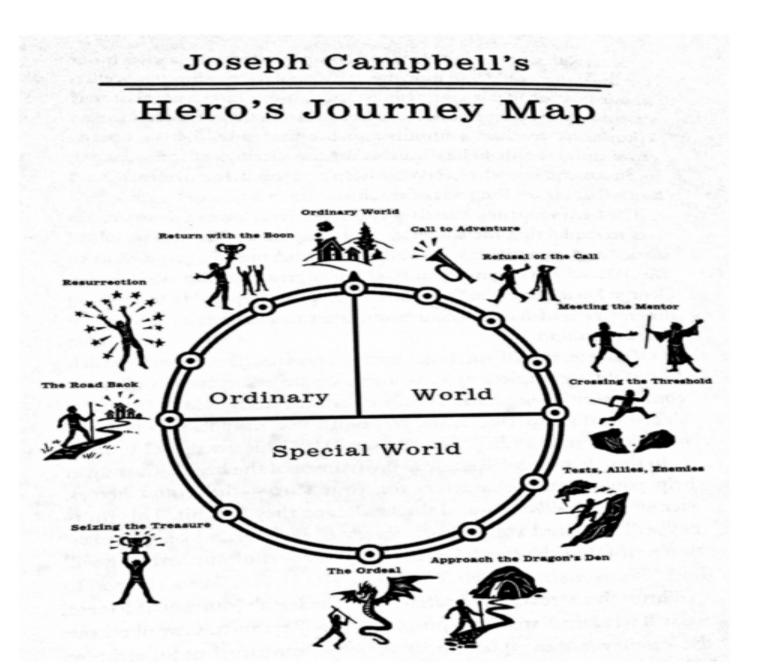
Back from the Future

2023

Agenda

- 1)Motivación
- 2)Experimentación
- 3)Test Estadístico para la comparación de Modelos Predictivos

The 12 Phases Mapped to The Context



1st Act (The Known)

- 1. The Ordinary World (Comfort Zone)
- 2. Call to Adventure (Stressor)
- 3. Refusal of The Call (Resistance, Fear)
- 4. Meeting The Mentor (Coach, Facilitator)
- 5. Crossing The Threshold (Leadership)

2nd Act (The Adventure)

- 6. Tests, Allies, Enemies (Experiment, Observe)
- 7. Approaching The Inner Cave (Understand, Make Sense)
- 8. The Ordeal (Reflector, Punctuation Point)
- **9. Seize The Reward** (Revelation, Knowledge Gained)

3rd Act (Chance to Make It Right)

- 10. The Road Back Home (Transform, Change)
- 11. Resurrection, Atonement (Show Proof)
- **12**. **Return with The Elixir** (Outcome, Kaizen)

Capítulo 1 Motivación

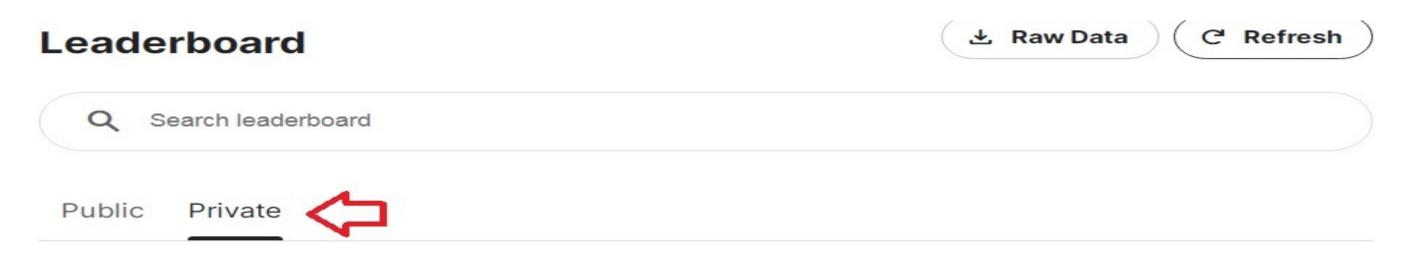
Episode 1.2 Call to Adventure stressor

The adventure might begin from a blunder, or when a passing phenomenon causes a wandering eye luring the hero from the frequented path ...

Joseph Campell, The Hero with a Thousand Faces, 1949

blunder:/'blndə/noun: a stupid or careless mistake

Motivación mejoras inexplicables

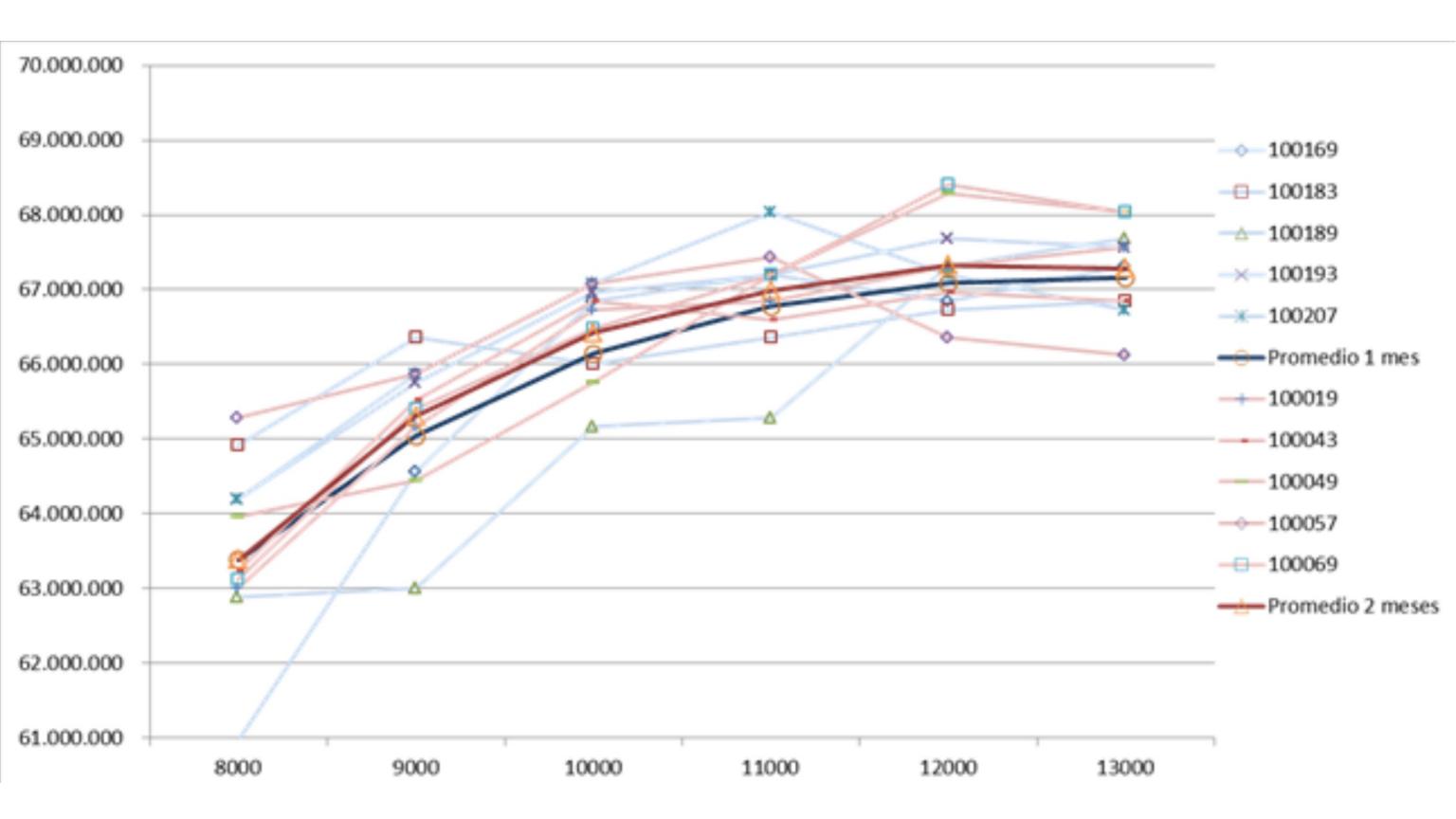


The private leaderboard is calculated with approximately 70% of the test data.

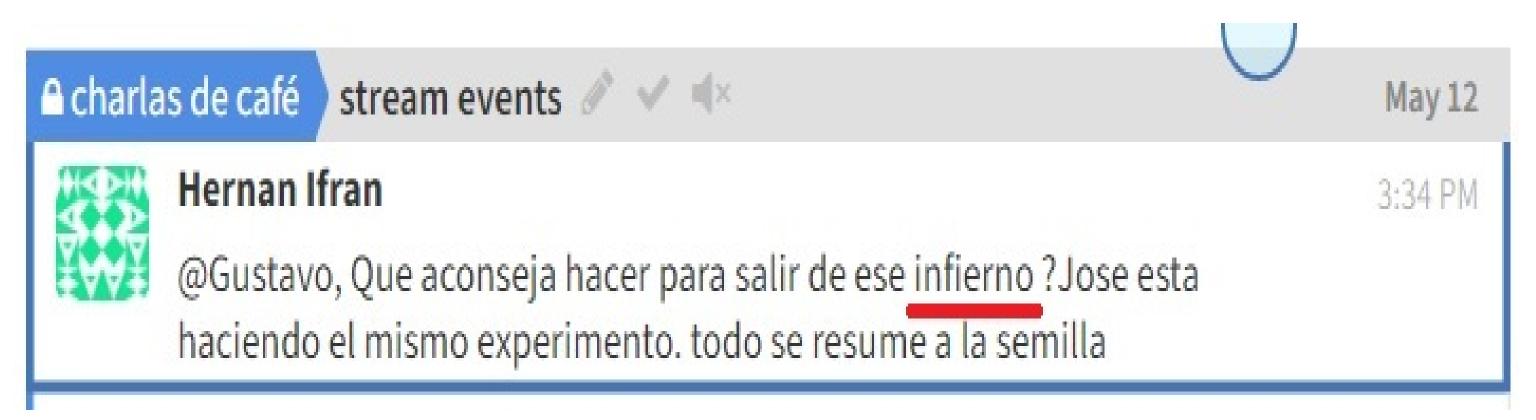
\triangle	Team	Members	Score	Entries	Last	Join
^ 79	fermonzon1		57.58759	59	2d	
^ 38	joha noval		56.94473	74	8d	
^ 52	Anto Caccianini1		56.89759	88	3d	
	↑ 79 ↑ 38	▲ 79 fermonzon1 ▲ 38 joha noval	▲ 79 fermonzon1	▲ 79 fermonzon1 ⑤ 57.58759 ▲ 38 joha noval ⑤ 56.94473	▲ 79 fermonzon1 ⑤ 57.58759 59 ▲ 38 joha noval ⑤ 56.94473 74	▲ 79 fermonzon1 57.58759 59 2d ▲ 38 joha noval 56.94473 74 8d

Motivación catástrofes Private Leaderboard

82	→ 75	MarianoD Marchetta	51.34326	324	2d
83	→ 62	Anita Ona	50.72182	129	7d
84	▼ 51	Verónica García Río	50.23753	333	3d
85	4 9	Damian Quiroga	50.03182	2	1mo
86	- 43	Ignacio Dottore	49.55610	125	11h



Motivación semillas



Si esperáramos a que finalice la competencia veríamos desconcertantes comentarios en Zulip como los que siguen

"Nunca termine de entender cuál fue mi mejor modelo y que podría haber hecho para que sea mejor."

"Nunca termine de entender cuál fue mi mejor modelo y que podría haber hecho para que sea mejor."

"...da la sensación de que en realidad estuvimos todo el tiempo en un casino jugando a la ruleta."

"Nunca termine de entender cuál fue mi mejor modelo y que podría haber hecho para que sea mejor."

"...da la sensación de que en realidad estuvimos todo el tiempo en un casino jugando a la ruleta."

"de la nada un modelo al que le **apostas** todo no sirve para nada."

Un alumno de mitad de tabla propone

"Capaz se me ocurre que los primeros puestos nos expliquen directo que hicieron, para aprender."

Un alumno de mitad de tabla propone

"Capaz se me ocurre que los primeros puestos nos expliquen directo que hicieron, para aprender."

Un integrante del equipo ganador, responde "Si supiera, te lo diría."

Un alumno de mitad de tabla propone

"Capaz se me ocurre que los primeros puestos nos expliquen directo que hicieron, para aprender."

Un integrante del equipo ganador, responde "Si supiera, te lo diría."

El otro integrante del equipo ganador

"Del Público al Privado subimos 42 posiciones, me cuesta entender por que se produjo tanta diferencia"

- "a mi me gustaría entender todas las situaciones, no solo los primeros puestos:
 - Los q estaban en el primer puesto en el público pero cayeron muchos puestos en el privado
 - Los que estaban abajo en el público pero en el privado subieron muchos puestos"

- "a mi me gustaría entender todas las situaciones, no solo los primeros puestos:
 - Los q estaban en el primer puesto en el público pero cayeron muchos puestos en el privado
 - Los que estaban abajo en el público pero en el privado subieron muchos puestos"

 "realmente me cuesta expresar lo mucho que me he esforzado, y la poca esperanza que tengo de encontrar una solución verdadera (y no depender únicamente del azar dentro de un margen de error)"

"... no puedo conectar todo el análisis hecho con los resultados de Kaggle."

"... no puedo conectar todo el análisis hecho con los resultados de Kaggle."

"Me voy a quedar con la imagen del Publico!!! (Ojos que no ven....)"

"... no puedo conectar todo el análisis hecho con los resultados de Kaggle."

"Me voy a quedar con la imagen del Publico!!! (Ojos que no ven....)"

"Yo tuve una gran frustración al ver en el privado la verdad, sigo pensando hoy qué métodos podría haber utilizado para que las señales, por las que elegí el que elegí, me haya dado el correcto."

"a pesar que las ultimas dos semanas le dediqué todo mi tiempo libre, me decepcionaron mis resultados en el Private. Pero lo tomo como un aprendizaje...

Lo que me desvela es : en modelos de mi trabajo ¿cómo reducir la variabilidad de la predicción?, ya que seguramente me está sucediendo y recién esta materia me abrió los ojos. ¿En cuántos modelos habré tenido mala suerte por el azar?"

Motivación

nombres de equipos Kaggle otros años

Monos que apretan palancas



•Team **Suerte** y Overfitting

¿Cuánto puede variar la ganancia de un modelo?

¿Qué relación hay entre la ganancias medidas en 5-fold cross validation, Public y Private?

¿Cuánto puede variar la ganancia de un modelo?

¿Qué relación hay entre la ganancias medidas en 5-fold cross validation, Public y Private?

¿ Si un modelo M1 da más ganancia que M2 en 5-fold cross validation, también es mejor en el Public Leaderboard? ¿ y en el Private?

En el mundo real, sin el beneficio de Kaggle ¿Qué relación hay entre la ganancias medidas en 5-fold cross validation y las ganancias que obtendré en el futuro? En el mundo real, sin el beneficio de Kaggle ¿Qué relación hay entre la ganancias medidas en 5-fold cross validation y las ganancias que obtendré en el futuro?

¿ Si un modelo M1 da más ganancia que M2 en 5-fold cross validation en entrenamiento, también es mejor M1 que M2 en los datos del futuro ?

Overfitting the Leaderboard in Ernst & Young Data Science Competition 2019

And subsequently losing 8000 USD + a ticket to New York.



What Went Wrong?

It was the cornerstone of an inept data scientist, stemming from a complete lack of experience. The main ingredient of a classic shake-up between public and private leaderboard score:

We did not trust our cross-validation score

— and the result was catastrophic. We had overfitted the public leaderboard.

5-fold cross validation en los datos de entrenamiento, ¿resuelve realmente el problema?

Capítulo 2 Experimentación

Para entender lo que está sucediendo se realizaron dos experimentos

en meses antiguos del dataset utilizando una función de ganancia menor

al final se compararán dos modelos

Experimento Modelo Simple

Experimento Modelo Simple Objetivo

Objetivo: analizar la variabilidad de un modelo *fijo* a partir de muy buenos parámetros que entrena tan solo en un único mes, noviembre-2020 Finalmente, se observa el comportamiento de **volver a generar cada vez** el modelo con 125 distintas semillas en:

- 5-fold cross validation
- Public Leaderboard
- Private Leaderboard

Experimento Modelo Simple jugando con la semilla

¿Cuál es la variabilidad de las ganancias de LightGBM si se entrena en el mismo dataset, se dejan los hiperparámetros fijos, pero se cambia unicamente la semilla (que sería lo mismo que reordenar al azar las columnas del dataset)?

o sea, ¿Cuál es la variabilidad inherente de un modelo, generado en este caso con LightGBM ?

Debido al hiperparámetro feature_fraction entrenar con distinta semilla genera distintos modelos en LightGBM

Experimento Modelo Simple resultados

Cambiando las semillas las corridas jamás dan la misma ganancia

- ni en 5-fold cross validation,
- ni en el Public
- ni en el Private Leaderboard

Se graficará la función de distribución de probabilidad de esa variable aleatoria (la ganancia).

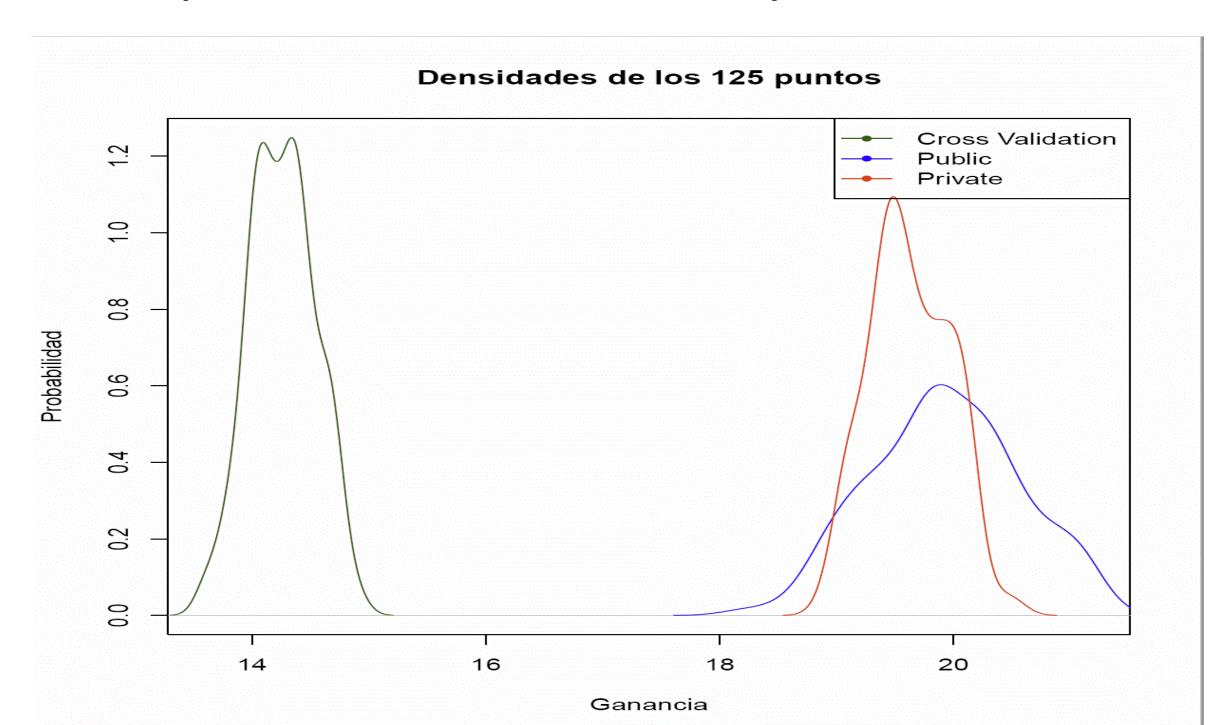
Experimento Modelo Simple resultados

Estamos entrenando en noviembre-2020, el futuro es enero-2021, y la función ganancia es menor a la usada en el curso de 2023
Por lo anterior veremos ganancias inferiores, pero es solo un tema de escala.

Experimento Modelo Simple resultados

Ganancia	mean	sd
Cross Validation	14.3	0.28
Public	19.9	0.63
Private	19.6	0.34

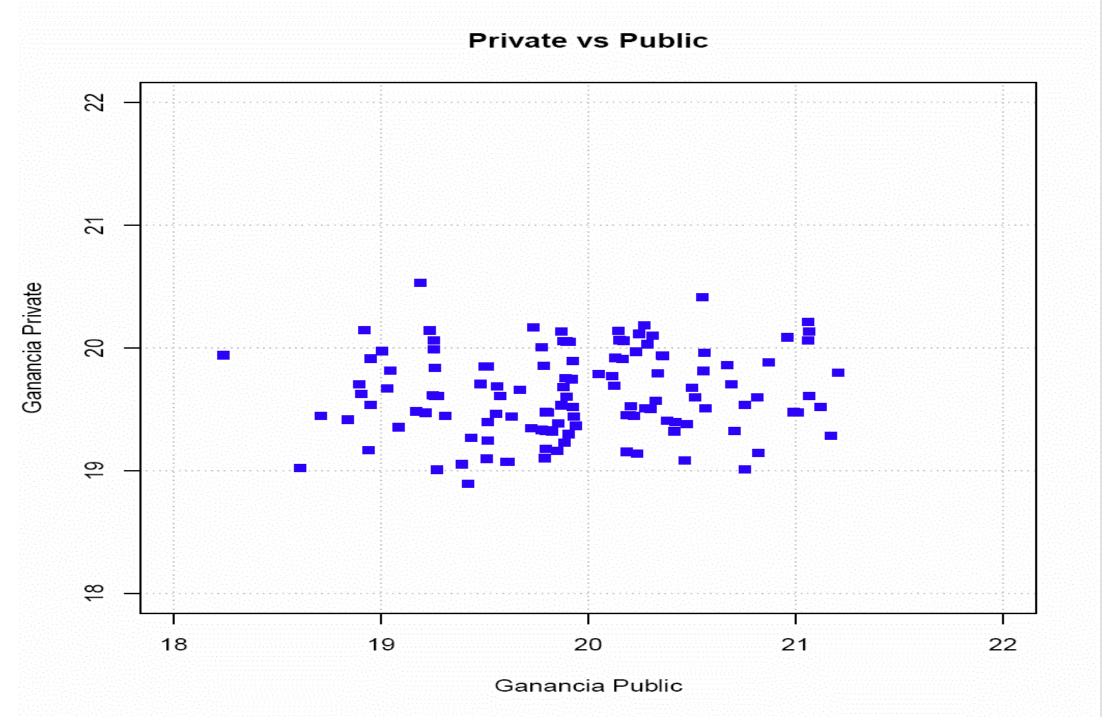
Experimento Modelo Simple resultados

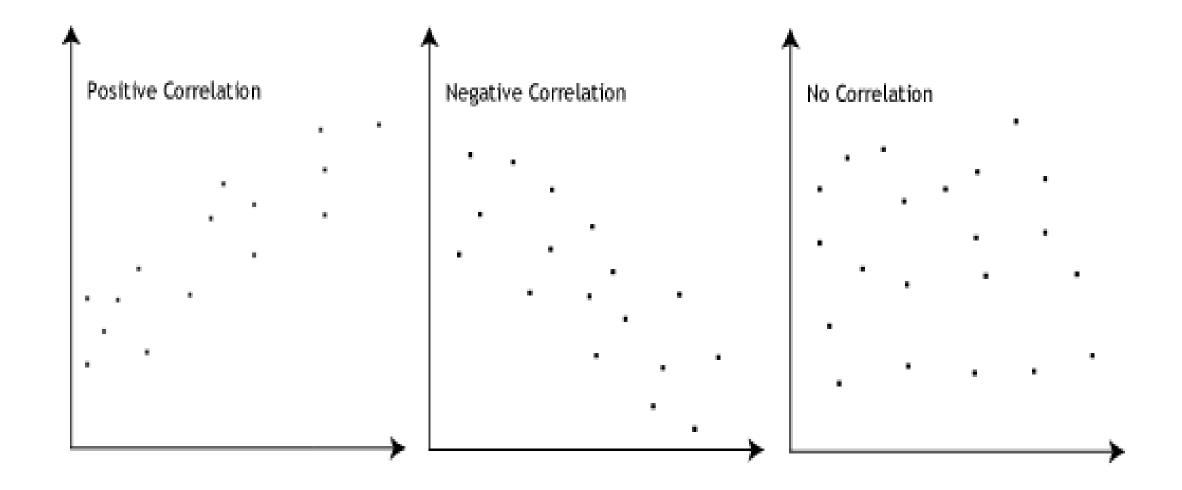


- En el mes de entrenamiento hubo menos BAJA+2 por eso las ganancias son menores, en el entorno a los 15 M
- En el mes de aplicación hubo más BAJA+2, y las ganancias son mayores.
- La varianza de los datos depende de la cantidad de registros del dataset
- #Public < #Private < #mes_completo

¿El Public es buen predictor de cómo me va a ir en el Private? ¿La mejor semilla del Public da el mejor resultado en el Private?

Experimento Modelo Simple aleatoriedad





Estamos en el caso de "No Correlation"

¿El Public es buen predictor de cómo me va a ir en el Private?

Definitivamente no!

La mejor ganancia del Public no es la mejor ganancia del Private

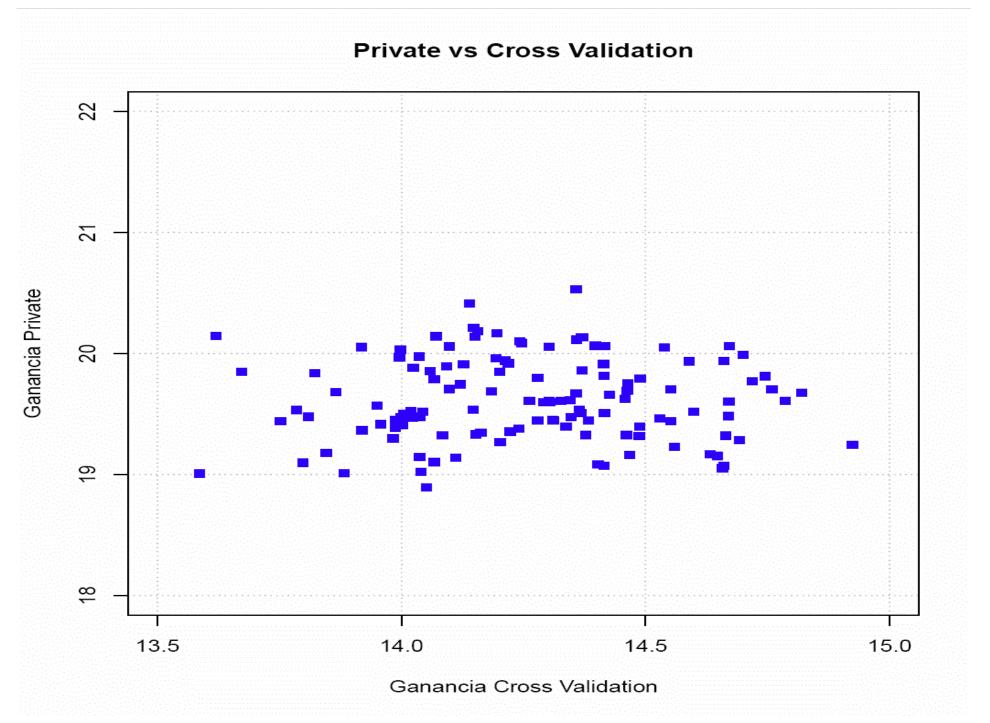
¿La mejor semilla del Public da el mejor resultado en el Private? No !

El Public Leaderboard no sirve como señal (para este nivel de detalle)

La bibliografía dice enfáticamente no confiar en el Public Leadeboard

> pero indica confiar en el 5-fold Cross Validation

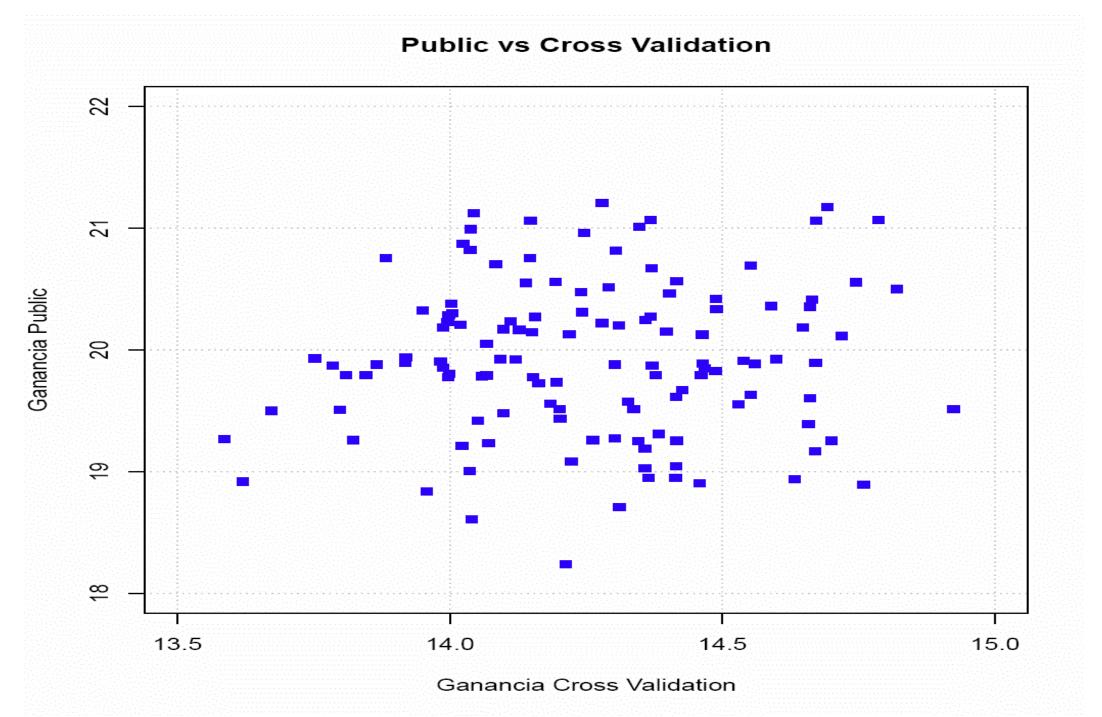
Experimento Modelo Simple aleatoriedad



¿5-fold cross validation es buen predictor de como me va a ir en el Private ?

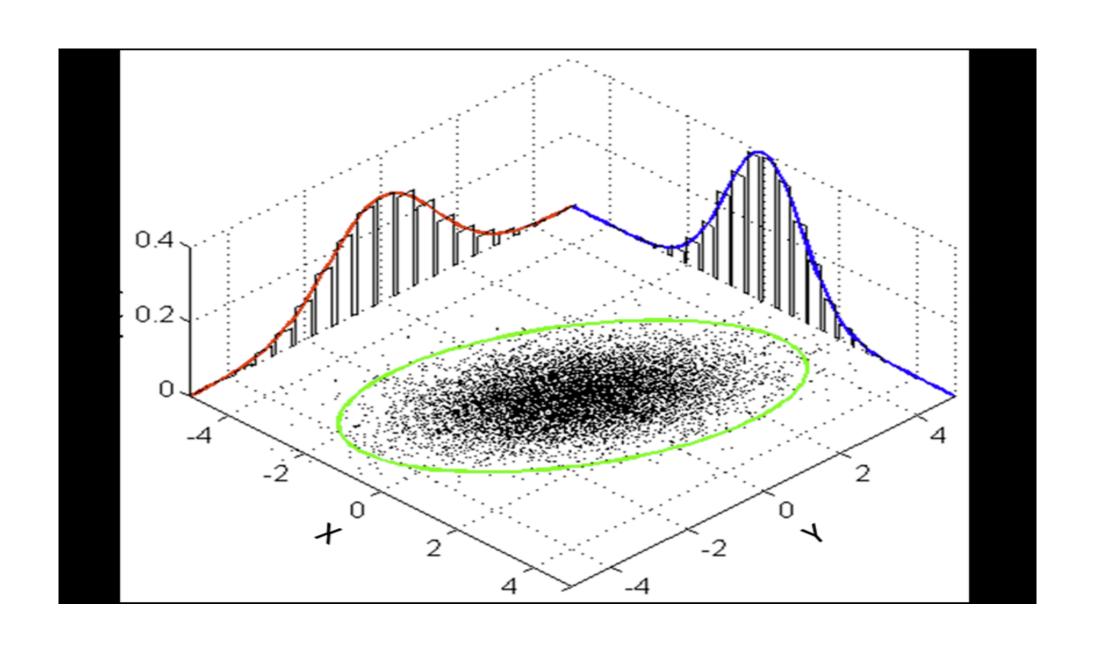
Para total sorpresa : NO!

Experimento Modelo Simple aleatoriedad



¿ Cómo interpretar lo que estamos viendo?

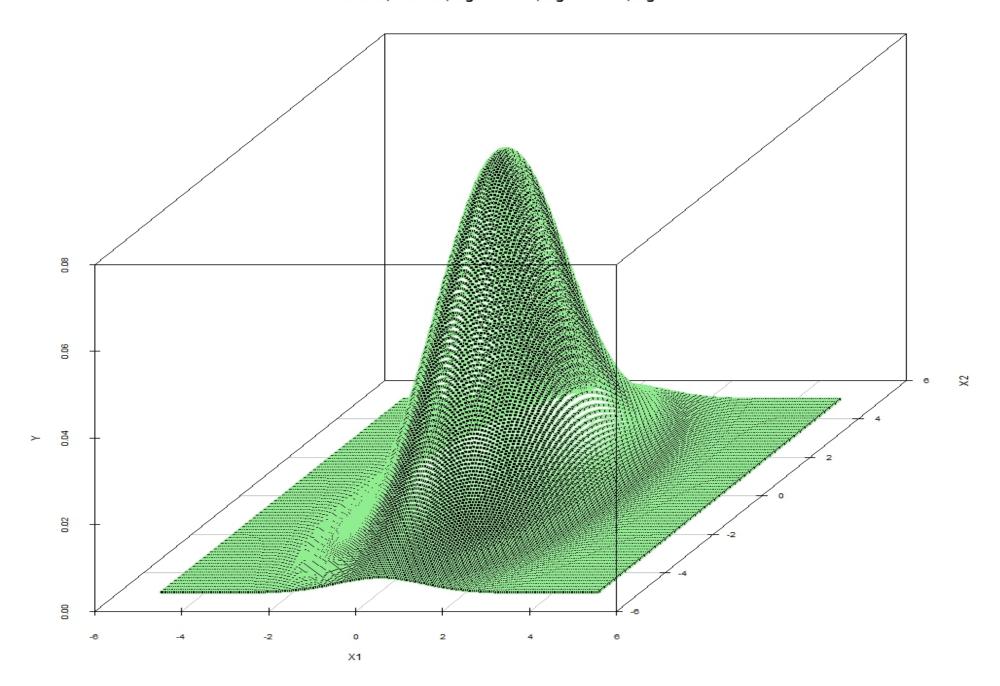
Experimento Modelo Simple aleatoriedad



Experimento Modelo Simple

aleatoriedad

3D (scatterplot3d) Plot of a Bivariate Gaussian Distribution with mu.1=0 , mu.2=0 , sigma.11= 1 , sigma.22= 4 , sigma.12= 0



Experimento Modelo Simple conclusión

- •Los resultados 5-fold cross validation, Public y Private poseen una distribución *quasi* normal, <u>y en caso que solo cambie la semilla son independientes entre si</u>.
- •No se puede saber si se va a estar por encima o por debajo de la media en los datos del futuro, por más que para el dataset que conozco la clase ese semilla tenga una ganancia por encima de la media.

¿Cómo comparo dos modelos distintos, que fueron generados con datasets e hiperparámetros diferentes?

Experimento Modelo Power

Experimento Modelo Power Objetivo

Objetivo: analizar la variabilidad de un modelo *fijo* que utiliza diez meses [202001, 202011] – 202006 dataset con lag1 y delta1 Finalmente, se observa el comportamiento de **regenerar** el modelo con 125 semillas en:

- 5-fold cross validation
- Public Leaderboard
- Private Leaderboard

Experimento Modelo Power

Al dataset original ahora se le agregan los lags y delta lag de orden 1, además de corregir las variables *rotas*. Se buscan los hiperparámetros óptimos del LightGBM con una Optimización Bayesiana, train=[202001,202010] test=[202011]

Finalmente, se observa el comportamiento de **regenerar** el modelo con distintas semillas en:

- Testing , [202011]
- Public Leaderboard
- Private Leaderboard

Experimento Modelo Power dataset

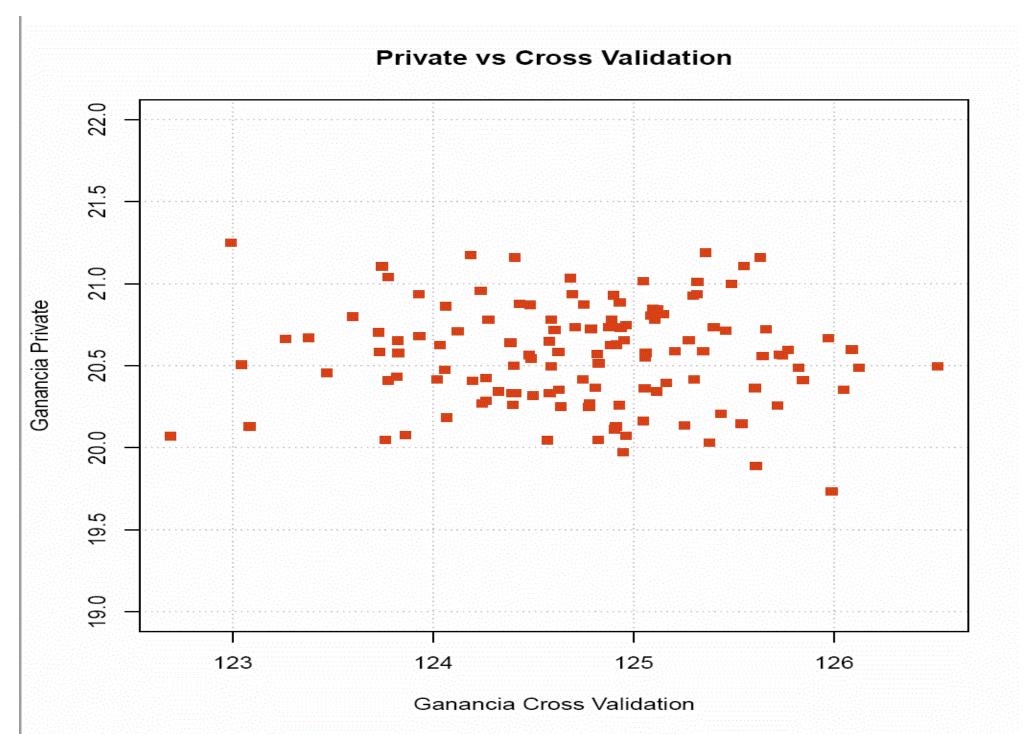
Para una variable, el lag de orden 1, lag1 es el valor de esa variable el mes anterior. Si el mes anterior el registro no está en la base de datos, se asigna NA.

El delta1 para una variable es el valor en el mes actual de la variable menos su valor el mes anterior.

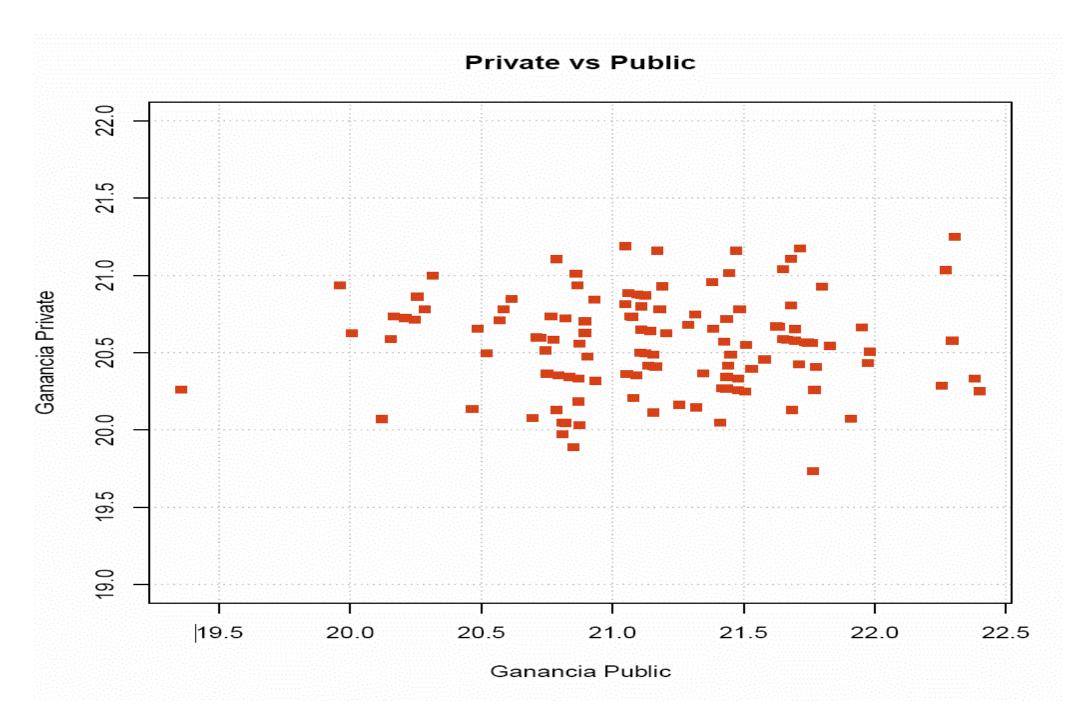
Experimento Modelo Simple vs Power

Métrica	Modelo Simple	Modelo Power 10 meses
Cross Validation	14.3	124.7
Public	19.9	21.2
Private	19.6	20.6

Modelo Power aleatoriedad

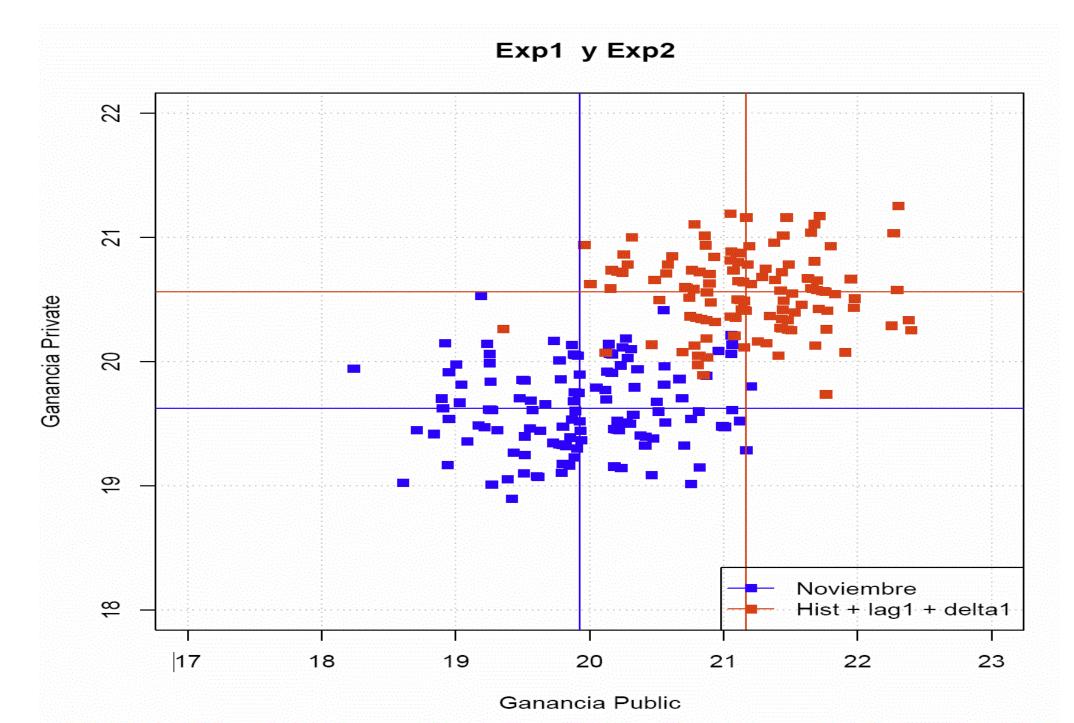


Modelo Power aleatoriedad



Finalmente, la comparación entre los dos experimentos

Modelo Power (rojo) vs Modelo Simple (azul)



Conclusion General:

El Modelo Power (color rojo) es mejor que el Modelo Simple (color azul)

Sin embargo, no se cumple que todas las ganancia del modelo rojo dan mejores ganancias que el modelo azul.

En en el ejemplo eso es verdad para el 92% de los casos.

Conclusion General:

La comparación entre dos modelos predictivos M1 y M2 viene acompañada de una probabilidad.

Siempre se debe decir por ejemplo
metrica(M2) > metrica(M1)

con una probabilidad p

en el caso que p sea cercana a 0.5 hace falta un mayor número de observaciones para determinar el sentido de la desigualdad.

Capítulo 3 Test Estadístico

Comparación estadística

Demsar, Janez. Statistical Comparisons of Classifiers over Multiple Data Sets, Journal of Machine Learning Research 7 (2006) 1–30, 2006

```
Wilcoxon signed rank test
en lenguaje R
wilcox.test( ganancias1, ganancias2)
```

Comparación estadística

En los Experimentos Colaborativos se presentó la dificultad de derminar si el método A era superior al método B, dando cada uno de ellos una ganancia distinta para cada semilla, curvas que se cruzaban, etc

¿ Cuántas semillas es necesario utilizar para derminar si un modelo es superior a otro? Evidentemente es un número menos a 125 semillas (al menos para este caso) Modelo Simple, ganancias 20.55 19.78

Modelo Power, ganancias 21.95 20.29

```
> wilcox.test( c(20.55, 19.78), c(21.95, 20.29) )
        Wilcoxon rank sum exact test
data: c(20.55, 19.78) and c(21.95, 20.29)
W = 1, p-value = 0.6667
alternative hypothesis: true location shift is not equal to 0
```

qty	Modelo Simple	Modelo Power	Wilcoxon p-value
1	20.55	21.95	1.000
2	19.78	20.29	0.667
3			
4			
5			
6			
7			
8			
9			
10			
11			
12			
13			

Modelo Simple, ganancias 20.55 19.78 20.76

Modelo Power, ganancias 21.95 20.29 20.87

```
> wilcox.test( c(20.55, 19.78, 20.76), c(21.95, 20.29, 20.87) )
       Wilcoxon rank sum exact test
data: c(20.55, 19.78, 20.76) and c(21.95, 20.29, 20.87)
W = 2, p-value = 0.4
alternative hypothesis: true location shift is not equal to 0
```

qty	Modelo Simple	Modelo Power	Wilcoxon p-value
1	20.55	21.95	1.000
2	19.78	20.29	0.667
3	20.76	20.87	0.400
4			
5			
6			
7			
8			
9			
10			
11			
12			
13			

qty	Modelo Simple	Modelo Power	Wilcoxon p-value
1	20.55	21.95	1.000
2	19.78	20.29	0.667
3	20.76	20.87	0.400
4	18.95	21.05	0.114
5			
6			
7			
8			
9			
10			
11			
12			
13			

qty	Modelo Simple	Modelo Power	Wilcoxon p-value
1	20.55	21.95	1.000
2	19.78	20.29	0.667
3	20.76	20.87	0.400
4	18.95	21.05	0.114
5	19.62	21.68	0.032
6			
7			
8			
9			
10			
11			
12			
13			

5 valores de
 cada experimento
 alcanzan para
 determinar
 gan(Power) > gan(Simple)

p-value < 0.05

Con 5 semillas alcanzaba para darnos cuenta que el *Modelo Power* es superior a *Modelo Simple*

cuando el p-value se hizo menor a 0.05

qty	Modelo Simple	Modelo Power	Wilcoxon p-value
1	20.55	21.95	1.000
2	19.78	20.29	0.667
3	20.76	20.87	0.400
4	18.95	21.05	0.114
5	19.62	21.68	0.032
6	20.25	20.87	0.009
7			
8			
9			
10			
11			
12			
13			

5 valores de
 cada experimento
 alcanzan para
 determinar
 gan(Power) > gan(Simple)

qty	Modelo Simple	Modelo Power	Wilcoxon p-value
1	20.55	21.95	1.000
2	19.78	20.29	0.667
3	20.76	20.87	0.400
4	18.95	21.05	0.114
5	19.62	21.68	0.032
6	20.25	20.87	0.009
7	19.79	21.51	0.002
8			
9			
10			
11			
12			
13			

5 valores de
cada experimento
alcanzan para
determinar
gan(Power) > gan(Simple)

qty	Modelo Simple	Modelo Power	Wilcoxon p-value
1	20.55	21.95	1.000
2	19.78	20.29	0.667
3	20.76	20.87	0.400
4	18.95	21.05	0.114
5	19.62	21.68	0.032
6	20.25	20.87	0.009
7	19.79	21.51	0.002
8	19.24	20.79	0.0006
9			
10			
11			
12			
13			

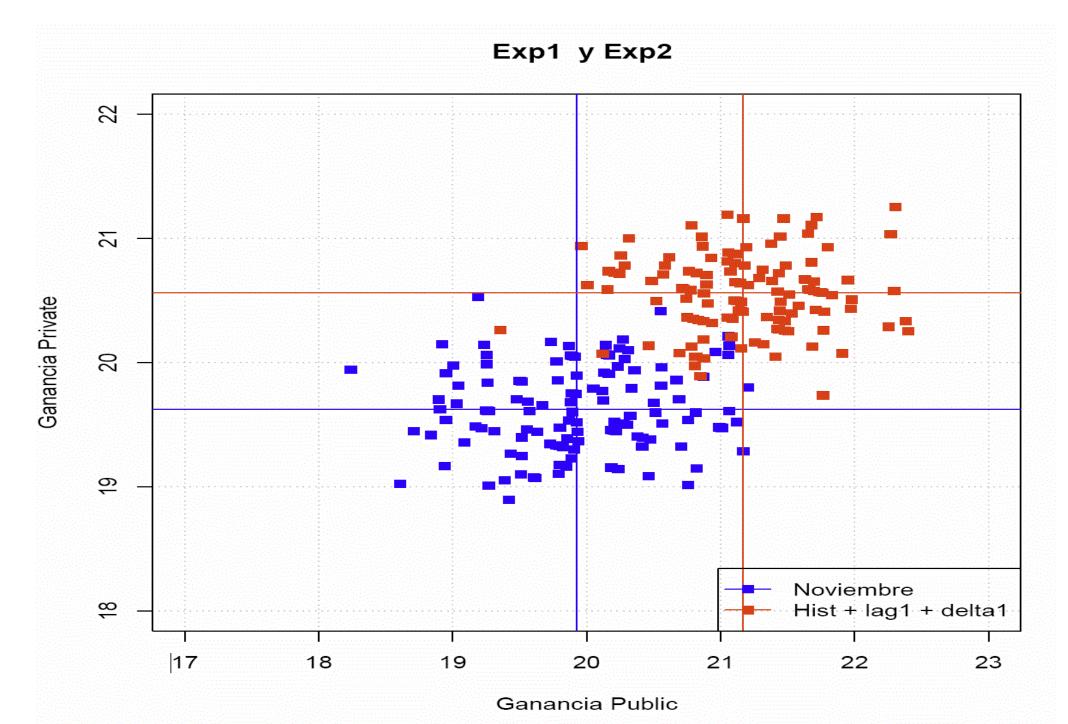
5 valores de cada experimento alcanzan para determinar gan(Power) > gan(Simple)

qty	Modelo Simple	Modelo Power	Wilcoxon p-value
1	20.55	21.95	1.000
2	19.78	20.29	0.667
3	20.76	20.87	0.400
4	18.95	21.05	0.114
5	19.62	21.68	0.032
6	20.25	20.87	0.009
7	19.79	21.51	0.002
8	19.24	20.79	0.0006
9	20.31	20.91	0.002
10	18.91	21.44	0.0005
11	20.22	20.59	0.0003
12	20.87	21.32	0.0001
13	19.93	21.48	0.00003

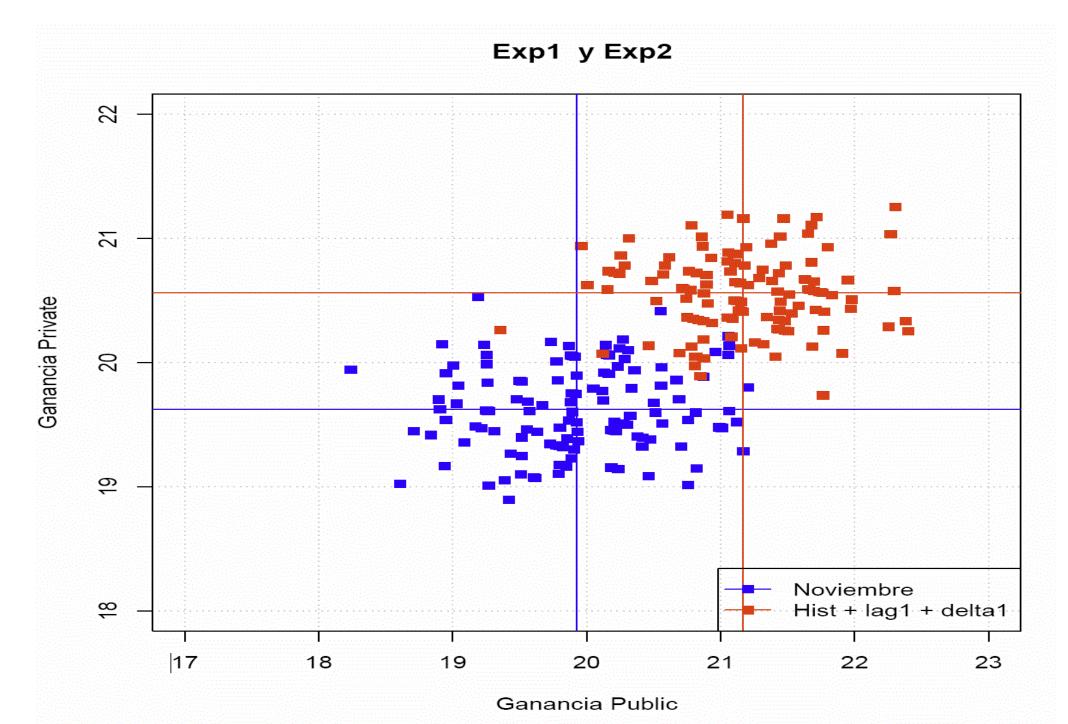
5 valores de
 cada experimento
 alcanzan para
 determinar
 gan(Power) > gan(Simple)

El p-value no necesariamente es monótonamente decreciente en el paso 9 aumentó con respecto al paso 8

Modelo Power (rojo) vs Modelo Simple (azul)



Modelo Power (rojo) vs Modelo Simple (azul)



The End

¿ The End?

¿ Vamos a permitir, en <u>esta</u> asignatura que un test, una receta de la Estadística Clásica tenga la última palabra ?

Capítulo 4 Semillerío

Este no es el fin de la historia!

Porque aunque el modelo entrenado en datos históricos con el feature engineering, el *Modelo Power*, aún puedo obtener de 19.74 a 21.25 en el Private Leaderboard

Estoy expuesto a demasiada variabilidad

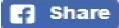
La teoría dice que debo ensamblar modelos lo más distintos posibles, evitar la endogamia

A Gentle Introduction to Ensemble Diversity for Machine Learning

by Jason Brownlee on May 14, 2021 in Ensemble Learning









Ensemble learning combines the predictions from machine learning models for classification and regression.

We pursue using ensemble methods to achieve **improved predictive performance**, and it is this improvement over any of the contributing models that defines whether an ensemble is good or not.

A property that is present in a good ensemble is the diversity of the predictions made by contributing models. Diversity is a slippery concept as it has not been precisely defined; nevertheless, it provides a useful practical heuristic for designing good ensemble models.

In this post, you will discover ensemble diversity in machine learning.

After reading this post, you will know:

- A good ensemble is one that has better performance than any contributing model.
- Ensemble diversity is a property of a good ensemble where contributing models make different errors for the same input.
- Seeking independent models and uncorrelated predictions provides a guide for thinking about and introducing diversity into ensemble models.



Episode 2.6 Apotheosis

Once we have broken free of the prejudices of our own provincially limited ecclesiastical, tribal, or national rendition of the world archetypes, it becomes possible to understand that the supreme initiation is not that of the local motherly fathers, who then project aggression onto the neighbors for their own defense.

Joseph Campell, The Hero with a Thousand Faces, 1949

Sin embargo, como la naturaleza de esta asignatura es cuestionar ideas que otros pregonan como ciertas, viene un experimento que no se nos puede negar, en lugar de calcular la ganancia para cada modelo y encomendarme a la "suerte" ya que ni Testing con 5-fold cross validation ni el Public Leaderboard son una señal

Ensemble Semillerios

Método Semillerio

Entreno con los mismos hiperparámetros, cambiando solamente la semilla en cada iteración

y PROMEDIO las probabilidades de los modelos

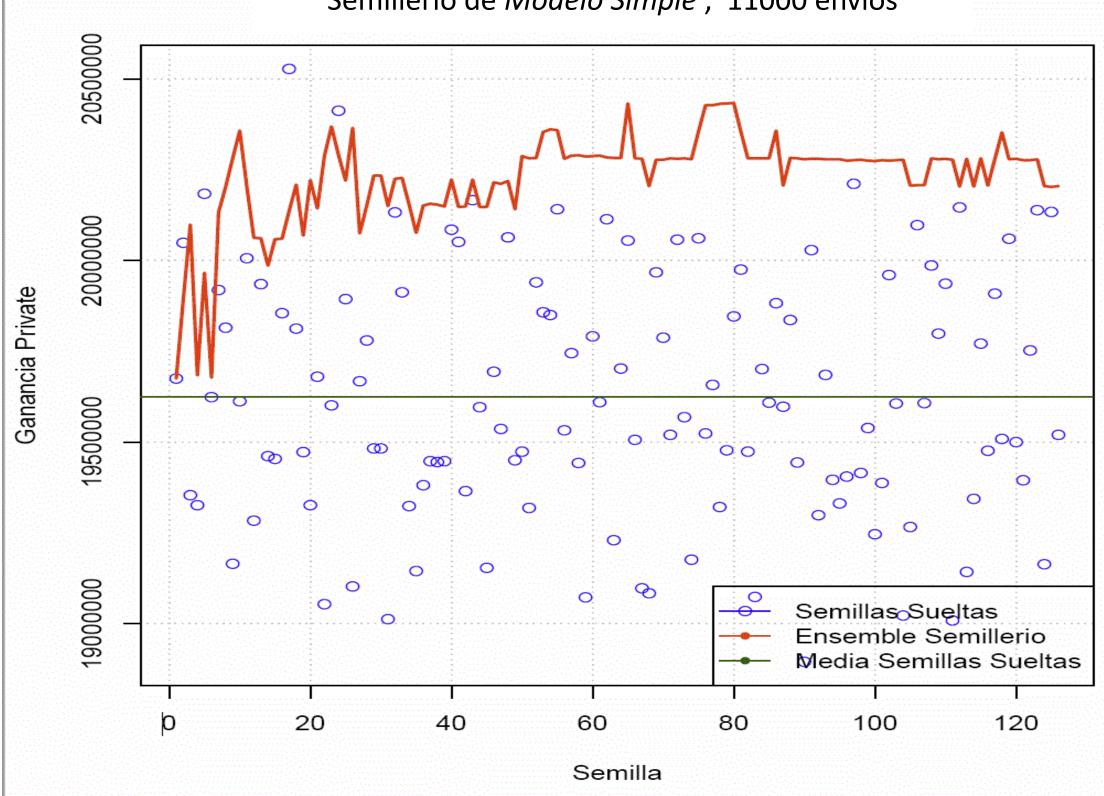
src/workflow-semillerio/z799_ZZ_final_semillerio.r

Método Semillerio

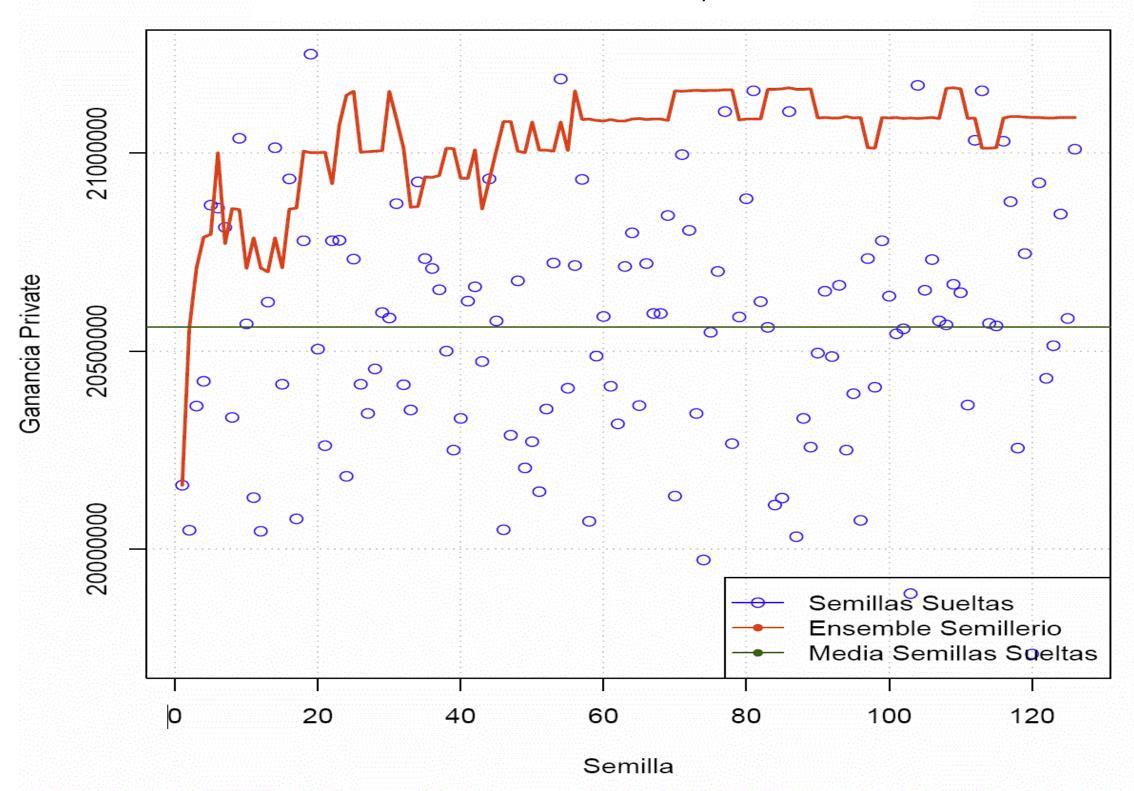
Es un ensemble de LightGBMs, donde lo único que cambio es la semilla.

No hay diversidad en esos modelos, son "clones". ¿Cómo funcionará esto que va contra las buenas prácticas de la diversidad de los *modelos base* en un ensemble?

Semillerio de *Modelo Simple* , 11000 envíos



Semillerio de *Modelo Power* , 11000 envíos



El ensemble de LightGBMs Supera al 95% de los LightGBMs individuales

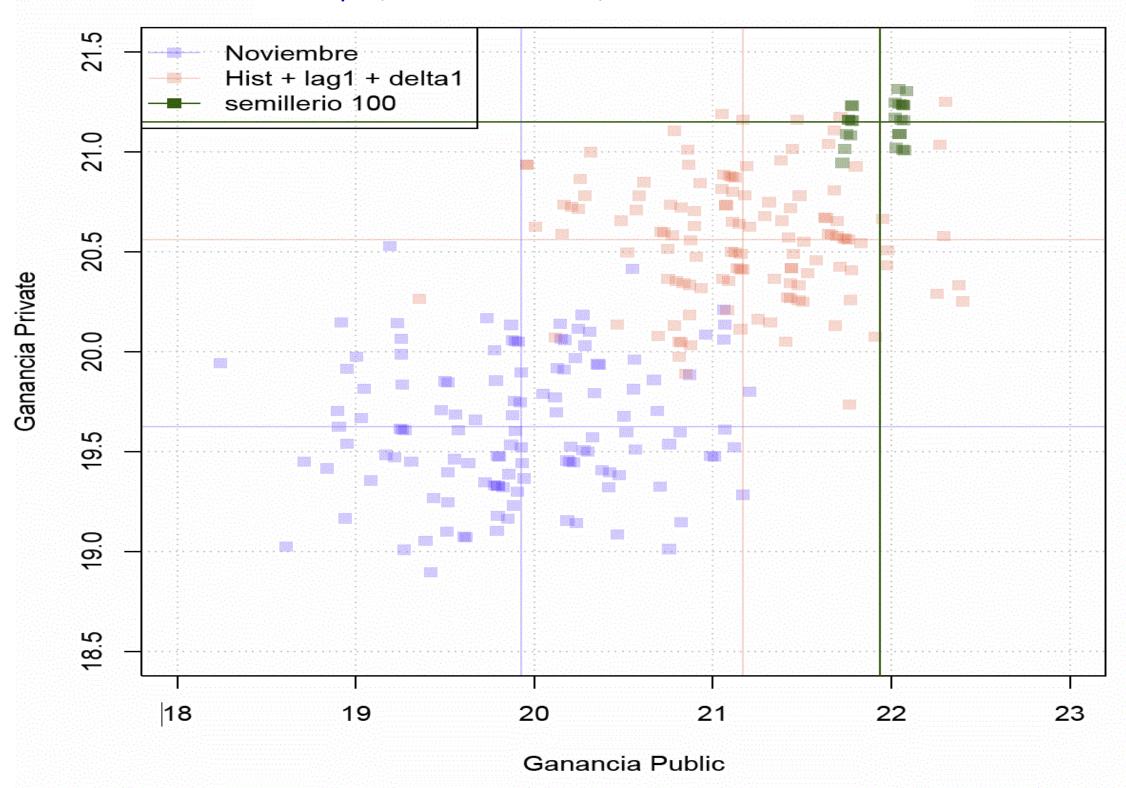
Efectos de la ensemble de modelo final **promediando** sus probabilidades Private Leaderboard

	Modelo Simple		Modelo Power	
modelos acumulados	ganancia media	desvio estandar	ganancia media	desvio estandar
1	19.64	0.35	20.7	0.27
5	20.04	0.23	21.0	0.19
10	20.09	0.20	21.1	0.15
20	20.19	0.16	21.1	0.10
50	20.21	0.10	21.2	0.06

^{\$ 500}k adicionales en Experimento DOS, de 20.7 a 21.2 , solo con semillerio, nada mal ... y principalmente con mucha menos varianza

a continuación, para el *Modelo Power* se generaron 20 semillerios, cada uno con 100 semillas

2000 nuevas semillas 2000 LightGBMs, agrupados en packs de a 100 cada pack es llamado "Semillerio"



Los puntos verdes,

Semillerio-100 de Modelo Power

no solo tiene mayor ganacia promedio

que Modelo Power

sino que además, sensiblemente menor varianza

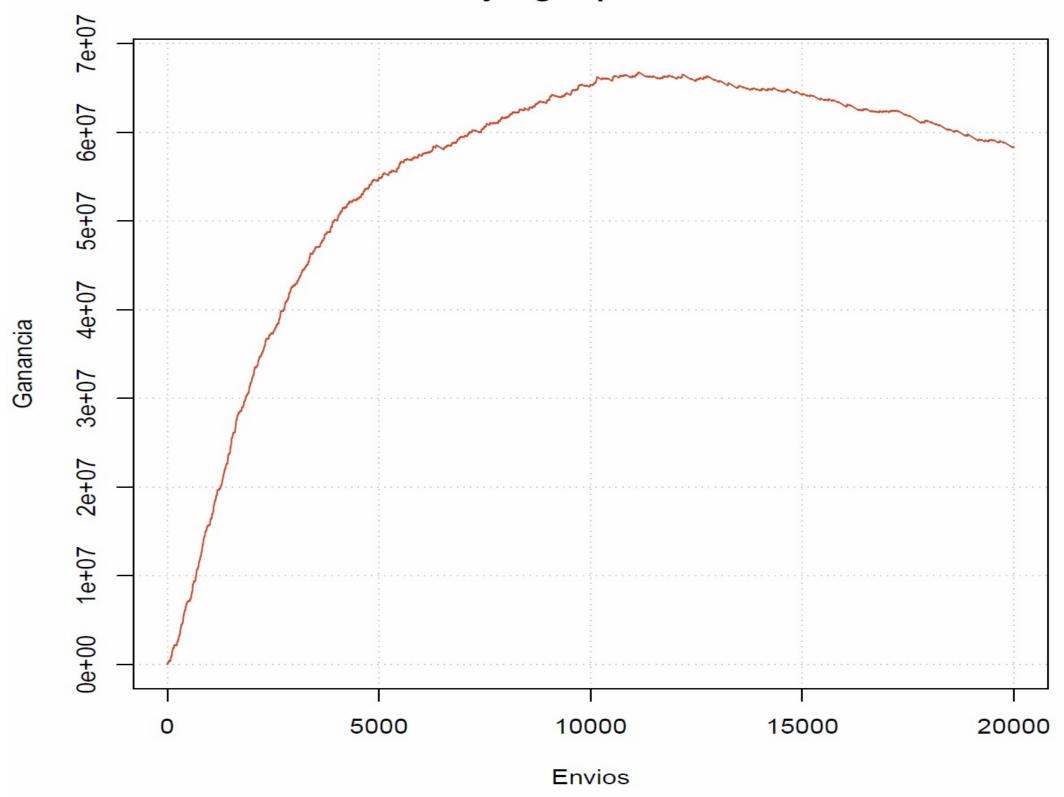
Ya no van a haber sorpresas en datos nuevos No van a haber caídas ni subidas tan pronunciadas en el Private Leaderboard No era nada intuitivo que generar un ensemble de LightGBM's cambiando solo la semilla iba a generer un modelo superador

Incluso, es una idea tan hereje que nadie en su sano juicio perdía tiempo en probarla!

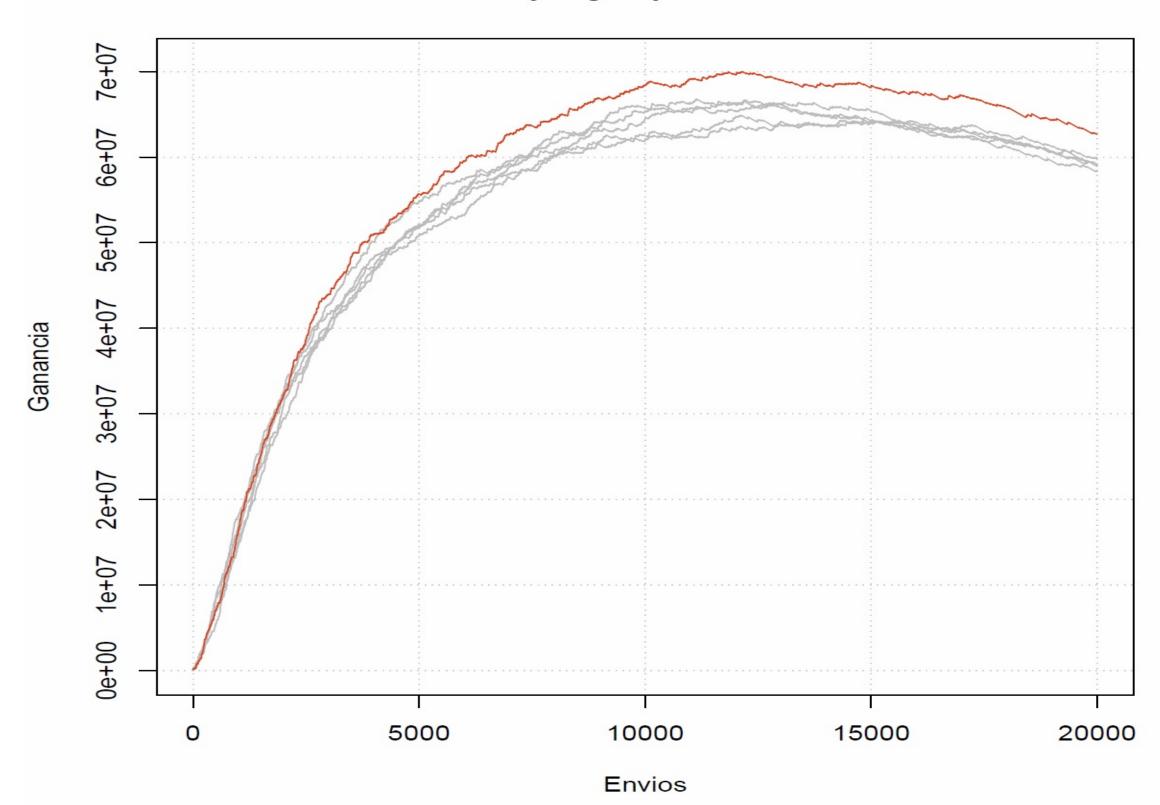
Adicionalmente, es muy sencillo implementar Semillerio

¿Cómo se ve esto en nuestros datos actuales? un modelo entrenado en 18 meses aplicado a 202107

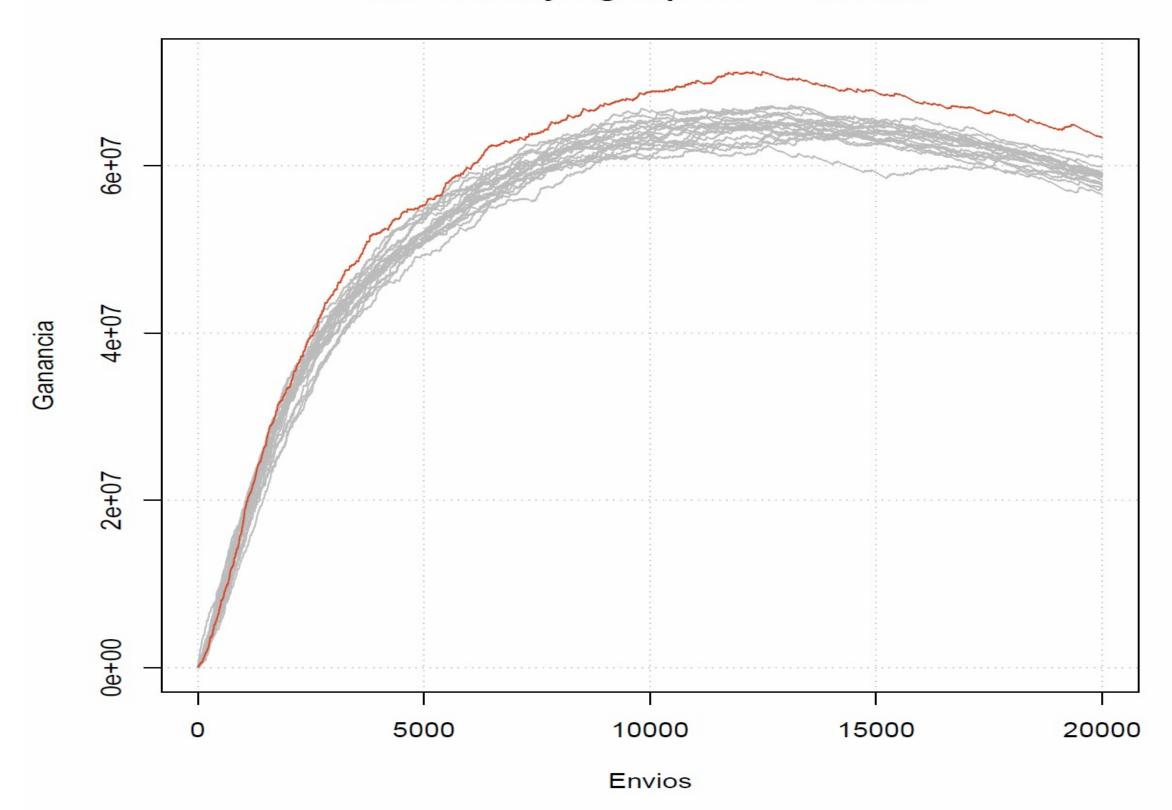
sem: 1 Mejor gan prom = 66279460



sem: 5 Mejor gan prom = 69496112



sem: 20 Mejor gan prom = 70727857



La curva roja es un "Ensemble Semillerio" es decir, es un modelo predictivo nuevo

No confundir con la curva Ganancia Promedio, que era simplmente el promedio de las ganancias, y no era un modelo predictivo

¿Cuál es el siguiente escalón?

Hibridación de Semillerios ...

The End