

Ensamblajes de modelos

Teórica 11/10

- ☐ <https://drive.google.com/file/d/1asLg1x5518lr-bevy48f7y1nAkyQpbm4/view>
- ☐ <https://drive.google.com/file/d/1XNXcL-RzXLHkx0t4QBqd9BRGzuquSw8k/view>

Práctica 13/10

- ☐ Random Forest y Boosting
https://drive.google.com/file/d/1NUc8PT9T193Fzrb6_hLvxe3sF6oRV1ZC/view
- ☐ Voting y Stacking
https://drive.google.com/drive/folders/1isWl3TYwyhvDTY17nw-Ded7-Z2zPY_po

- Bias (sesgo)
- Varianza
- Underfitting y overfitting
- Bagging
- AdaBoost
- Gradient Boost
- XGBoost
- Ensamblajes Híbridos
 - Voting
 - Stacking
 - Cascading

La sabiduría de las multitudes

En 1906 Galton (primo de Darwin) quería demostrar lo “bruta” que era la gente en base a un experimento. Este constaba de adivinar el peso de una vaca en una exposición.

Cada participante debía poner su predicción en un buzón, aquel que más se acercase se la llevaría a la casa.

Su hipótesis era que sólo podría ser bueno aquel que estuviese formado y tuviese experiencia en el rubro, el resto serían muy malos, tanto que aún promediando todas sus predicciones estarían muy lejos del valor real y del participante “sabio”

Sin embargo, sucedio todo lo contrario. Cuando se promediaron todas las observaciones se obtuvo un valor muy cercano al peso real.

Esto pasa porque un monton de estimadores mediocres o malos promediados pueden ser un muy buen estimador → “inteligencia colectiva”

Cada una de las personas funciona como un modelo que en principio no hace una buen predicción. Algunos por arriba, otros por debajo del valor, y promediados dan una buena predicción.

- Entrenar varios modelos, c/u sobre datos distintos.
- Cada modelo sobre-ajusta de manera diferente.
 - Cada modelo: bajo sesgo, alta varianza.
 - Por ejemplo: árboles profundos.

Bias (sesgo)

El error debido al Bias de un modelo es simplemente la diferencia entre el valor esperado del estimador (es decir, la predicción media del modelo) y el valor real.

$$Error\ Bias = Valor\ esperado - Valor\ real$$

Cuando se dice que un modelo tiene un **bias muy alto** quiere decir que el modelo es muy simple y no se ha ajustado a los datos de entrenamiento (suele ser **underfitting**), por lo que produce un error alto en todas las muestras: entrenamiento, validación y test

El error de **sesgo (bias)** es un error de “suposiciones erróneas” en el algoritmo de aprendizaje.

Un **sesgo alto** puede hacer que un algoritmo pierda las relaciones relevantes entre las características dadas y los resultados esperados (underfitting)

Varianza

La varianza de un estimador es cuánto varía la predicción según los datos que utilizemos para el entrenamiento.

La varianza es un error de sensibilidad a pequeñas fluctuaciones en el conjunto de entrenamiento.

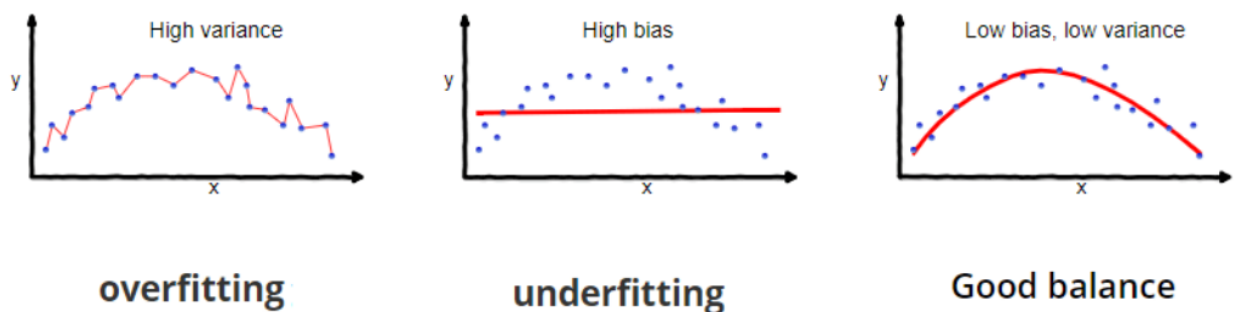
Un modelo con **varianza baja** indica que cambiar los datos de entrenamiento produce cambios pequeños en la estimación.

→ Da lo mismo entrenar con un conjunto, que con otro.

Al contrario, un modelo con **varianza alta** quiere decir que pequeños cambios en el dataset conlleva a grandes cambios en el output (suele ser **overfitting**).

→ Que cuando entrenamos un modelo, el modelo se aprende de memoria los datos que nosotros le damos. Se esta sobreajustando el modelo a los datos

Una varianza alta puede resultar de un algoritmo que modela hasta el ruido aleatorio en los datos de entrenamiento (overfitting)

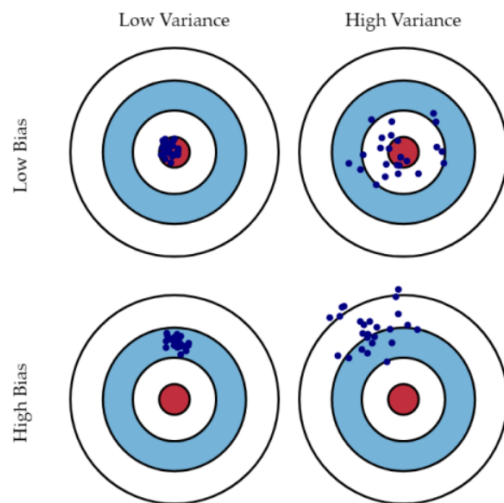


Overfitting: me aprendo los puntos de memoria. Se ajusta perfecto a los datos de entrenamiento. Pero al probar con los datos de prueba se tienen errores groseros. Al entrenar se tiene una precisión de 90% y al probar la precisión baja mucho, eso es porque está sobreentrenado.

Underfitting: el modelo no termina de ajustar. Quizás porque no es demasiado complejo el modelo. Predice mal en todos lados (no como en overfitting que predice bien entrenamiento pero mal en test)

Lo ideal es tener un buen balance: bajo sesgo y baja varianza

Sesgo y Varianza



Error debido a sesgo (o bias):

debido a diferencia entre predicción del modelo (o promedio de predicciones) y valor correcto

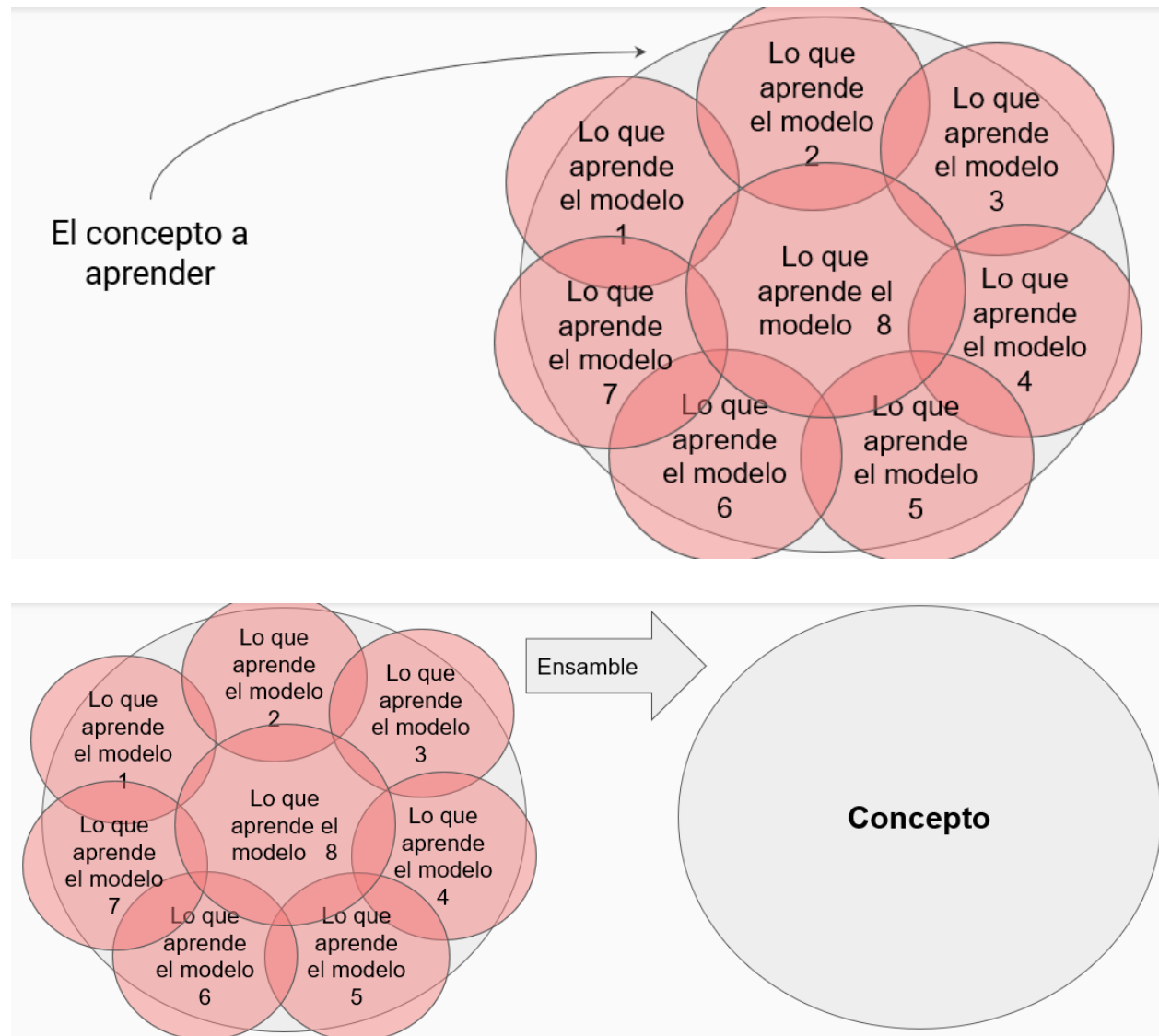
Error debido a varianza:

la variabilidad de la predicción de un modelo para unos datos dados. Cuánto varían los resultados para distintos datos.

Para disminuir el error requerimos de un método que tenga **bajo sesgo y baja varianza**.

Tener diferentes modelos, donde cada uno puede aprender una parte de ese concepto. De un set de datos complejo, puedo tener muchos modelos que aprendan pequeñas

partes diferentes, entonces cada uno puede aprender bien su parte de los datos. Ninguno puede predecir la totalidad, pero todos juntos son una buena aproximación de ese concepto, de ese modelo global que quiero entrenar.



Que hacemos una vez que tenemos entrenados todos estos modelo?

Votación:

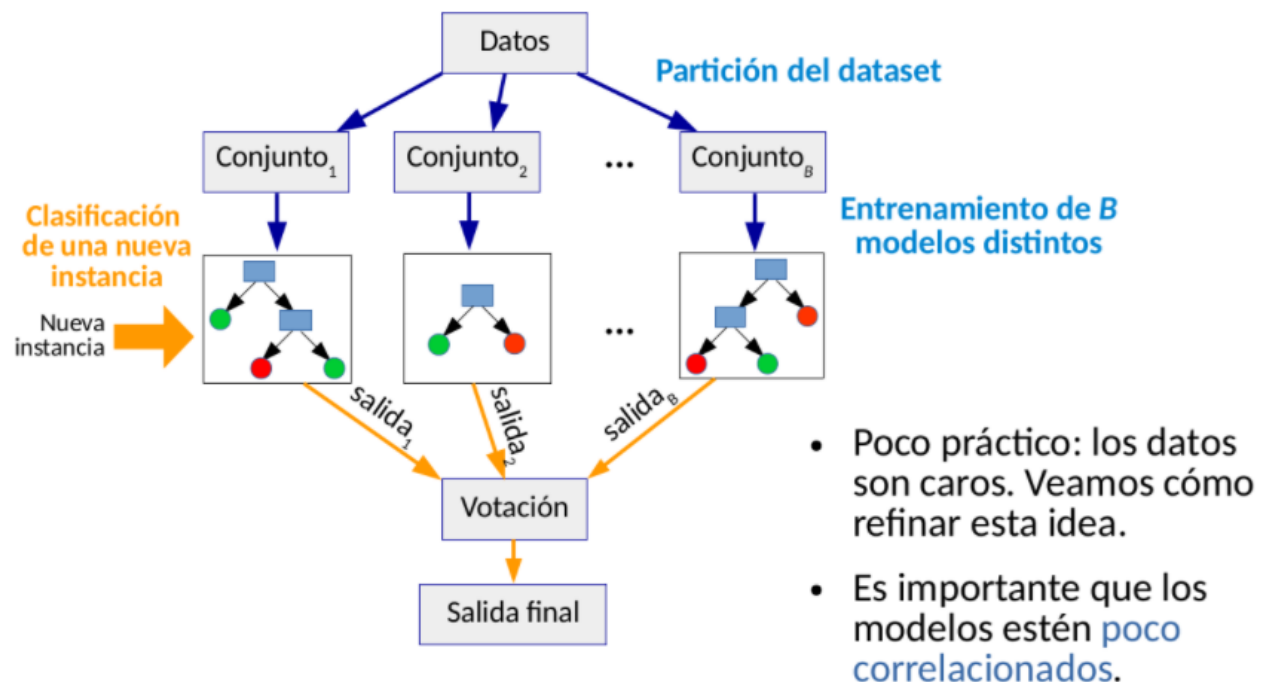
Para una nueva instancia, clasificarla con todos los modelos, y devolver la clase más elegida.

La votación reduce la varianza de la clasificación. (Random Forest)

Si los modelos individuales devuelven probabilidades, se puede hacer una votación ponderada.

Bagging

Técnica que está detrás de Random Forest



1. Partición en n conjuntos de datos
2. Para cada conjunto entrenamos un modelo o clasificador, por ejemplo un árbol
3. Una vez que los árboles están entrenados, cada uno va a dar una salida cuando estén ya en producción
4. Se hace una votación de la salida que más salió.
5. La que sea mayoritaria es la que devuelve el modelo al final

Es costoso computacionalmente

Bootstrap: muestras aleatorias con reemplazo

Bagging es una técnica que consiste en construir nuevos conjuntos de entrenamiento usando bootstrap para entrenar distintos modelos, y luego combinarlos.

Bagging: paso a paso

1. Dividimos el conjunto de entrenamiento en distintos subconjuntos, obteniendo como resultado diferentes muestras aleatorias. (Bootstrap)
 - a. Las muestras son uniformes (misma cantidad de individuos)
 - b. Son muestras con reemplazo (los individuos pueden repetirse en el mismo conjunto de datos)
2. Entrenamos un modelo con cada subconjunto
3. Construimos un único modelo predictivo a partir de los anteriores

Hasta aca es como funciona Random Forest

Ensamble homogéneo??

Características

- Disminuye la varianza en nuestro modelo final
- Muy efectivo en conjuntos de datos con varianza alta
- Puede reducir el overfitting
- Puede reducir el ruido de los outliers (porque no aparecen en todos los datasets)
- Puede mejorar levemente con el voto ponderado

Problemas al usarlo con árboles

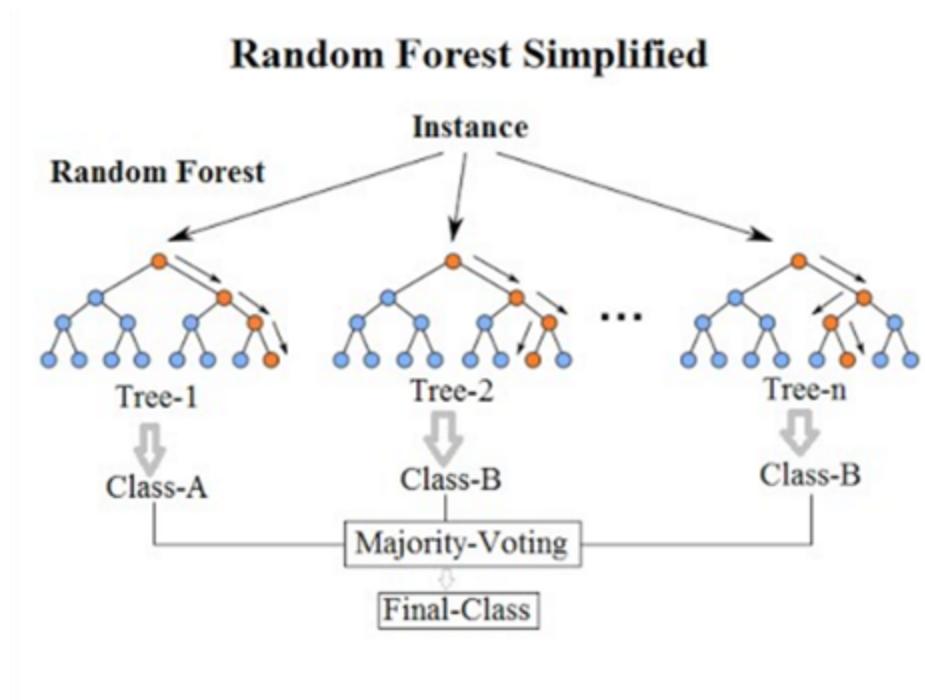
- Si pocos atributos son predictores fuertes, todos los árboles se van a parecer entre sí!

Ej: dataset con 50 columnas, pero solo 3 son las importantes que me van a definir a grandes rasgos la clasificación y la salida. En ese caso no tiene sentido usar bagging, porque todos los árboles van a tender a parecerse entre sí y a utilizar los mismos atributos de la misma manera.

- Esos atributos terminarán cerca de la raíz, para todos los conjuntos generados con bootstrap

Bagging: Random Forest

Igual a bagging tradicional, pero en cada nodo, considerar sólo un subconjunto de m atributos (m columnas) elegidos al azar.



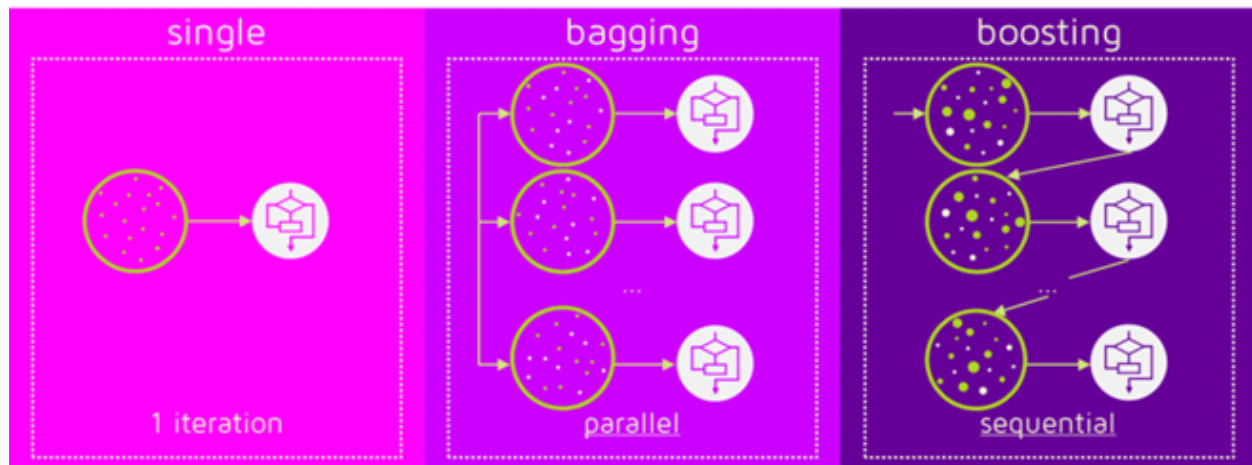
Boosting

Alternativa a Bagging.

Buscar nuevos modelos para las instancias mal clasificadas por los anteriores.

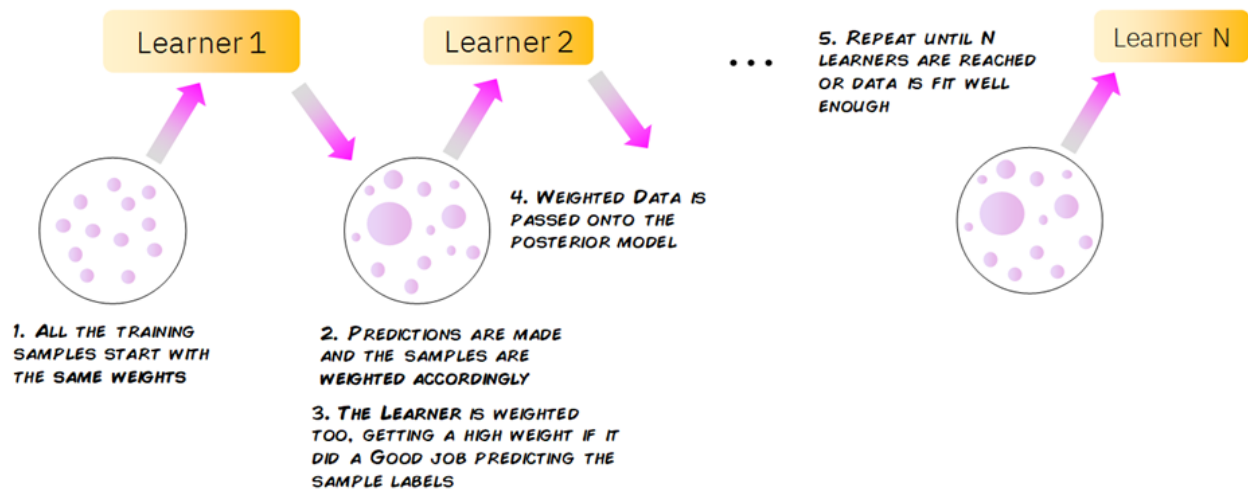
Con Bagging construimos todos los modelos de forma paralela, cada modelo es independiente de los demas.

En Boosting se entrenan los modelos de forma secuencial, a traves de un ciclo de iteraciones.

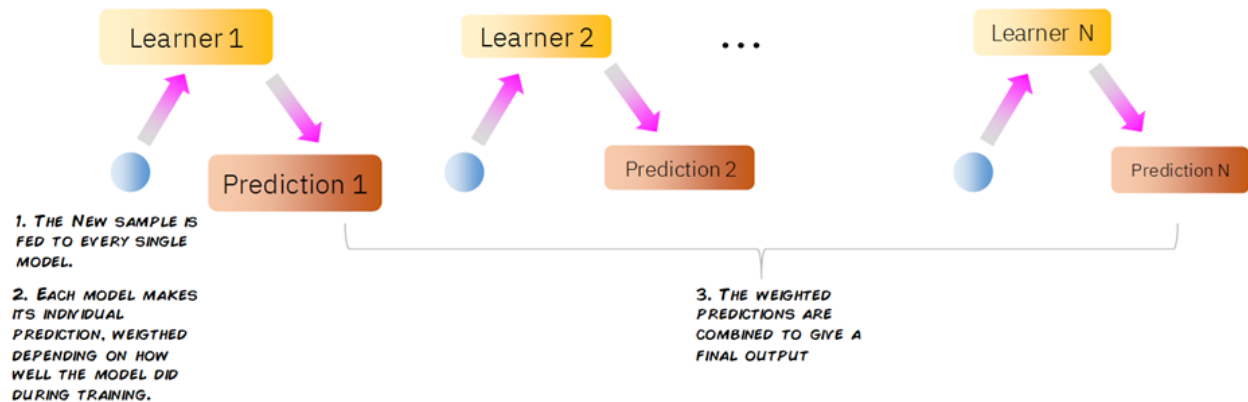


1. Comenzar con un modelo (simple) entrenado sobre todos los datos: h_0
2. En cada iteración i , entrenar h_i dando mayor importancia a los datos mal clasificados por las iteraciones anteriores.
3. Terminar al conseguir cierto cubrimiento, o luego de un número de iteraciones.
4. Clasificar nuevas instancias usando una votación ponderada de todos los modelos construidos.

TRAINING BOOSTING MODELS



PREDICTING WITH BOOSTING MODELS



Boosting: Resumen

- Necesita pesos, esto implica que:
 - Debemos adaptar algoritmo de aprendizaje
 - Y tomar muestras con reemplazo según pesos
- Puede sobreajustar

Si yo voy entrenando cada vez un modelo para que ajuste los errores del modelo anterior, podría terminar rápidamente en un sobreajuste y aprendiendo de memoria

todos los datos de entrenamiento.

Para evitar esto XGBoost va a implementar ciertos hiperparámetros de regularización, para que estime mal, para convertirlo en un peor estimador.

Modelos

- AdaBoost
 - Gradient Boosting
 - XGBoost: eXtreme Gradient Boosting
-
- La velocidad de entrenamiento de XGBoost es mucho menor gracias a su implementación y a estar mejor orientado al uso eficiente del hardware (GPU)
 - El accuracy (o la métrica adecuada) también es mejor debido a que XGBoost maneja mejor el overfitting mediante regularizaciones