Gráficos ICE para interpretar modelos predictivos

Joaquín Amat Rodrigo

Diciembre, 2018

Tabla de contenidos

Introducción	
Paquete ICEbox	2
Curvas ICE	
Curvas ICE centradas	6
Derivada de las curvas ICE	7
Colorear curvas ICE	8
Interacción entre predictores	g
Comportamiento en regiones extrapoladas	12
Versión ggplot2	16
Gráfico ICE	17
Gráfico c-ICE	19
Colorear curvas	22
Gráfico d-ICE	
Grid múltiples predictores	26
ICE	
c-ICE	28
d-ICE	29
Anexos	32
Función plot.dice corregida	32
Bibliografía	38

Versión PDF: Github

Introducción

Los gráficos *Individual Conditional Expectation (ICE)* muestran la variación de las predicciones de un modelo de *machine learning* en función del valor que toma alguno de sus predictores. Además de ser muy útiles para entender la relación entre la variable respuesta y los predictores aprendida por el modelo, permiten diferenciar cuándo, dicha relación, es aditiva o está afectada por interacciones con otros predictores. También permiten entender cómo se comporta un modelo cuando se extrapola a regiones para las que no se dispone de observaciones.

Los gráficos *ICE* pueden considerarse una extensión de los gráficos de dependencia parcial *Partial Dependence Plots (PDP)*. La diferencia entre ambos reside en que, los *PDP*, muestran, con una única curva, como varía en promedio la variable respuesta a medida que se modifica uno de los predictores. Los *ICE*, muestran como varía la predicción para cada una de las observaciones (una curva distinta por cada observación).

A lo largo de este documento se muestran ejemplos de cómo se pueden obtener gráficos *ICE* y de qué información se puede extraer de ellos.

Paquete ICEbox

El paquete ICEbox contiene funciones que permiten calcular, explorar y representar gráficos *ICE* para cualquier tipo de modelo predictivo. A continuación, se muestra un ejemplo introductorio de cómo utilizarlo.

Curvas ICE

El set de datos Boston contiene información sobre la mediana del precio de las viviendas de la ciudad de Boston junto con variables relacionadas con las características de las casas y la zona donde se encuentran.

```
library(MASS)
datos <- Boston
head(datos)</pre>
```

```
##
        crim zn indus chas
                            nox
                                   rm age
                                              dis rad tax ptratio
                                                             15.3 396.90
## 1 0.00632 18 2.31
                        0 0.538 6.575 65.2 4.0900
                                                    1 296
## 2 0.02731 0 7.07
                        0 0.469 6.421 78.9 4.9671
                                                    2 242
                                                             17.8 396.90
## 3 0.02729 0 7.07
                        0 0.469 7.185 61.1 4.9671
                                                    2 242
                                                             17.8 392.83
## 4 0.03237 0 2.18
                                                    3 222
                        0 0.458 6.998 45.8 6.0622
                                                             18.7 394.63
                                                             18.7 396.90
## 5 0.06905 0 2.18
                        0 0.458 7.147 54.2 6.0622
                                                    3 222
## 6 0.02985 0 2.18
                        0 0.458 6.430 58.7 6.0622
                                                    3 222
                                                             18.7 394.12
##
    lstat medv
## 1 4.98 24.0
     9.14 21.6
## 2
## 3 4.03 34.7
## 4 2.94 33.4
## 5 5.33 36.2
## 6 5.21 28.7
```

Se entrena un modelo predictivo de tipo Random Forest con el objetivo de predecir el precio de la vivienda (*medv*) en función de todas las demás variables disponibles.

```
library(randomForest)
modelo_rf <- randomForest(formula = medv ~ ., data = datos, ntree = 500)</pre>
```

Una vez entrenado el modelo, con la función <u>ice()</u> se obtiene el gráfico *ICE* de cualquiera los predictores. Los principales argumentos de esta función son:

- object: modelo del cual se quieren obtener las curvas *ICE*.
- X: valor de los predictores con los que se ha entrenado el modelo.
- predictor: nombre o posición del predictor para el que se quiere obtener el gráfico ICE.

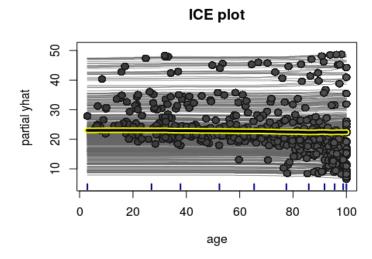
- <u>frac_to_build</u>: fracción de observaciones de entrenamiento que se incluyen en el gráfico *ICE*. Por defecto se emplean todas (<u>frac_to_build = 1</u>) pero, si el set de datos es muy grande, se recomienda reducirlo. La selección se hace de forma que se incluya aproximadamente todo el rango de valores observado en el entrenamiento.
- <u>indices_to_build</u>: índices de las observaciones que se incluyen en el gráfico *ICE*. Es una alternativa no aleatoria a <u>frac_to_build</u>. No pueden emplearse ambos argumentos a la vez.
- num_grid_pts: número de puntos dentro del rango del predictor empleados para construir la curva ICE. Por defecto, se utilizan todos los valores del predictor observados en los datos de entrenamiento del modelo.
- predictfcn: función opcional que acepta dos argumentos, un modelo (object) y un conjunto de datos (newdata), y devuelve un vector con las predicciones. Gracias a esta función se pueden obtener los gráficos *ICE* de cualquier modelo. Si este argumento no se especifica, se intenta encontrar automáticamente la función predict() correspondiente a la clase del modelo pasado a la función ice().

A continuación, se explora influencia que tiene la antigüedad de la vivienda (*age*) sobre el precio de la vivienda (*medv*).

ice object generated on data with n = 506 for predictor "age"
predictor considered continuous, logodds off

El objeto devuelto por ice() puede graficarse empleando la función plot().

```
plot(ice_age,
    x_quantile = FALSE,
    plot_pdp = TRUE,
    plot_orig_pts_preds = TRUE,
    main = "ICE plot")
```



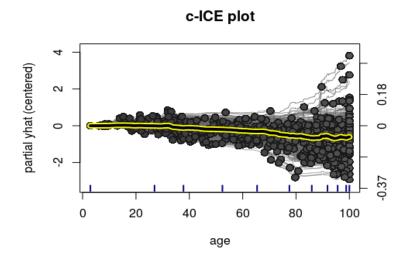
Cada curva del grafico anterior (curva *ICE*) muestra el valor predicho de la variable respuesta para cada observación con forme se va aumentando el valor de *age* y manteniendo constantes el resto de predictores en su valor observado. La curva resaltada en amarillo se corresponde con la curva *PDP*, que es la variación promedio de todas las observaciones. Además, el gráfico incluye puntos que representan el verdadero valor de *age* de cada observación.

La gran mayoría de las curvas son planas, lo que apunta a que, en la mayor parte de los casos, la antigüedad de la vivienda apenas influye en su precio. Sin embargo, puede apreciarse que, unas pocas observaciones, presentan una ligera tendencia de subida o bajada.

Curvas ICE centradas

Cuando los valores observados de la variable respuesta se acumulan en una región pequeña, el solapamiento de las curvas puede hacer difícil distinguir qué observaciones que se escapan de la tendencia general. Para evitar este problema, se puede recurrir a los gráficos *ICE* centrados (*c-ICE*). Los gráficos *c-ICE* se obtienen igual que los gráficos *ICE* con la única diferencia de que, a cada una de las curvas, se les resta un valor de referencia, normalmente el valor predicho para el mínimo observado del predictor. De esta forma, se consigue que todas las curvas tengan su origen en el o.

```
plot(ice_age,
    x_quantile = FALSE,
    plot_pdp = TRUE,
    plot_orig_pts_preds = TRUE,
    centered = TRUE,
    main = "c-ICE plot")
```

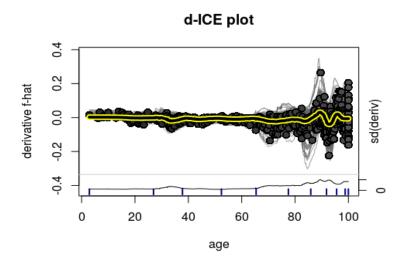


Con esta nueva representación puede observarse con más claridad que, aunque la mayoría de observaciones se mantienen constantes, algunas tienen un claro patrón divergente (para algunas el precio incrementa con la antigüedad y en otras disminuye). Tal y como se describe más adelante, esto suele ser un indicativo de que el predictor *age* interacciona con otros predictores. El eje vertical de la izquierda muestra el % de desviación respecto al rango de y.

Derivada de las curvas ICE

Si la relación existente entre la variable respuesta y el predictor estudiado es independiente del resto de predictores del modelo, entonces, las curvas del gráfico *ICE* comparten una misma forma y son paralelas las unas a las otras (la única diferencia es un desplazamiento en el eje vertical). Este comportamiento puede resultar complicado de validar visualmente cuando las curvas se superponen. Una forma de facilitar la identificación de interacciones entre predictores es representando las derivadas parciales de las curvas *ICE* (*d-ICE*). Si no existe ninguna interacción, todas las curvas son aproximadamente paralelas, sus derivadas aproximadamente iguales y, por lo tanto, el gráfico de derivadas muestra una única recta. Si existen interacciones, entonces, la representación de las derivadas parciales es heterogénea.

```
dice_age <- dice(ice_obj = ice_age)
plot(dice_age,
    plot_sd = TRUE,
    plot_orig_pts_deriv = TRUE,
    plot_dpdp = TRUE,
    main = "d-ICE plot")</pre>
```



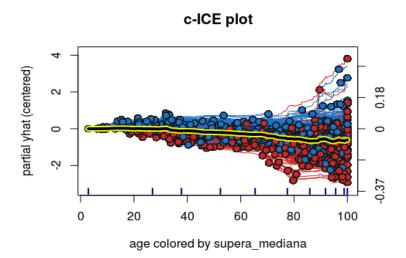
El gráfico sugiere que, cuando la antigüedad de la vivienda es inferior a 60 años, las derivadas parciales son ≈ 0 , por lo que no hay interacciones. Superados los 60 años, hay observaciones cuyas derivadas parciales se desvían sustancialmente de 0, indicando que, a partir de este valor, el predictor *age* interacciona con otros predictores.

En la zona inferior del gráfico se muestra la desviación estándar de las derivadas parciales en cada punto, lo que facilita encontrar regiones de alta heterogeneidad (regiones de interacción).

Colorear curvas ICE

Como se ha visto en los apartados anteriores, algunas observaciones pueden alejarse de la tendencia general del modelo. Una forma de conseguir información extra que permita comprender las razones de estos patrones divergentes es colorear las curvas de cada observación en función de otro factor. Por ejemplo, en el modelo de predicción del valor medio, se crea una nueva variable binaria que indique si el número de habitaciones de la vivienda está por encima o por debajo de la mediana.

```
## ICE Plot Color Legend
## supera_mediana color
## no firebrick3
## si dodgerblue3
```



Gracias a los colores puede verse claramente que, para viviendas con un número de habitaciones por encima de la mediana (azul), la antigüedad de la vivienda está asociada positivamente con el precio. Para viviendas con un número de habitaciones inferior a la media, ocurre lo contrario.

Interacción entre predictores

En la introducción de documento, se menciona la diferencia entre los gráficos *PDP* y los *ICE*. La ventaja de los gráficos *ICE* queda patente cuando existe interacción entre predictores o cuando no todas las observaciones siguen una misma tendencia. Véase el siguiente ejemplo ilustrativo.

Se simula un set de datos siguiendo la siguiente ecuación:

$$Y = 0.2X_1 - 5X_2 + 10X_2\mathbf{1}_{X_2 \ge 0} + \epsilon$$

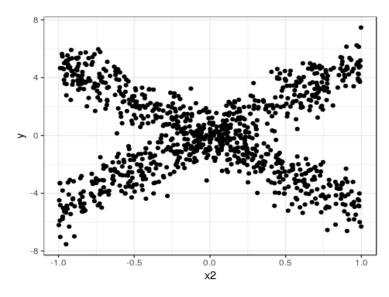
o lo que es equivalente

$$Y = \begin{cases} 0.2X_1 - 5X_2 + 10X_2 + \epsilon & \text{si } X_3 \ge 0 \\ 0.2X_1 - 5X_2\epsilon & \text{si } X_3 < 0 \end{cases}$$

$$\epsilon \sim N(0,1) \quad X_1, X_2, X_3 \sim U(-1,1)$$

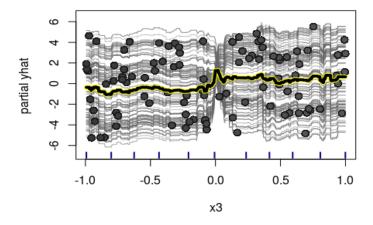
```
library(ggplot2)
set.seed(123)
x1 <- runif(n = 1000, min = -1, max = 1)
x2 <- runif(n = 1000, min = -1, max = 1)
x3 <- runif(n = 1000, min = -1, max = 1)
e <- rnorm(n = 1000, mean = 0, sd = 1)
y <- 0.2*x1 - 5*x2 + 10*x2*I(x3 >= 0) + e
datos <- data.frame(x1, x2, x3, y)

ggplot(data = datos, aes(x = x2,y = y)) +
    geom_point() +
    theme_bw()</pre>
```



Se entrena un modelo GBM para predecir y en función de las 3 variables disponibles.

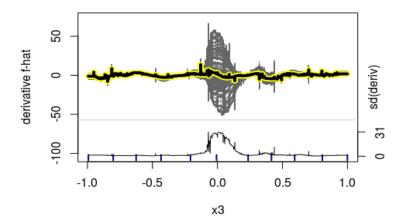
```
library(gbm)
set.seed(123)
modelo_gbm <- gbm(formula = y ~ .,</pre>
                  data = datos,
                  n.tree = 500,
                  interaction.depth = 3,
                  shrinkage = 0.1,
                  distribution = "gaussian",
                  cv.folds = 5,
                  verbose = FALSE)
# Se separan los predictores de la variable respuesta.
datos x
             <- datos
datos x$medv <- NULL
             <- datos$medv
datos y
# Aunque existe una función predict.qbm(), a modo ilustrativo, se indica una
# función propia en el argumento predictfcn.
ice_gbm_x3 <- ice(object = modelo_gbm,</pre>
              X = datos_x
              y = datos_y,
              predictor = "x3",
                    predictfcn = function(object, newdata){
                                    predict.gbm(object = object,
                                                newdata = newdata,
                                                n.trees = 435)
                    frac to build = 1,
                    verbose = FALSE)
# Se grafican únicamente el 1% de las curvas.
plot(ice_gbm_x3, x_quantile = FALSE, plot_pdp = TRUE, frac_to_plot = 0.1)
```



Viendo únicamente la curva PDP, podría asumirse que, la variable respuesta Y, apenas varía en función del valor que tome el predictor X_3 . Esta interpretación puede llevar a conclusiones erróneas ya que el promedio está ocultando el verdadero comportaminto individual de las observaciones.

Si se representa el valor de las derivadas de las curvas ICE, puede verse claramente que, la relación entre la variable respuesta Y y el predictor X_3 está de alguna forma modulada por interacciones con los predictores X_2 y X_3 .

```
# Gráfico de Las derivadas.
dice_gbm_x3 <- dice(ice_obj = ice_gbm_x3)
plot(dice_gbm_x3, plot_orig_pts_deriv = FALSE)</pre>
```



Además, este tipo de representación permite identificar en qué rango del predictor ocurre la interacción (región de interacción ROI). En este ejemplo, tal como cabe esperar dada la ecuación empleada para generar los datos, la interacción ocurre en torno al valor $X_3 = 0$.

Comportamiento en regiones extrapoladas

Una característica frecuente en muchos de los modelos de *machine learning* actuales es el alto número de predictores que incorporan. Cuanto mayor es la cantidad de predictores (dimensiones del espacio muestral), más dispersas se encuentran las observaciones. Esto se traduce en que, muchas predicciones, se hacen en regiones del espacio para las que no se dispone de observaciones, en otras palabras, se extrapola.

En los modelos predictivos la extrapolación supone un riesgo, ya que implica asumir que, la relación entre las variables aprendida por el modelo a partir de las regiones observadas, también se cumple en las regiones no observadas. Los gráficos *ICE* permiten ganar cierta intuición sobre cómo se está comportando el modelo en las regiones extrapoladas. Véase a continuación un ejemplo.

Se simula un set de datos en dos dimensiones (X_1, X_2) , cada una en el rango [-1,1], pero donde la región $(X_1 > 0, X_2 > 0)$ no contiene ninguna observación.

$$Y = 10X_1^2 + \mathbf{1}_{X_2 \ge 0} + \epsilon$$

o lo que es equivalente

$$Y = \begin{cases} 10X_1^2 + X_2 & \text{si } X_2 \ge 0 \\ 10X_1^2 & \text{si } X_3 < 0 \end{cases}$$

donde

$$\epsilon \sim N(0,0.1)$$

$$\begin{bmatrix} X_1 \\ X_2 \end{bmatrix} \sim \begin{cases} U(-1,0) & U(-1,0) & \text{probabilidad } \frac{1}{3} \\ U(0,1) & U(-1,0) & \text{probabilidad } \frac{1}{3} \\ U(-1,0) & U(0,1) & \text{probabilidad } \frac{1}{3} \\ U(0,1) & U(0,1) & \text{probabilidad } 0 \end{cases}$$

```
simular observaciones <- function(n){</pre>
  datos <- matrix(data = NA, nrow = n, ncol = 2)</pre>
  for (i in 1:n) {
    caso \leftarrow sample(x = 1:3, size = 1)
    if(caso == 1){
      x1 \leftarrow runif(1, min = -1, max = 0)
      x2 \leftarrow runif(1, min = -1, max = 0)
    }else if(caso == 2){
       x1 \leftarrow runif(1, min = 0, max = 1)
       x2 \leftarrow runif(1, min = -1, max = 0)
    }else{
      x1 \leftarrow runif(1, min = -1, max = 0)
       x2 < -runif(1, min = 0, max = 1)
    datos[i,] <- cbind(x1, x2)
  datos <- as.data.frame(datos)</pre>
  colnames(datos) <- c("x1", "x2")</pre>
  return(datos)
}
             <- simular_observaciones(n = 500)</pre>
datos
             \leftarrow rnorm(n = 500, mean = 0, sd = 0.1)
e
datos$y
             <- 10*datos$x1^2 + I(datos$x2 >= 0) + e
```

Se asignan las observaciones a dos grupos dependiendo de si $X_2 \ge 0$.

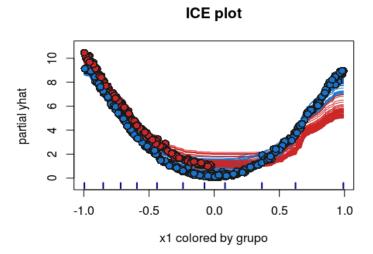
Se ajusta un modelo random forest a los datos.

Se calculan las curvas ICE.

Nota: La función plot.ice() del paquete <u>ICEbox</u> parece generar un error cuando se especifica que no se muestre la curva PDP (plot_pdp = FALSE). En el apartado Anexos se propone una ligera modificación de la función original para que no genere el error.

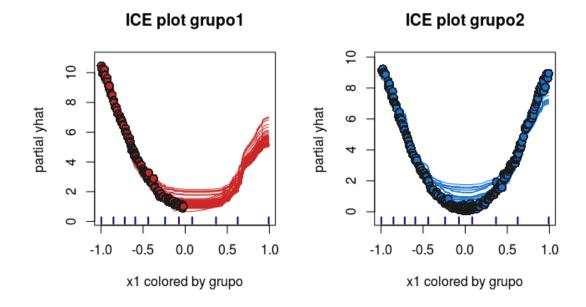
```
# Se representan Las curvas ICE coloreadas por grupo.
plot(ice_x1,
    x_quantile = FALSE,
    plot_pdp = FALSE,
    plot_orig_pts_preds = TRUE,
    color_by = "grupo",
    main = "ICE plot"
    )
```

```
## ICE Plot Color Legend
## grupo color
## grupo1 firebrick3
## grupo2 dodgerblue3
```



```
## ICE Plot Color Legend
## grupo color
## grupo1 firebrick3
## grupo2 dodgerblue3
```

```
# Se representan Las curvas ICE solo del grupo 2.
plot(ice_x1,
    x_quantile = FALSE,
    plot_pdp = FALSE,
    plot_orig_pts_preds = TRUE,
    plot_points_indices = which(ice_x1$Xice$grupo == "grupo2"),
    color_by = "grupo",
    main = "ICE plot grupo2"
    )
```



Puede observarse que, en el caso del grupo 1, el modelo mantiene la tendencia aprendida con las observaciones del grupo 2, aunque realmente no existe ninguna observación del grupo 1 en esa región. Que esta extrapolación sea aceptable o no, depende del caso de uso en cuestión.

Versión ggplot2



Toda la información presente necesaria para crear el gráfico está contenida en los objetos ice y dice, por lo que puede reproducirse la misma representación con ggplot2.

```
library(MASS)
library(randomForest)
library(ICEbox)
datos <- Boston
head(datos)</pre>
```

```
##
       crim zn indus chas
                            nox
                                   rm age
                                              dis rad tax ptratio black
                                                             15.3 396.90
## 1 0.00632 18 2.31
                        0 0.538 6.575 65.2 4.0900
                                                    1 296
                7.07
## 2 0.02731 0
                        0 0.469 6.421 78.9 4.9671
                                                    2 242
                                                             17.8 396.90
## 3 0.02729 0 7.07
                        0 0.469 7.185 61.1 4.9671
                                                    2 242
                                                            17.8 392.83
## 4 0.03237 0 2.18
                        0 0.458 6.998 45.8 6.0622
                                                    3 222
                                                            18.7 394.63
## 5 0.06905 0 2.18
                        0 0.458 7.147 54.2 6.0622
                                                    3 222
                                                            18.7 396.90
## 6 0.02985 0 2.18
                                                             18.7 394.12
                        0 0.458 6.430 58.7 6.0622 3 222
    1stat medv
##
## 1 4.98 24.0
## 2 9.14 21.6
## 3 4.03 34.7
## 4 2.94 33.4
## 5 5.33 36.2
## 6 5.21 28.7
```

Gráfico ICE

```
library(tidyverse)
plot_ice <- function(objeto, pdp = TRUE, color_by = NULL){</pre>
  # Esta función devuelve el gráfico de las curvas ICE
  # Argumentos
 # objeto: un objeto devuelto por la función ICEbox::ice
               si se muestra o no la curva promedio pdp.
     pdp:
  # color by: predictor por el cual que quiere colorear las curvas.
 # Output
 # Gráfico ggplot
  predictor <- objeto$predictor</pre>
  datos_ice <- objeto$ice_curves %>%
               as.data.frame() %>%
               mutate(observacion_id = rownames(objeto$Xice)) %>%
               gather(key = !!predictor, value = "y", -observacion_id) %>%
               mutate(!!sym(predictor) := as.numeric(!!sym(predictor)))
  if(!is.null(color by)){
    datos color <- objeto$Xice %>%
                   rownames_to_column(var = "observacion_id") %>%
                   select(observacion id, !!sym(color by))
    datos_ice <- datos_ice %>%
                 left_join(datos_color, by = "observacion_id")
  }
  datos_observaciones <- objeto$xj %>%
                         as.data.frame() %>%
                         rename(!!predictor := !!sym(".")) %>%
                         mutate(y = objeto$actual_prediction,
                                observacion id = rownames(objeto$Xice))
  datos_pdp <- objeto$pdp %>%
               as.data.frame() %>%
               rownames to column(var = predictor) %>%
               mutate(!!sym(predictor) := as.numeric(!!sym(predictor))) %>%
               rename(y := !!sym("."))
  if(pdp & is.null(color by)){
    plot <- ggplot(data = datos ice, aes(x = !!sym(predictor), y = y)) +</pre>
            geom_path(aes(group = observacion_id), color = "gray30", alpha=0.5) +
            geom_point(data=datos_observaciones, aes(x= !!sym(predictor), y=y),
```

```
colour = "black", pch = 21, fill = "gray20") +
            geom line(data = datos pdp, aes(x = !!sym(predictor), y = y),
                      colour = "red", size = 1.2) +
            labs(title = paste("Curvas ICE:", predictor)) +
            theme bw() +
            theme(legend.position = "bottom")
  }else if(pdp & !is.null(color_by)){
    plot <- ggplot(data = datos ice, aes(x = !!sym(predictor), y = y)) +</pre>
            geom path(aes(group = observacion id, color = !!sym(color by)),
                      alpha = 0.5) +
            geom point(data=datos observaciones, aes(x = !!sym(predictor), y=y),
                       colour = "black", pch = 21, fill = "gray20") +
            geom line(data = datos pdp, aes(x = !!sym(predictor), y = y),
                      colour = "red", size = 1.2) +
            labs(title = paste("Curvas ICE:", predictor)) +
            theme_bw() +
            theme(legend.position = "bottom")
  }else if(!pdp & is.null(color by)){
    plot <- ggplot(data = datos_ice, aes(x = !!sym(predictor), y = y)) +</pre>
              geom path(aes(group=observacion id), color="gray30", alpha=0.5) +
              geom point(data=datos observaciones, aes(x= !!sym(predictor), y=y),
                         colour = "black", pch = 21, fill = "gray20") +
            labs(title = paste("Curvas ICE:", predictor)) +
            theme bw() +
            theme(legend.position = "bottom")
  }else{
    plot <- ggplot(data = datos ice, aes(x = !!sym(predictor), y = y)) +</pre>
            geom path(aes(group = observacion id, color = !!sym(color by)),
                      alpha = 0.5) +
            geom_point(data=datos_observaciones, aes(x= !!sym(predictor), y=y),
                       colour = "black", pch = 21, fill = "gray20") +
            labs(title = paste("Curvas ICE:", predictor)) +
            theme bw() +
            theme(legend.position = "bottom")
  }
  plot
  return(plot)
}
plot_ice(objeto = ice_age, pdp = TRUE)
```

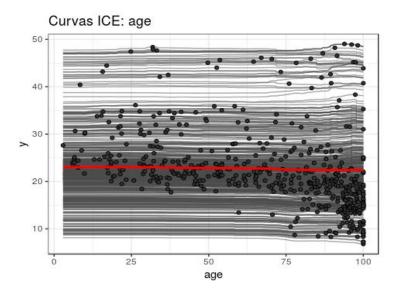
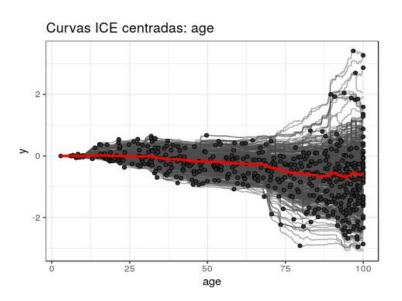


Gráfico c-ICE

```
plot_c_ice <- function(objeto, pdp = TRUE, color_by = NULL){</pre>
 # Esta función devuelve el gráfico de las curvas ICE centrados
 # Argumentos
     objeto:
                un objeto devuelto por la función ICEbox::ice
                si se muestra o no la curva promedio pdp
     color by: predictor por el cual que quiere colorear las curvas.
 # Output
     Gráfico gaplot
 predictor <- objeto$predictor</pre>
 datos ice <- objeto$ice curves %>%
               as.data.frame() %>%
               mutate(observacion id = rownames(objeto$Xice)) %>%
               gather(key = !!predictor, value = "y", -observacion_id) %>%
               mutate(!!sym(predictor) := as.numeric(!!sym(predictor)))
 minimo_por_curva <- datos_ice %>%
                      group by(observacion id) %>%
                      summarize(minimo = y[which.min(!! sym(predictor))])
 datos_c_ice <- datos_ice %>%
                 left_join(minimo_por_curva, by = "observacion_id") %>%
                  mutate(y = y - minimo)
```

```
if(!is.null(color by)){
  datos color <- objeto$Xice %>%
                 rownames_to_column(var = "observacion_id") %>%
                 select(observacion id, !!sym(color by))
  datos c ice <- datos c ice %>%
                 left_join(datos_color, by = "observacion_id")
}
datos_observaciones <- objeto$xj %>%
                       as.data.frame() %>%
                       rename(!!predictor := !!sym(".")) %>%
                       mutate(y = objeto$actual prediction,
                              observacion id = rownames(objeto$Xice))
datos_c_observaciones <- datos_observaciones %>%
                         left join(minimo por curva, by = "observacion id") %>%
                         mutate(v = v - minimo)
datos c pdp <- objeto$pdp %>%
               as.data.frame() %>%
               rownames to column(var = predictor) %>%
               mutate(!!sym(predictor) := as.numeric(!!sym(predictor))) %>%
               rename(y := !!sym(".")) %>%
               mutate(y = y - y[which.min(!! sym(predictor))])
if(pdp & is.null(color by)){
  plot <- ggplot(data = datos c ice, aes(x = !!sym(predictor), y = y)) +</pre>
          geom_path(aes(group = observacion_id), color = "gray30", alpha = 0.5) +
          geom_point(data=datos_c_observaciones, aes(x= !!sym(predictor), y=y),
                     colour = "black", pch = 21, fill = "gray20") +
          geom_line(data = datos_c_pdp, aes(x = !!sym(predictor), y = y),
                    colour = "red", size = 1.2) +
          labs(title = paste("Curvas ICE centradas:", predictor)) +
          theme bw() +
          theme(legend.position = "bottom")
}else if(pdp & !is.null(color_by)){
  plot <- ggplot(data = datos c ice, aes(x = !!sym(predictor), y = y)) +</pre>
          geom path(aes(group = observacion id, color = !!sym(color by)),
                    alpha = 0.5) +
          geom point(data=datos c observaciones, aes(x= !!sym(predictor), y=y),
                     colour = "black", pch = 21, fill = "gray20") +
          geom line(data = datos c pdp, aes(x = !!sym(predictor), y = y),
                    colour = "red", size = 1.2) +
          labs(title = paste("Curvas ICE centradas:", predictor)) +
          theme bw() +
          theme(legend.position = "bottom")
```

```
}else if(!pdp & is.null(color_by)){
   plot <- ggplot(data = datos_c_ice, aes(x = !!sym(predictor), y = y)) +</pre>
              geom path(aes(group = observacion id), color = "gray30", alpha=0.5) +
              geom_point(data=datos_c_observaciones, aes(x= !!sym(predictor), y=y),
                         colour = "black", pch = 21, fill = "gray20") +
              labs(title = paste("Curvas ICE centradas:", predictor)) +
              theme_bw() +
              theme(legend.position = "bottom")
  }else{
    plot <- ggplot(data = datos_c_ice, aes(x = !!sym(predictor), y = y)) +</pre>
            geom_path(aes(group = observacion_id, color = !!sym(color_by)),
                      alpha = 0.5) +
            geom point(data=datos_c_observaciones, aes(x = !!sym(predictor), y=y),
                       colour = "black", pch = 21, fill = "gray20") +
            labs(title = paste("Curvas ICE centradas:", predictor)) +
            theme bw() +
            theme(legend.position = "bottom")
  }
 plot
  return(plot)
plot_c_ice(objeto = ice_age, pdp = TRUE)
```



Colorear curvas

Mismo gráfico, pero coloreando por una variable.

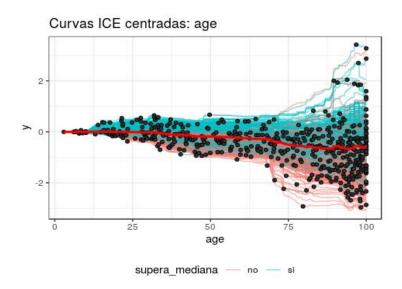
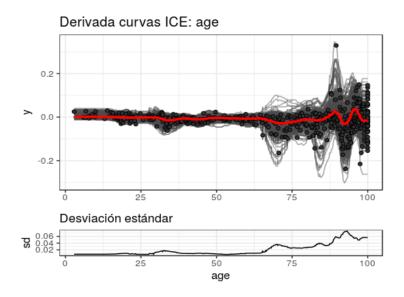


Gráfico d-ICE

```
library(ggpubr)
plot d ice <- function(objeto, pdp = TRUE, color by = NULL){</pre>
  # Esta función devuelve el gráfico de las curvas d-ICE
  # Argumentos
 # objeto: un objeto devuelto por la función ICEbox::dice
               si se muestra o no la curva promedio pdp
     pdp:
  # color by: predictor por el cual que quiere colorear las curvas.
 # Output
 # Gráfico ggplot
  predictor <- objeto$predictor</pre>
  datos d ice <- objeto$d ice curves %>%
                 as.data.frame() %>%
                 setNames(as.character(objeto$gridpts)) %>%
                 mutate(observacion id = rownames(objeto$Xice)) %>%
                 gather(key = !!predictor, value = "y", -observacion_id) %>%
                 mutate(!!sym(predictor) := as.numeric(!!sym(predictor)))
  if(!is.null(color_by)){
    datos_color <- objeto$Xice %>%
                   rownames_to_column(var = "observacion_id") %>%
                   select(observacion id, !!sym(color by))
    datos_d_ice <- datos_d_ice %>%
                   left_join(datos_color, by = "observacion_id")
  }
  datos_d_observaciones <- objeto$actual_deriv %>%
                           as.data.frame() %>%
                           rename(y = !!sym(".")) %>%
                           mutate(!!sym(predictor) := objeto$xj,
                                  observacion id = rownames(objeto$Xice))
  datos_d_pdp <- data.frame(y = objeto$dpdp) %>%
                 mutate(!!sym(predictor) := objeto$gridpts)
  if(pdp & is.null(color_by)){
    plot <- ggplot(data = datos_d_ice, aes(x = !!sym(predictor), y = y)) +</pre>
            geom_path(aes(group = observacion_id), color = "gray30", alpha=0.5) +
            geom point(data=datos d observaciones, aes(x= !!sym(predictor), y=y),
                       colour = "\overline{black}", pch = 21, fill = "gray20") +
            geom line(data = datos d pdp, aes(x = !!sym(predictor), y = y),
```

```
colour = "red", size = 1.2) +
          labs(title = paste("Derivada curvas ICE:", predictor)) +
          theme bw() +
          theme(legend.position = "bottom",
                axis.title.x = element blank())
}else if(pdp & !is.null(color by)){
  plot <- ggplot(data = datos_d_ice, aes(x = !!sym(predictor), y = y)) +</pre>
          geom path(aes(group = observacion id, color = !!sym(color by)),
                    alpha = 0.5) +
          geom_point(data=datos_d_observaciones, aes(x = !!sym(predictor), y=y),
                     colour = "black", pch = 21, fill = "gray20") +
          geom line(data = datos d pdp, aes(x = !!sym(predictor), y = y),
                    colour = "red", size = 1.2) +
          labs(title = paste("Derivada curvas ICE:", predictor)) +
          theme bw() +
          theme(legend.position = "bottom",
                axis.title.x = element blank())
}else if(!pdp & is.null(color by)){
  plot <- ggplot(data = datos_d_ice, aes(x = !!sym(predictor), y = y)) +</pre>
            geom_path(aes(group=observacion_id), color="gray30", alpha=0.5) +
            geom point(data=datos d observaciones, aes(x= !!sym(predictor), y=y),
                       colour = "black", pch = 21, fill = "gray20") +
          labs(title = paste("Derivada curvas ICE:", predictor)) +
          theme bw() +
          theme(legend.position = "bottom",
                axis.title.x = element blank())
}else{
  plot <- ggplot(data = datos d ice, aes(x = !!sym(predictor), y = y)) +</pre>
          geom path(aes(group = observacion id, color = !!sym(color by)),
                    alpha = 0.5) +
          geom_point(data=datos_d_observaciones, aes(x= !!sym(predictor), y=y),
                     colour = "black", pch = 21, fill = "gray20") +
          labs(title = paste("Derivada curvas ICE:", predictor)) +
          theme bw() +
          theme(legend.position = "bottom",
                axis.title.x = element_blank())
}
datos sd derivada <- data.frame(sd = objeto$sd deriv) %>%
                     mutate(!!sym(predictor) := objeto$gridpts)
plot_sd <- ggplot(data = datos_sd_derivada, aes(x = !!sym(predictor), y = sd)) +</pre>
           geom line() +
           labs(title = "Desviación estándar") +
           theme bw() +
```

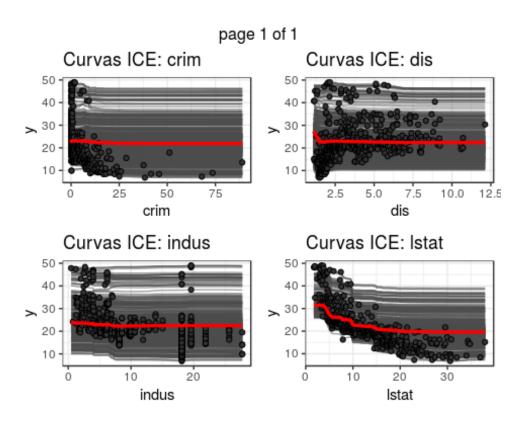


Grid múltiples predictores

Las siguiente funciones permiten calcular y graficar las curvas *ICE*, *c-ICE* y *d-ICE* de uno, varios o todos los predictores de un modelo. Por defecto (predictores = NULL), obtienen los gráficos para todos lo predictores numéricos del modelo.

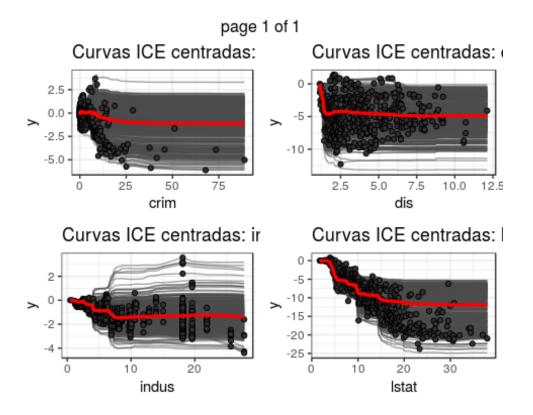
ICE

```
library(purrr)
library(furrr)
library(ggplot2)
library(gridExtra)
calcular_graficar_ice <- function(modelo, X, y, predictores = NULL,</pre>
                                   frac to build = 1, pdp = TRUE,
                                   color by = NULL, parallel = TRUE){
  if(is.null(predictores)){
    predictores <- colnames(X)</pre>
  if(any(!purrr::map_lgl(.x = X[, predictores], .f = is.numeric))){
    print("Solo pueden calcularse curvas ICE de predictores numéricos")
    predictores <- predictores[purrr::map lgl(.x = X[, predictores],</pre>
                                                .f = is.numeric)]
  }
  if(parallel){
    # Paralelización en múltiples cores.
    future::plan(strategy = future::multiprocess,
                 workers = future::availableCores(constraints = "multicore") - 1)
  }
  # Cálculo de curvas ice para cada uno de los predictores.
  curvas_ice_predictores <- furrr::future_map(</pre>
                               .x = predictores,
                               .f = ICEbox::ice,
                               object = modelo,
                               X = X
                               y = datos y,
                               frac to build = frac to build,
                               verbose = FALSE
  names(curvas_ice_predictores) <- predictores</pre>
```



c-ICE

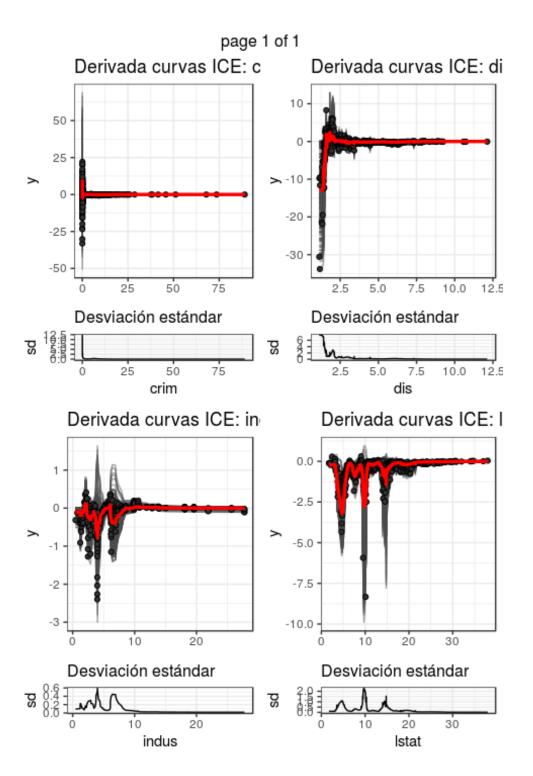
```
calcular_graficar_c_ice <- function(modelo, X, y, predictores = NULL,</pre>
                                     frac to build = 1, pdp = TRUE,
                                     color by = NULL, parallel = TRUE){
  if(is.null(predictores)){
    predictores <- colnames(X)</pre>
  if(any(!purrr::map_lgl(.x = X[, predictores], .f = is.numeric))){
    print("Solo pueden calcularse curvas ICE de predictores numéricos")
    predictores <- predictores[purrr::map_lgl(.x = X[, predictores],</pre>
                                                .f = is.numeric)]
  if(parallel){
    # Paralelización en múltiples cores.
    future::plan(strategy = future::multiprocess,
                 workers = future::availableCores(constraints = "multicore") - 1)
  }
  # Cálculo de curvas ice para cada uno de los predictores.
  curvas_ice_predictores <- furrr::future_map(</pre>
                               .x = predictores,
                               .f = ICEbox::ice,
                               object = modelo,
                               X = X
                               y = datos_y,
                               frac_to_build = frac_to_build,
                               verbose = FALSE
  names(curvas_ice_predictores) <- predictores</pre>
  graficos <- furrr::future_map(</pre>
                .x = curvas_ice_predictores,
                .f = plot_c_ice,
                pdp = pdp,
                color_by = color_by
              )
 #ggpubr::ggarrange(plotlist = graficos, ncol = 2, nrow = 2)
gridExtra::marrangeGrob(graficos, ncol = 2, nrow = 2)
calcular_graficar_c_ice(modelo = modelo_rf,
                         X = datos x,
                         y = datos y,
                         predictores = c("crim", "indus", "dis", "lstat"),
                         frac_to_build = 1,
                         pdp = TRUE
```



d-ICE

```
calcular_graficar_d_ice <- function(modelo, X, y, predictores = NULL,</pre>
                                     frac to build = 1, pdp = TRUE,
                                     color by = NULL, parallel = TRUE){
  if(is.null(predictores)){
    predictores <- colnames(X)</pre>
  if(any(!purrr::map_lgl(.x = X[, predictores], .f = is.numeric))){
    print("Solo pueden calcularse curvas ICE de predictores numéricos")
    predictores <- predictores[purrr::map_lgl(.x = X[, predictores],</pre>
                                                .f = is.numeric)]
  }
  if(parallel){
    # Paralelización en múltiples cores.
    future::plan(strategy = future::multiprocess,
                 workers = future::availableCores(constraints = "multicore") - 1)
  }
  # Cálculo de curvas ice para cada uno de los predictores.
```

```
curvas ice predictores <- furrr::future map(</pre>
                               .x = predictores,
                               .f = ICEbox::ice,
                               object = modelo,
                               X = X
                               y = datos_y,
                               frac_to_build = frac_to_build,
                               verbose = FALSE
  names(curvas_ice_predictores) <- predictores</pre>
 # Cálculo de derivadas ice para cada uno de los predictores.
  derivadas_ice_predictores <- furrr::future_map(</pre>
                                    .x = curvas_ice_predictores,
                                    .f = ICEbox::dice
                                   )
  graficos <- furrr::future map(</pre>
                .x = derivadas ice predictores,
                .f = plot_d_ice,
                pdp = pdp,
                color_by = color_by
              )
#ggpubr::ggarrange(plotlist = graficos, ncol = 2, nrow = 2)
gridExtra::marrangeGrob(graficos, ncol = 2, nrow = 2)
}
calcular_graficar_d_ice(modelo = modelo_rf,
                         X = datos_x
                         y = datos y,
                         predictores = c("crim", "indus", "dis", "lstat"),
                         frac_to_build = 1,
                         pdp = TRUE
```



Anexos

Función plot.dice corregida

La función plot.ice() del paquete ICEbox parece generar un error cuando se especifica que no se muestre la curva PDP (plot_pdp = FALSE). A continuación, se muestra una ligera modificación de la función que incluye las siguientes líneas de código y que soluciona el error.

```
else{
   pdp = NULL
}
```

```
plot.ice <- function (x, plot_margin = 0.05, frac_to_plot = 1,
                      plot_points_indices = NULL,
                      plot orig pts preds = TRUE, pts preds size = 1.5, colorvec,
                      color by = NULL, x quantile = FALSE, plot pdp = TRUE,
                      centered = FALSE, prop_range_y = TRUE,
                      rug quantile = seq(from = 0, to = 1, by = 0.1),
                      centered_percentile = 0, point_labels = NULL,
                      point_labels_size = NULL, prop_type = "sd", ...)
 DEFAULT_COLORVEC = c("firebrick3", "dodgerblue3", "gold1",
                       "darkorchid4", "orange4", "forestgreen", "grey", "black")
 if (class(x) != "ice") {
   stop("object is not of class \"ice\"")
 if (frac to plot <= 0 | frac to plot > 1) {
   stop("frac_to_plot must be in (0,1]")
 if (!(prop_type %in% c("sd", "range"))) {
   stop("prop_type must be either 'sd' or 'range'")
 grid = x$gridpts
 n grid = length(grid)
 ecdf fcn = NULL
 if (x_quantile) {
   ecdf_fcn = ecdf(grid)
   grid = ecdf fcn(grid)
 ice curves = x$ice curves
 N = nrow(ice curves)
 if (!is.null(point_labels)) {
  if (length(point_labels) != N) {
```

```
stop("point labels must be same length as number of ICE curves: ",
           N)
    }
  }
  legend_text = NULL
  if (missing(colorvec) && missing(color_by)) {
    colorvec = sort(rgb(rep(0.4, N), rep(0.4, N), rep(0.4, N))
                                                       N), runif(N, 0.4, 0.8)))
  if (!missing(colorvec) && !missing(color_by)) {
    if (!missing(colorvec) && length(colorvec) < N) {</pre>
      stop("color vector has length ", length(colorvec),
           " but there are ", N, " lines to plot")
    }
  if (!missing(color by) && missing(colorvec)) {
    arg_type = class(color_by)
    if (!(arg_type %in% c("character", "numeric", "factor"))) {
      stop("color by must be a column name in X or a column index")
    if (class(color_by) == "character") {
      if (!(color_by %in% names(x$Xice))) {
        stop("The predictor name given by color by was not found in the X matrix")
      x_color_by = x$Xice[, color_by]
    else if (length(color by) > N) {
      stop("The color_by_data vector you passed in has ",
           length(color by), " entries but the ICEbox object only has ",
           N, " curves.")
    else if (length(color_by) == N) {
      x color by = color by
    }
    else {
      if (color by < 1 | color by > ncol(x$Xice) | (color by\%1 !=
        stop("color_by must be a column name in X or a column index")
      x_color_by = x$Xice[, color_by]
    x unique = sort(unique(x color by))
    num x color_by = length(x_unique)
    if (num_x_color_by <= 10) {</pre>
      if (missing(colorvec)) {
        which_category = match(x_color_by, x_unique)
        colorvec = DEFAULT_COLORVEC[which_category]
      legend_text = as.data.frame(cbind(x_unique,
DEFAULT_COLORVEC[1:num_x_color_by]))
```

```
x column name = ifelse(length(color by) == N, "data vector level",
                             ifelse(is.character(color by),
                                    color_by,
                                    paste("x_", color_by, sep = "")))
      names(legend_text) = c(x_column_name, "color")
      cat("ICE Plot Color Legend\n")
      print(legend text, row.names = FALSE)
    else {
      if (is.factor(x color by)) {
        warning("color_by is a factor with greater than 10 levels: coercing to
numeric.")
       x color by = as.numeric(x color by)
      alpha_blend_colors = matrix(0, nrow = N, ncol = 3)
      alpha_blend_colors[, 1] = seq(from = 1, to = 0, length.out = N)
      alpha_blend_colors[, 2] = seq(from = 0, to = 1, length.out = N)
      alpha blend colors[, 3] = 0
      rgbs = array(NA, N)
      for (i in 1:N) {
        rgbs[i] = rgb(alpha_blend_colors[i, 1],
                      alpha_blend_colors[i, 2],
                      alpha blend colors[i, 3])
      colorvec = rgbs[sort(x color by, index.return = T)$ix]
      cat("ICE Plot Color Legend: red = low values of the color by variable and
green = high values\n")
    }
  if (is.null(plot points indices)) {
    plot_points_indices = sample(1:N, round(frac_to_plot *
                                              N))
  }
  else {
    if (frac to plot < 1) {</pre>
      stop("frac_to_plot has to be 1 when plot_points_indices is passed to the plot
function.")
    }
  ice_curves = ice_curves[plot_points_indices, ]
  if (nrow(ice curves) == 0) {
    stop("no rows selected: frac to plot too small.")
  if (centered) {
    centering vector = ice curves[, max(ncol(ice curves) *
                                          centered percentile, 1)]
    ice_curves = ice_curves - centering_vector
  }
  colorvec = colorvec[plot_points_indices]
  min_ice_curves = min(ice_curves)
```

```
max ice curves = max(ice curves)
  range ice curves = max ice curves - min ice curves
  min_ice_curves = min_ice_curves - plot_margin * range_ice_curves
  max ice curves = max_ice_curves + plot_margin * range_ice_curves
  arg_list = list(...)
  arg_list = modifyList(arg_list, list(x = grid, y = ice_curves[1,
                                                                 ]))
  if (is.null(arg list$xlab)) {
    xlab = x$xlab
    arg list = modifyList(arg list, list(xlab = xlab))
    if (x_quantile) {
      xlab = paste("quantile(", xlab, ")", sep = "")
      arg list = modifyList(arg list, list(xlab = xlab))
    if (!missing(color_by)) {
      xlab = paste(xlab, "colored by", ifelse(length(color_by) ==
                                                N, "a provided data vector",
color by))
      arg list = modifyList(arg list, list(xlab = xlab))
  if (is.null(arg_list$ylab)) {
    if (x$logodds) {
      ylab = "partial log-odds"
      arg list = modifyList(arg list, list(ylab = ylab))
    else if (x$probit) {
      ylab = "partial probit"
      arg_list = modifyList(arg_list, list(ylab = ylab))
   else {
     ylab = paste("partial yhat", ifelse(centered, "(centered)",
      arg list = modifyList(arg list, list(ylab = ylab))
    }
  if (is.null(arg_list$xaxt)) {
    xaxt = ifelse(x$nominal_axis, "n", "s")
    arg_list = modifyList(arg_list, list(xaxt = xaxt))
  if (is.null(arg list$ylim)) {
   ylim = c(min ice curves, max ice curves)
    arg_list = modifyList(arg_list, list(ylim = ylim))
  if (is.null(arg list$type)) {
   tvpe = "n"
    arg_list = modifyList(arg_list, list(type = type))
  do.call("plot", arg_list)
  if (x$nominal_axis) {
```

```
axis(1, at = sort(x$xj), labels = sort(x$xj), cex.axis = arg list$cex.axis)
}
if (centered && prop_range_y && !x$logodds && !x$probit) {
  at = seq(min(ice_curves), max(ice_curves), length.out = 5)
  at = at - min(abs(at))
  if (prop_type == "range") {
    labels = round(at/x$range y, 2)
 }
  else {
    labels = round(at/x$sd y, 2)
  axis(4, at = at, labels = labels, cex.axis = arg list$cex.axis)
for (i in 1:nrow(ice_curves)) {
  points(grid, ice_curves[i, ], col = colorvec[i], type = "1")
if (plot_orig_pts_preds) {
  yhat actual = x$actual prediction[plot points indices]
  if (centered) {
    yhat_actual = yhat_actual - centering_vector
  if (x_quantile) {
   xj = ecdf_fcn(x$xj)[plot_points_indices]
  else {
   xj = x$xj[plot_points_indices]
  for (i in 1:length(xj)) {
    points(xj[i], yhat_actual[i], col = rgb(0.1, 0.1,
                                            0.1), pch = 16, cex = pts preds size)
    points(xj[i], yhat_actual[i], col = colorvec[i],
           pch = 16, cex = round(pts_preds_size * 0.7))
  }
if (!is.null(point labels)) {
  text(xj, yhat actual, pos = 4, labels = point labels[plot points indices],
       cex = ifelse(is.null(point_labels_size), pts_preds_size,
                    point_labels_size))
if (!is.null(rug_quantile) && !x_quantile) {
  axis(side = 1, line = -0.1, at = quantile(x$xj, rug_quantile),
       lwd = 0, tick = T, tcl = 0.4, lwd.ticks = 2, col.ticks = "blue4",
       labels = FALSE, cex.axis = arg list$cex.axis)
if (plot pdp) {
  pdp = apply(ice_curves, 2, mean)
  if (centered) {
    pdp = pdp - pdp[ceiling(length(pdp) * centered_percentile +
                              1e-05)]
```

Bibliografía

Goldstein, Alex & Kapelner, Adam & Bleich, Justin & Pitkin, Emil. (2013). Peeking Inside the Black Box: Visualizing Statistical Learning With Plots of Individual Conditional Expectation. Journal of Computational and Graphical Statistics.

This work by Joaquín Amat Rodrigo is licensed under a Creative Commons Attribution 4.0 International License.

https://github.com/kapelner/ICEbox



This work is licensed under a Creative Commons Attribution 4.0 International License.