>> iris = load_iris()
>>> rnd_clf = RandomForestClassifier(n_estimators=500, n_jobs=-1)
>>> rnd_clf.fit(iris["data"], iris["target"])
>>> for name, score in zip(iris["feature_names"], rnd_clf.feature_importances_):
...     print(name, score)
...
sepal length (cm) 0.112492250999
sepal width (cm) 0.0231192882825
petal length (cm) 0.441030464364
petal width (cm) 0.423357996355
```

Importancia de pixel en MNIST:



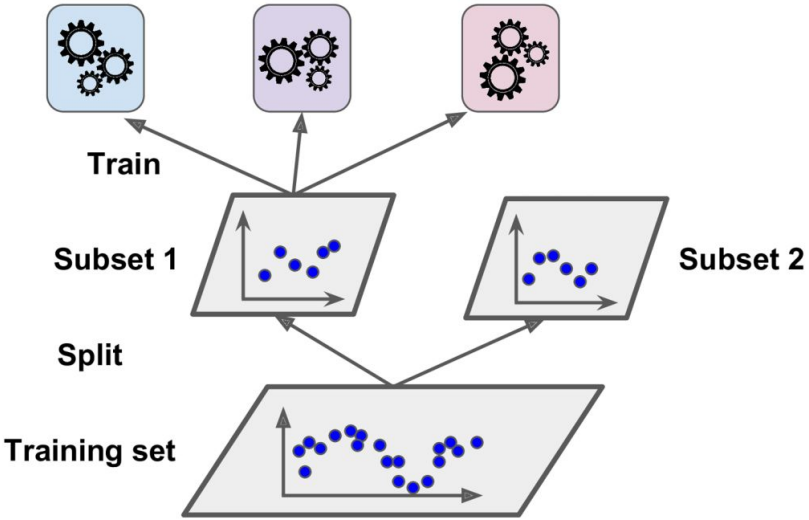
Stacking

- En vez de utilizar hard voting (o soft) para juntar las predicciones, se entrena un modelo para realizar esta tarea.
- Al predictor que mezcla las observaciones se lo denomina *blender* o *meta learner*

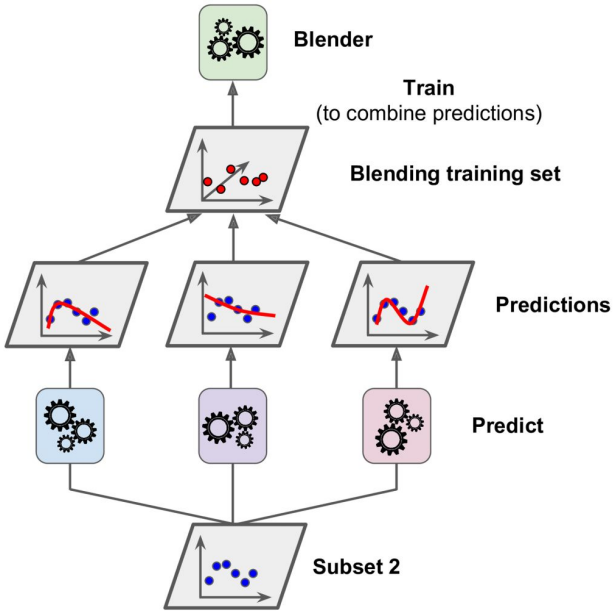


Stacking: ¿cómo se entrenan?

Paso 1: Dividir la muestra en dos con la primer parte entrenar los primeros predictores

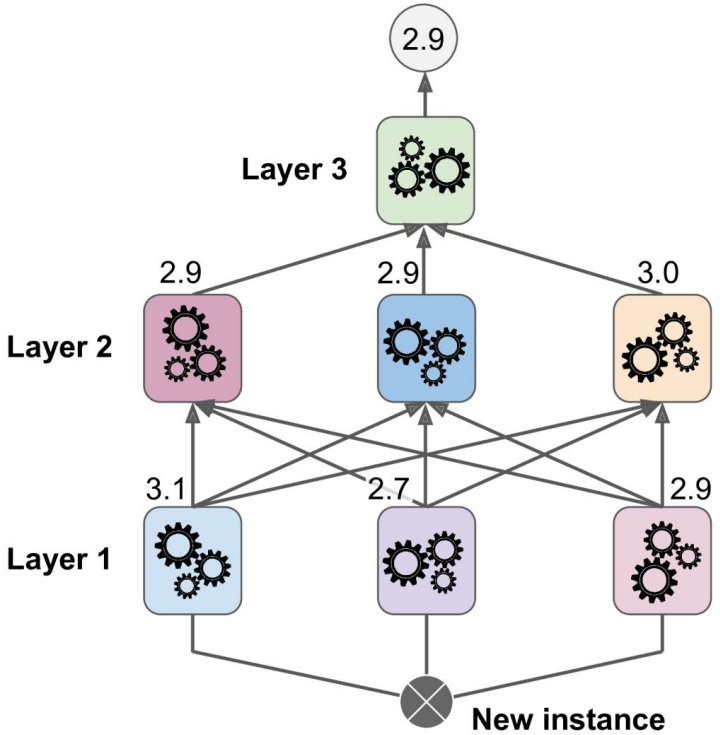


Paso 2: Con la segunda muestra, se realiza la predicción y se entrena el blender



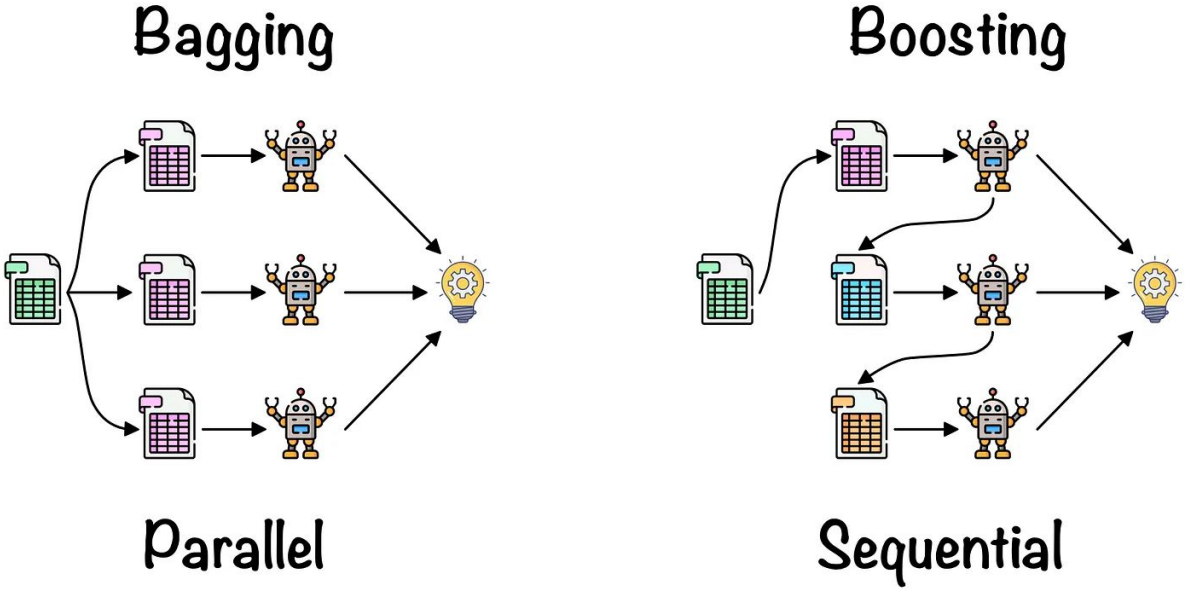
Stacking: ¿cómo se entrenan?

- Es posible utilizar varios blenders.
- En este caso deberíamos dividir la muestra en 3.



Boosting

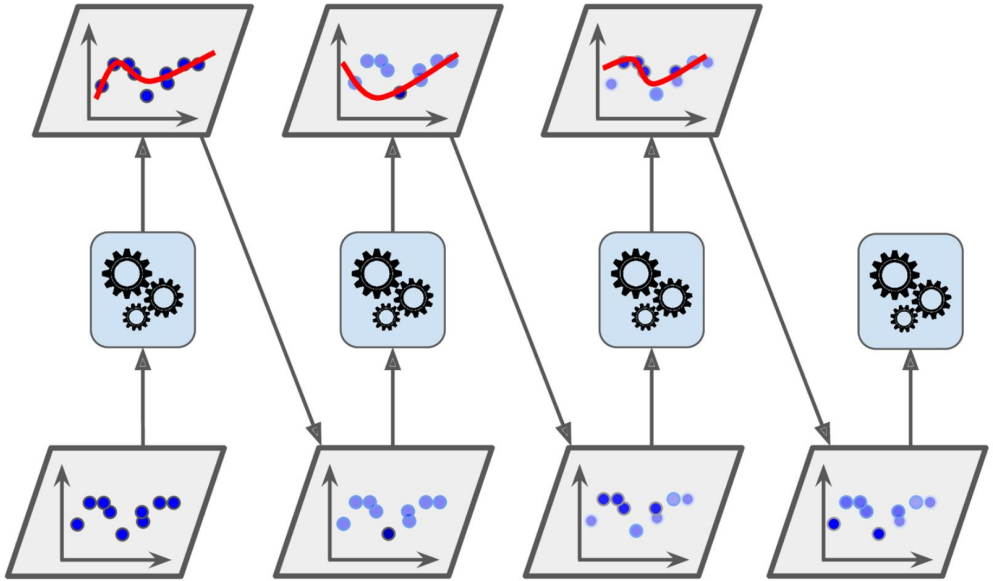
- Se entrenan predictores secuencialmente donde cada modelo intenta arreglar los errores de los modelos anteriores.



- Los algoritmos secuenciales no se pueden paralelizar.

AdaBoost (Adaptative Boost)

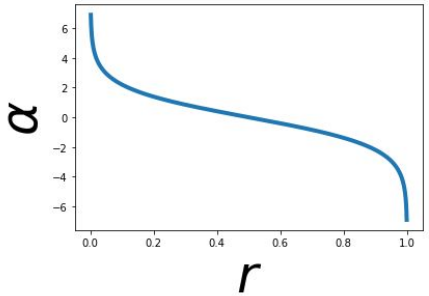
- Una forma de corregir al predictor predecesor es darle más peso a los casos subajustados.
- Como weak learner se utilizan Decision Stump (DT con max_depth=1).



AdaBoost: ¿Cómo funciona?

1. Inicialmente se pesa cada instancia 1/m, siendo m el número de instancias.
2. Se entrena un weak learner teniendo en cuenta el peso de las muestras.
3. Se calcula el error cometido por el predictor. Se toma en el caso de clasificación la tasa de instancias mal identificadas.
4. Se calcula el peso qué se le va a asignar al predictor, dado por:

$$\alpha_j = \eta \log \frac{1 - r_j}{r_j}$$



Siendo r_j el error cometido por el predictor j y η un learning rate.

5. Luego se actualizan los pesos siguiendo esta regla:

$$\text{for } i = 1, 2, \cdots, m$$

$$w^{(i)} \leftarrow \begin{cases} w^{(i)} & \text{if } \widehat{y}_j^{(i)} = y^{(i)} \\ w^{(i)} \exp\left(\alpha_j\right) & \text{if } \widehat{y}_j^{(i)} \neq y^{(i)} \end{cases}$$

6. Se normalizan los pesos (dividiendo por la suma de los nuevos pesos)
7. Se repite del punto 2 al 6 hasta alcanzar el número de estimadores deseados.
8. Finalmente para realizar predicciones se utilizan todos los estimadores pesado por α_j

AdaBoost: En Scikit-learn

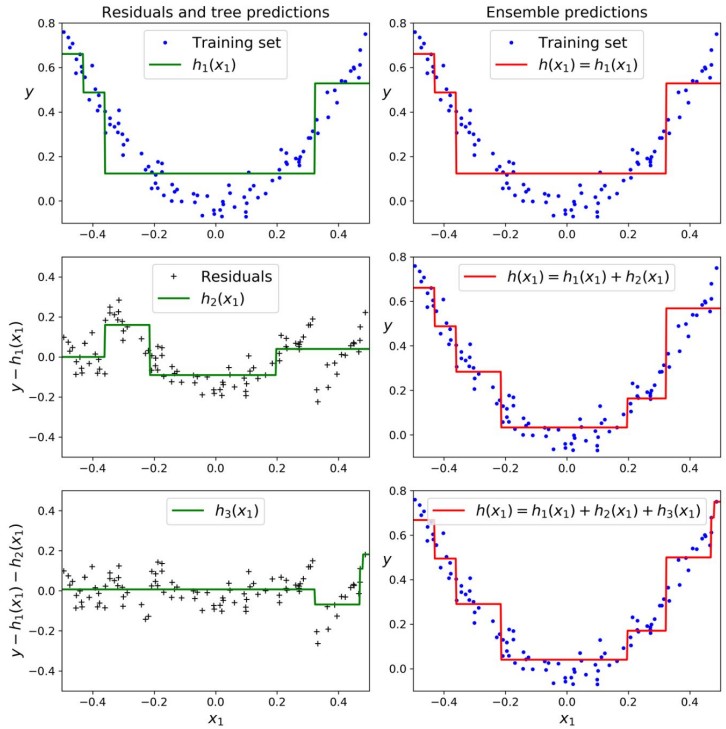
- Scikit-learn utiliza una versión multiclase del algoritmo AdaBoost llamada SAMME.
- SAMME.R es un variante de SAMME qué utiliza probabilidades

```
>>> from sklearn.tree import DecisionTreeClassifier
>>> from sklearn.ensemble import AdaBoostClassifier
>>> from sklearn.datasets import make_classification
>>> X, y = make_classification(n_samples=1000, n_features=4,
...                            n_informative=2, n_redundant=0,
...                            random_state=0, shuffle=False)
>>> clf = AdaBoostClassifier(
...     DecisionTreeClassifier(max_depth=1), n_estimators=200,
...     algorithm="SAMME.R", learning_rate=0.5)
>>> clf.fit(X, y)
AdaBoostClassifier(n_estimators=100, random_state=0)
>>> clf.predict([[0, 0, 0, 0]])
array([1])
>>> clf.score(X, y)
0.977...
```

Gradient Boosting

- Al igual que AdaBoost funciona de forma secuencial.
- En vez de cambiar los pesos de las instancias, crea un nuevo predictor para tratar de ajustar los errores residuales.

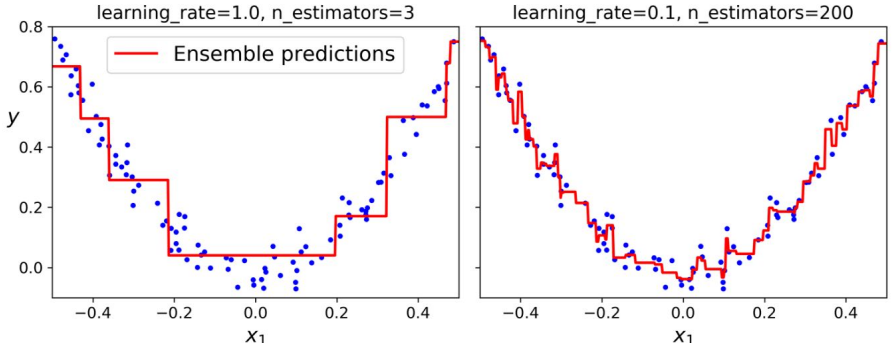
```
from sklearn.tree import DecisionTreeRegressor

tree_reg1 = DecisionTreeRegressor(max_depth=2)
tree_reg1.fit(X, y)

y2 = y - tree_reg1.predict(X)
tree_reg2 = DecisionTreeRegressor(max_depth=2)
tree_reg2.fit(X, y2)

y3 = y2 - tree_reg2.predict(X)
tree_reg3 = DecisionTreeRegressor(max_depth=2)
tree_reg3.fit(X, y3)

y_pred = sum(tree.predict(X_new) for tree in (tree_reg1, tree_reg2, tree_reg3))
```



Gradient Boosting en Scikit-Learn

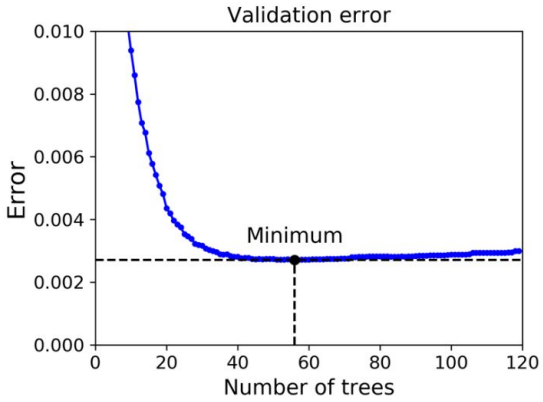
- Cuenta con los mismos hiperparámetros de Decision Trees.
- Cuenta con otro parámetro de learning rate, que escala las contribuciones de cada árbol. Un learning rate bajo por lo general generaliza mejor. Esto se denomina *shrinkage*.

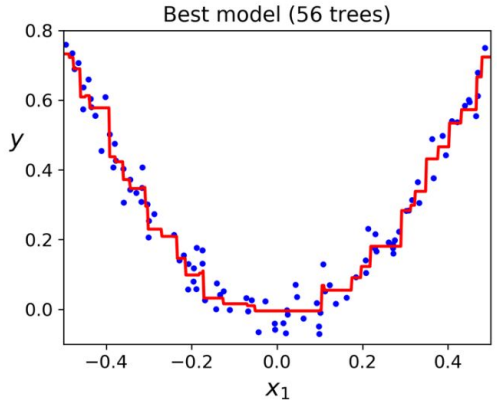
```
from sklearn.ensemble import GradientBoostingRegressor

gbrt = GradientBoostingRegressor(max_depth=2, n_estimators=3, learning_rate=1.0)
gbrt.fit(X, y)
```



Gradient Boosting: número de árboles óptimo

```
import numpy as np
from sklearn.model_selection import train_test_split
from sklearn.metrics import mean_squared_error

X_train, X_val, y_train, y_val = train_test_split(X, y)

gbrt = GradientBoostingRegressor(max_depth=2, n_estimators=120)
gbrt.fit(X_train, y_train)

errors = [mean_squared_error(y_val, y_pred)
          for y_pred in gbrt.staged_predict(X_val)]
bst_n_estimators = np.argmin(errors) + 1

gbrt_best = GradientBoostingRegressor(max_depth=2,n_estimators=bst_n_estimators)
gbrt_best.fit(X_train, y_train)
```





Gradient Boosting: early stopped

```
gbrt = GradientBoostingRegressor(max_depth=2, warm_start=True)

min_val_error = float("inf")
error_going_up = 0
for n_estimators in range(1, 120):
    gbrt.n_estimators = n_estimators
    gbrt.fit(X_train, y_train)
    y_pred = gbrt.predict(X_val)
    val_error = mean_squared_error(y_val, y_pred)
    if val_error < min_val_error:
        min_val_error = val_error
        error_going_up = 0
    else:
        error_going_up += 1
        if error_going_up == 5:
            break  # early stopping
```

Utilizando el hiperparámetro **subsample** es posible utilizar solo un porcentaje de training set al momento de estrenar cada árbol. A esta técnica se la denomina *Stochastic Gradient Boosting*

Stochastic Gradient Boosting

- Utilizando el hiperparámetro **subsample** es posible utilizar solo un porcentaje de training set al momento de estrenar cada árbol.
- Se cambia bias por varianza.
- Se incrementa la velocidad de entrenamiento.
- A esta técnica se la denomina *Stochastic Gradient Boosting*

Otras implementaciones de Gradient Boosting

XGBoost

- Documentation: https://xgboost.readthedocs.io/
- Paper: https://arxiv.org/pdf/1603.02754.pdf

LightGBM

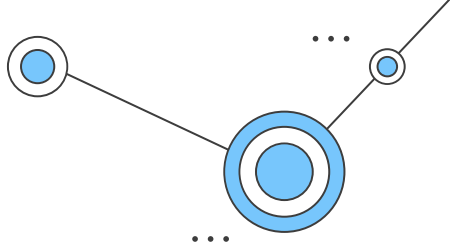
- Documentation: https://lightgbm.readthedocs.io/
- Paper: https://proceedings.neurips.cc/paper/2017/file/6449f44a102fde848669bdd9eb6b76fa-Paper.pdf

CatBoost

- Documentation: https://catboost.ai/en/docs/
- Paper: http://learningsys.org/nips17/assets/papers/paper_11.pd

Comparación entre algoritmos:
https://towardsdatascience.com/catboost-vs-lightgbm-vs-xgboost-c80f40662924

XGBoost

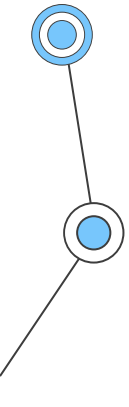


Instalación de librería:

```
$ sudo pip install xgboost
```

Algoritmo de clasificación:

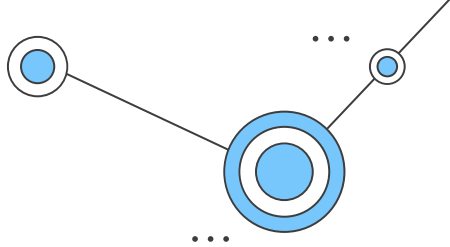
```
model = XGBClassifier()
model.fit(X, y)
y_pred = model.predict(X)
```



Algoritmo de regresión:

```
model = XGBRegressor(objective='reg:squarederror')
model.fit(X, y)
y_pred = model.predict(X)
```

LightGBM

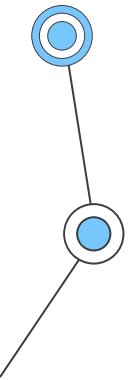


Instalación de librería:

```
$ sudo pip install lightgbm
```

Algoritmo de clasificación:

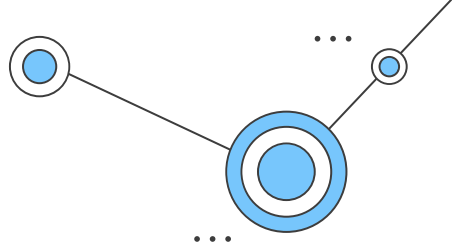
```
model = LGBMClassifier()
model.fit(X, y)
y_pred = model.predict(X)
```



Algoritmo de regresión:

```
model = LGBMRegressor()
model.fit(X, y)
y_pred = model.predict(X)
```

CatBoost

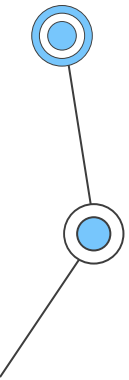


Instalación de librería:

```
$ sudo pip install catboost
```

Algoritmo de clasificación:

```
model = CatBoostClassifier(verbose=0, n_estimators=100)
model.fit(X, y)
y_pred = model.predict(X)
```



Algoritmo de regresión:

```
model = CatBoostRegressor(verbose=0, n_estimators=100)
model.fit(X, y)
y_pred = model.predict(X)
```

Papers para seguir profundizando

Tabular Data: Deep Learning is Not All You Need:
https://arxiv.org/abs/2106.03253

Why do tree-based models still outperform deep learning on tabular data?:
https://arxiv.org/abs/2207.08815