T4 Árboles, bosques, bagging y boosting

Índice

- 1 CART
 - 1.1 Árbol de regresión
 - 1.2 Árbol de clasificación
- 2 Aprendizaje de ensambles
 - 2.1 Aprendizaje de ensambles
 - 2.2 Bagging
 - 2.3 Random forests
- 3 Boosting
 - 3.1 Boosting
 - 3.2 Modelado aditivo por etapas hacia adelante
 - 3.3 Boosting mínimos cuadrados
 - 3.4 AdaBoost
 - 3.4.1 Objetivo FSAM con pérdida exponencial
 - 3.4.2 Minimización del objetivo en dos pasos
 - 3.4.3 Adaboost
 - 3.4.4 Propiedades de Adaboost
 - 3.5 LogitBoost
 - 3.6 Gradient boosting
 - 3.6.1 Algoritmo básico
 - 3.6.2 Regresión
 - 3.6.3 Clasificación binaria

3.6.4 Clasificación multiclase

3.6.5 Gradient tree boosting

3.6.6 XGBoost

4 Interpretación de ensambles de árboles

4.1 Importancia de características4.2 Gráficos de dependencia parcial

1 CART

Classification and regression trees (CART): árboles que particionan el espacio de entrada recursivamente hasta alcanzar las hojas, cada una de ellas caracterizada por la región en la que se aplica y su (modelo de) predicción correspondiente

- Dada una entrada $m{x} \in \mathbb{R}^D$, un árbol puede verse como un conjunto de reglas de decisión anidadas hasta alcanzar las hojas
- Cada regla de decisión o **nodo interno** i define un **split paralelo a un eje:** compara una característica d_i de la entrada con un umbral t_i y, si $m{x}_{d_i} \leq t_i$, $m{x}$ se sigue procesando por la rama izquierda; si no, se procesa por la derecha
- El procesamiento de x termina al llegar a un nodo hoja, donde se especifica la salida predicha para toda entrada dentro de su región asociada, esto es, la región acorde con los splits definidos en sus nodos antecesores

1.1 Árbol de regresión

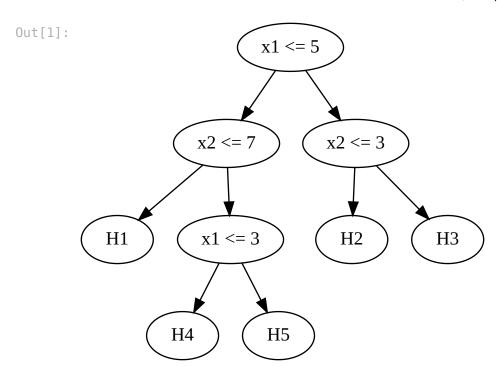
Árbol de regresión: $\theta = \{(R_i, w_i) : j = 1 : J\}$, de J hojas, donde R_i y w_i denotan la región y salida asociadas a la hoja j

$$f(oldsymbol{x};oldsymbol{ heta}) = \sum_{j=1}^J w_j \, \mathbb{I}(oldsymbol{x} \in R_j)$$

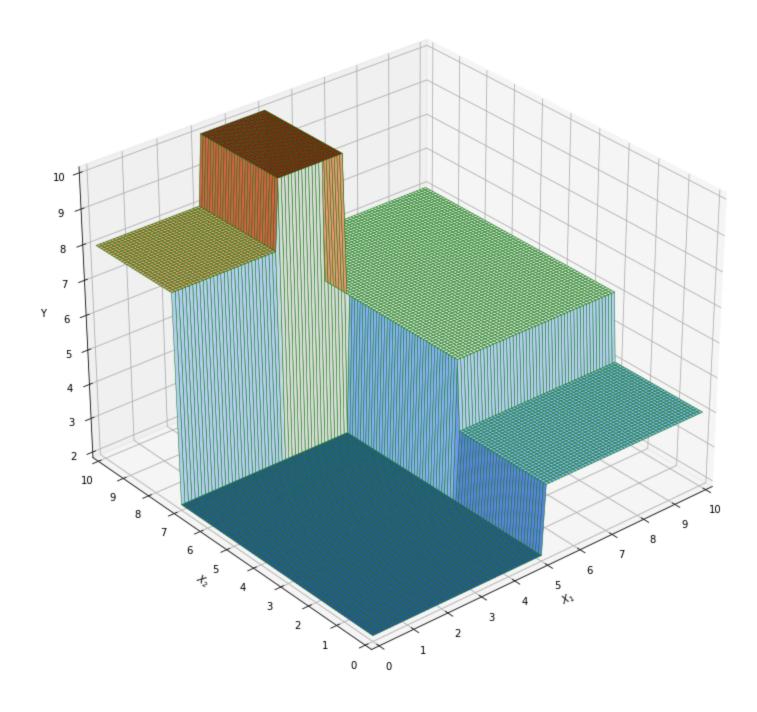
Aprendizaje de las salidas: se suele usar la media de las salidas de los datos de entrenamiento en cada hoja

Ejemplo: árbol de regresión para entradas 2d con 4 nodos internos y 5 hojas

```
In [1]: from graphviz import Digraph
        t = Digraph()
        t.node('N1', 'x1 <= 5');
        with t.subgraph() as s:
            s.attr(rank='same')
            s.node('N2', 'x2 <= 7')
            s.node('N3', 'x2 <= 3')
        with t.subgraph() as s:
            s.attr(rank='same')
            s.node('H1')
            s.node('N4', 'x1 <= 3')
            s.node('H2')
            s.node('H3')
        with t.subgraph() as s:
            s.attr(rank='same')
            s.node('H4')
            s.node('H5')
        t.edge('N1', 'N2'); t.edge('N1', 'N3')
        t.edge('N2', 'H1'); t.edge('N2', 'N4')
        t.edge('N3', 'H2'); t.edge('N3', 'H3')
        t.edge('N4', 'H4'); t.edge('N4', 'H5')
        t
```



```
In [2]:
        import numpy as np
        import matplotlib.pyplot as plt
        x11 = 5; x12 = 3; x21 = 7; x22 = 3 \# umbrales de corte
        h = 0.1; M = 10; X1 = X2 = np.arange(0, M + h, h)
        L1 = X1 \le x11; R1 = X2 \le x21 \# hoja 1
        L2 = X1 > x11; R2 = X2 <= x22 # hoja 2
        L3 = X1 > x11; R3 = X2 > x22 # hoja 3
        L4 = X1 \iff min(x11, x22); R4 = X2 > x21 \# hoja 4
        L5 = (X1 \le X11) \& (X1 > X12); R5 = X2 > X21 # hoja 5
        tree = np.zeros((len(X1), len(X2)))
        r = np.arange(2, 12, 2) # [ 2 4 6 8 10]
        for i in range(len(tree)):
            for j in range(len(tree[0])):
                if L1[i] & R1[j]:
                    tree[i, j] = r[0] # salida de la hoja 1
                if L2[i] & R2[j]:
                    tree[i, j] = r[1] # salida de la hoja 2
                if L3[i] & R3[j]:
                    tree[i, j] = r[2] # salida de la hoja 3
                if L4[i] & R4[j]:
```



1.2 Árbol de clasificación

Árbol de clasificación: las hojas contienen una distribución sobre las etiquetas de clase en lugar de una respuesta promedio

1.2 Ajuste

Ajuste de un árbol de J hojas: $\,$ minimización en $oldsymbol{ heta}=\{(R_j,w_j):j=1:J\}$ de la pérdida empírica

$$\mathcal{L}(oldsymbol{ heta}) = \sum_n \ell(y_n, f(oldsymbol{x}; oldsymbol{ heta})) = \sum_j \sum_{oldsymbol{x}_n \in R_j} \ell(y_n, w_j)$$

Dificultad: la pérdida no es diferenciable pues debemos aprender la estructura del árbol y encontrar una óptima es un problema NP-duro

Soluciones aproximadas: métodos voraces como **CART, C4.5 o ID3,** que hacen crecer el árbol añadiendo un nodo en cada iteración

1.2.1 Splits de un nodo

Splits de un nodo i con base en una característica j: a partir de los datos que alcanzan i, $\mathcal{D}_i = \{(m{x}_n, y_n)\}$

- Si j es real, podemos definir un split por cada umbral $t\in\mathcal{T}_j$, con $\mathcal{T}_j=\{x_{nj}\}$ por ejemplo, tal que:

$$egin{aligned} \mathcal{D}_i^L(j,t) &= \{(oldsymbol{x}_n, y_n) \in \mathcal{D}_i : x_{nj} \leq t\} \ \mathcal{D}_i^R(j,t) &= \{(oldsymbol{x}_n, y_n) \in \mathcal{D}_i : x_{nj} > t\} \end{aligned}$$

- Si j es categórica, podemos definir un split por cada t igual a K_j valores posibles

$$egin{aligned} \mathcal{D}_i^L(j,t) &= \{(oldsymbol{x}_n, y_n) \in \mathcal{D}_i : x_{nj} = t\} \ \mathcal{D}_i^R(j,t) &= \{(oldsymbol{x}_n, y_n) \in \mathcal{D}_i : x_{nj}
eq t\} \end{aligned}$$

1.2.2 Elección del mejor split

Coste o impureza de un nodo: definimos una función $c(\cdot)$ para evaluarla, independiente del tamaño del nodo

Mejor split de un nodo i: uno que reduzca al máximo su coste, esto es, que minimice la suma de los costes normalizados de los hijos

$$c(j_i,t_i) = rg\min_{j \in \{1,\dots,D\}} \min_{t \in \mathcal{T}_j} \ rac{|\mathcal{D}_i^L(j,t)|}{|\mathcal{D}_i|} \, c(\mathcal{D}_i^L(j,t)) + rac{|\mathcal{D}_i^R(j,t)|}{|\mathcal{D}_i|} \, c(\mathcal{D}_i^R(j,t))$$

Coste de un nodo en regresión: se suele usar el **error cuadrático medio** (con respecto a la respuesta media del nodo)

$$c(\mathcal{D}_i) = rac{1}{|\mathcal{D}_i|} \sum_{(m{x}_n, y_n) \in \mathcal{D}_i} (y_n - ar{y})^2 \qquad ext{con} \qquad ar{y} = rac{1}{|\mathcal{D}_i|} \sum_{(m{x}_n, y_n) \in \mathcal{D}_i} y_n$$

Coste de un nodo en clasificación: las funciones usuales se basan en la distribución empírica de las clases en el nodo

$$\hat{\pi}_{ic} = rac{1}{|\mathcal{D}_i|} \sum_{(oldsymbol{x}_n, y_n) \in \mathcal{D}_i} \mathbb{I}(y_n = c)$$

Índice Gini: mide el error de clasificación esperado en el nodo i; esto es, la probabilidad de que un dato al azar se clasifique mal si su clase se determina aleatoriamente según las probabilidades de las clases

$$G_i = \sum_c \hat{\pi}_{ic} (1 - \hat{\pi}_{ic}) = \sum_c \hat{\pi}_{ic} - \sum_c \hat{\pi}_{ic}^2 = 1 - \sum_c \hat{\pi}_{ic}^2$$

Entropía: de la distribución empírica de las clases en el nodo

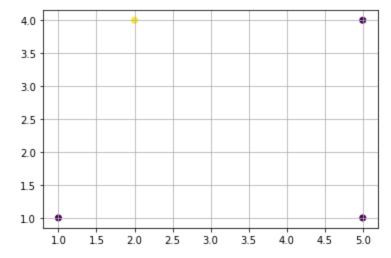
$$H_i = \mathbb{H}(\hat{oldsymbol{\pi}}_i) = -\sum_c \hat{\pi}_{ic} \log \hat{\pi}_{ic}$$

• Mínima entropía: $\hat{\pi}_{ic} = \delta(c=c^*) \, \Rightarrow \, H_i = -1\log 1 - \sum_{c
eq c^*} 0 \, \log 0 = 0$

• Máxima entropía: $\hat{\pi}_{ic}=1/C \Rightarrow H_i=-\sum_{c=1}^C rac{1}{C}\log rac{1}{C}=-\log rac{1}{C}=\log C$

Ejemplo: $\mathcal{D}_i = \{((1,1)^t,1), ((2,4)^t,2), ((5,1)^t,1), ((5,4)^t,1)\}$

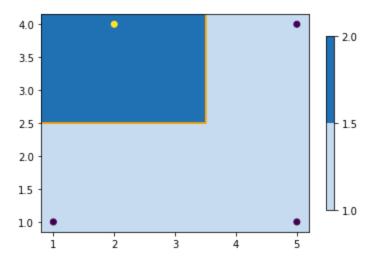
```
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
from sklearn.tree import DecisionTreeClassifier, plot_tree
X = np.array(([1, 1], [2, 4], [5, 1], [5, 4]), dtype=float)
y = np.array([1, 2, 1, 1])
plt.grid(); plt.scatter(*X.T, c=y);
```



```
In [2]: dt = DecisionTreeClassifier(criterion='entropy').fit(X, y) # prueba 'gini' y 'entropy'
plt.figure(figsize=(7, 7))
plot_tree(dt, filled=True, rounded=True, fontsize=16);
```

```
x[1] \le 2.5
        entropy = 0.811
         samples = 4
         value = [3, 1]
                   x[0] \le 3.5
entropy = 0.0
                  entropy = 1.0
samples = 2
                   samples = 2
value = [2, 0]
                  value = [1, 1]
         entropy = 0.0
                            entropy = 0.0
         samples = 1
                            samples = 1
         value = [0, 1]
                            value = [1, 0]
```

```
In [3]: fix, ax = plt.subplots()
    ax.scatter(*X.T, c=y); x_min, x_max = ax.get_xlim(); y_min, y_max = ax.get_ylim()
    xx, yy = np.meshgrid(np.linspace(x_min, x_max, num=1000), np.linspace(y_min, y_max, num=1000))
    zz = dt.predict(np.c_[xx.ravel(), yy.ravel()])
    ax.contour(xx, yy, zz.reshape(xx.shape), 1, colors='orange', linestyles='solid')
    cp = ax.contourf(xx, yy, zz.reshape(xx.shape), 1, cmap='Blues')
    plt.colorbar(cp, ax=ax, shrink=0.8); ax.scatter(*X.T, c=y);
```



1.3 Regularización

Sobre-entrenamiento: si dejamos que un árbol crezca incontroladamente, podemos ajustarlo de manera que no cometa ningún error en entrenamiento (salvo ruido de etiquetas), pero funcione mal con datos futuros

Regularización: se suelen aplicar técnicas que limitan el tamaño del árbol

Aproximación directa: parar el crecimiento al tener pocos ejemplos en un nodo o alcanzar una profundidad máxima

Aproximación alternativa: dejar crecer el árbol al máximo y luego podarlo de hijos a padres mediante fusión de hijos

1.4 Características perdidas

Ventaja: a diferencia de otros modelos discriminativos, el manejo de datos con características perdidas es sencillo con árboles

Splits subrogados: heurístico estándar que, en caso de pérdida de una variable en inferencia, emplea variables de reserva que inducen particiones similares a las que induce la variable perdida

Variables categóricas perdidas: se añade un nuevo valor "perdido" y los datos se tratan como complemente observados

1.5 Ventajas e incovenientes

1.5.1 Ventajas

- Son fáciles de interpretar
- Manejan fácilmente entradas mixtas, discretas y continuas
- Son insensibles a transformaciones monótonas de las entradas ya que los puntos de split se basan en la ordenación de los datos, por lo que no es necesario estandarizarlos
- Realizan selección de variables automáticamente
- De ajuste rápido y fácil escalado a grandes conjuntos de datos
- Pueden manejar características de entrada perdidas

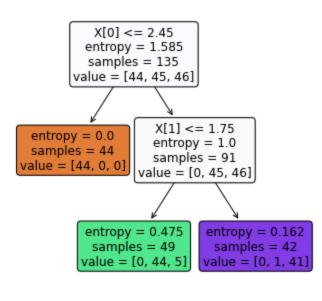
1.5.2 Incovenientes

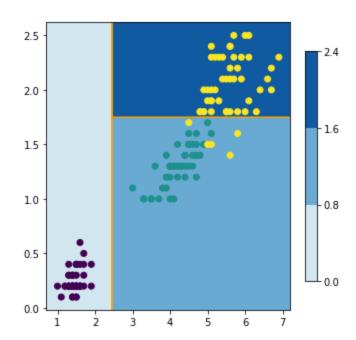
- No son muy precisos, debido en parte a su construcción voraz
- **Inestabilidad:** pequeños cambios en los datos de entrada pueden tener grandes consecuencias en la estructura del árbol

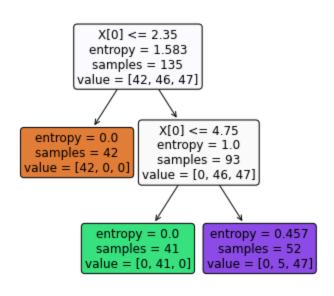
Ejemplo: inestabilidad con iris

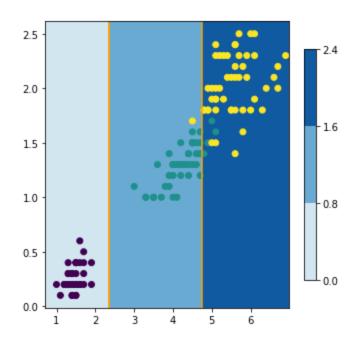
```
In [1]: import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
from sklearn.datasets import load_iris
from sklearn.model_selection import train_test_split
from sklearn.tree import DecisionTreeClassifier, plot_tree
iris = load_iris()
ndx = [2, 3] # petal length and width
X = iris.data[:, ndx]
y = iris.target
In [2]: nrows = 3
fig, axes = plt.subplots(nrows, 2, figsize=(12, 6 * nrows))
```

```
for n in np.arange(nrows):
    X_train, X_test, y_train, y_test = train_test_split(X, y, test_size=0.1, shuffle=True)
    dt = DecisionTreeClassifier(criterion='entropy', max_depth=2).fit(X_train, y_train)
    plot_tree(dt, filled=True, rounded=True, ax=axes[n, 0], fontsize=12);
    ax = axes[n, 1]; ax.scatter(*X_train.T, c=y_train); x_min, x_max = ax.get_xlim(); y_min, y_max = ax.get
    xx, yy = np.meshgrid(np.linspace(x_min, x_max, num=1000), np.linspace(y_min, y_max, num=1000))
    zz = dt.predict(np.c_[xx.ravel(), yy.ravel()])
    ax.contour(xx, yy, zz.reshape(xx.shape), 2, colors='orange', linestyles='solid')
    cp = ax.contourf(xx, yy, zz.reshape(xx.shape), 2, cmap='Blues')
    plt.colorbar(cp, ax=ax, shrink=0.8); ax.scatter(*X.T, c=y);
```

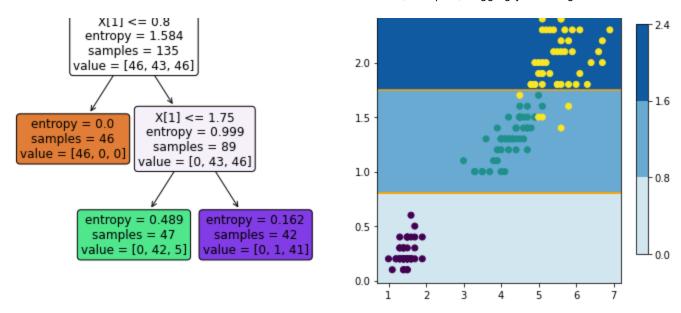








2.5 -



2 Aprendizaje de ensambles

Los árboles constituyen un estimador de alta varianza: pequeñas perturbaciones de los datos resultan en predicciones muy distintas

2.1 Aprendizaje de ensambles

Aprendizaje de ensambles: reduce la varianza de los árboles promediando M modelos base $\{f_m\}$

$$f(y \mid oldsymbol{x}) = rac{1}{M} \sum_{m=1}^M f_m(y \mid oldsymbol{x})$$

Ensamble en regresión: estimador de sesgo similar al de los modelos base pero, en general, de mejor precisión por la menor varianza

Ensamble en clasificación: la salida se decide por el método comité, esto es, por voto mayoritario

Probabilidad de acierto de un comité: M modelos base independientes para clasificación binaria; todos con probabilidad de acierto θ

- Dada una muestra la clase 1, la clase escogida por el modelo base m puede verse com una Bernoulli $Y_m \in \{0,1\}$, para todo m
- Así, la suma de los votos a la clase 1, $S=\sum_m Y_m$, es una binomial $\mathrm{Bin}(M, heta)$
- En definitiva, la probabilidad de acierto del comité puede hallarse a partir de la función de distribución binomial:

$$p = P(S > M/2) = 1 - B(M/2, M, \theta)$$
 (B es la función de distribución binomial)

```
In [1]: from scipy.stats import binom
M = 1000; theta = 0.51
p = 1.0 - binom.cdf(M/2, M, theta)
print('{} predictores independientes con theta = {:.4f} acertarán con p = {:.4f}'.format(M, theta, p))
```

1000 predictores independientes con theta = 0.5100 acertarán con p = 0.7261

2.2 Bagging

Bagging (bootstrap aggregating): ensambla M modelos ajustados con diferentes versiones de los datos, obtenidas por boostraping (muestreo con reemplazamiento)

Desventaja: cada modelo base ve un 63% de datos aprox.; en el límite, la probabilidad de que un dato no se seleccione es

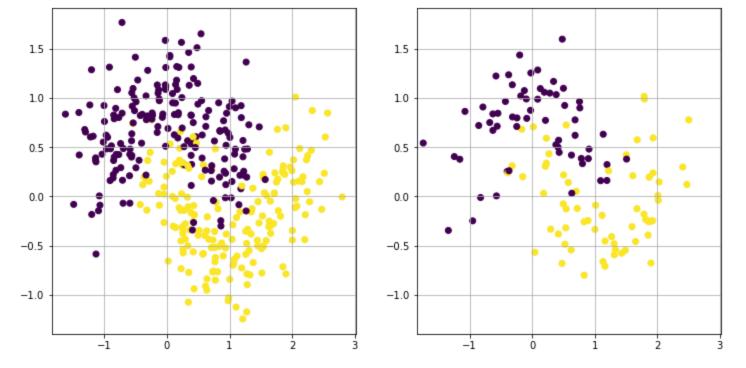
$$p = \lim_{N o \infty} (1 - 1/N)^N = e^{-1} pprox 0.37$$

Ventaja: el 37% de muestras **out-of-bag** puede usarse en test

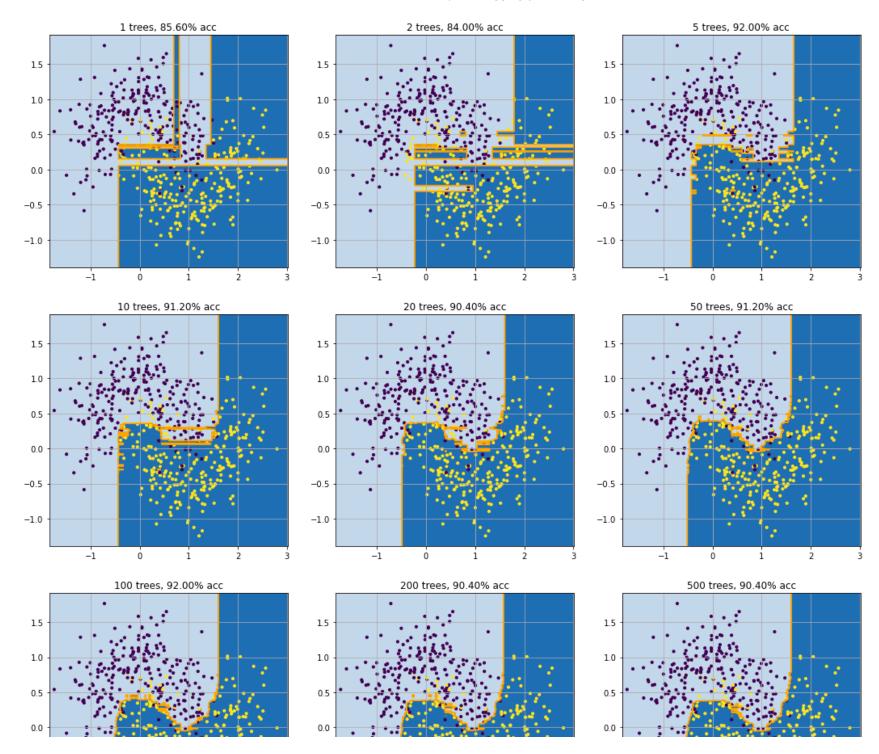
Ventaja principal: el ensamble no depende demasiado de ningún dato individual, lo que favorece mayor robustez y generalización

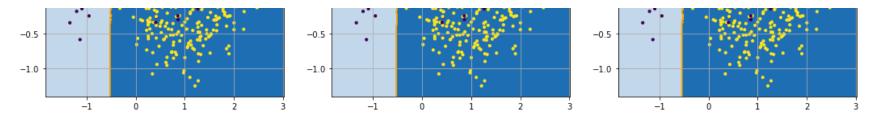
Ejemplo: bagging de árboles

```
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
from sklearn.datasets import make_moons
from sklearn.model_selection import train_test_split
X, y = make_moons(n_samples=500, noise=0.30, random_state=42)
X_train, X_test, y_train, y_test = train_test_split(X, y, random_state=42)
fig, axes = plt.subplots(1, 2, figsize=(12, 6))
ax=axes[0]; ax.grid(); ax.scatter(*X_train.T, c=y_train)
x_min, x_max = ax.get_xlim(); y_min, y_max = ax.get_ylim()
ax=axes[1]; ax.grid(); ax.scatter(*X_test.T, c=y_test)
ax.set_xlim(x_min, x_max); ax.set_ylim(y_min, y_max);
```



```
In [2]: from sklearn.tree import DecisionTreeClassifier
    from sklearn.ensemble import BaggingClassifier
    from sklearn.metrics import accuracy_score
    bag_sizes = [1, 2, 5, 10, 20, 50, 100, 200, 500]; n_bag_sizes = len(bag_sizes)
    nrows = ncols = int(np.ceil(np.sqrt(n_bag_sizes)));
    fig, axes = plt.subplots(nrows, ncols, figsize=(18, 18))
    for i, bag_size in enumerate(bag_sizes):
```





Ejemplo: clasificación de correos en spam y no-spam

```
import pandas as pd
In [31:
        import numpy as np
        from sklearn.ensemble import BaggingClassifier
        from sklearn.metrics import accuracy score
        df = pd.read csv("https://github.com/empathy87/The-Elements-of-Statistical-Learning-Python-Notebooks/blob/
        is test = df.test.values; y = df.spam.values; X = df.drop(['test','spam'], axis=1).to numpy(copy=True)
        X train, X test = X[is test == 0], X[is test == 1]
        y_train, y_test = y[is_test == 0], y[is test == 1]
        ntrees list = [10, 50, 100, 200, 300, 400, 500]
        for ntrees in ntrees list:
            clf = BaggingClassifier(n estimators=ntrees, random state=10, bootstrap=True).fit(X train, y train)
            y test hat = clf.predict(X test)
            acc = accuracy score(y test, y test hat)
            print(f'Bagged {ntrees} trees, test err {1 - acc:.1%}')
       Bagged 10 trees, test err 5.9%
       Bagged 50 trees, test err 5.5%
       Bagged 100 trees, test err 5.4%
       Bagged 200 trees, test err 5.5%
       Bagged 300 trees, test err 5.5%
       Bagged 400 trees, test err 5.4%
       Bagged 500 trees, test err 5.6%
```

2.3 Random forests

Random forests: variante de bagging de árboles que mejora la decorrelación de modelos base mediante aleatorización, no solo de datos, sino también de variables de entrada; así, la característica de split j_i se optimiza sobre un conjunto aleatorio $S_i \subseteq \{1, \ldots, D\}$,

$$(j_i, t_i) = rg \min_{j \in S_i} \min_{t \in \mathcal{T}_j} \; rac{|\mathcal{D}_i^L(j, t)|}{|\mathcal{D}_i|} \, c(\mathcal{D}_i^L(j, t)) + rac{|\mathcal{D}_i^R(j, t)|}{|\mathcal{D}_i|} \, c(\mathcal{D}_i^R(j, t))$$

Ventaja frente a bagging: los bosques suelen ser más precisos que bagging pues muchas características son irrelevantes

Ventaja frente a boosting: los aprendices pueden entrenarse en paralelo, cosa que no puede hacerse en boosting

Ejemplo: clasificación de correos en spam y no-spam

```
In [1]: import pandas as pd
        import numpy as np
        from sklearn.ensemble import RandomForestClassifier
        from sklearn.metrics import accuracy score
        df = pd.read csv("https://github.com/empathy87/The-Elements-of-Statistical-Learning-Python-Notebooks/blob/
        is test = df.test.values; y = df.spam.values; X = df.drop(['test','spam'], axis=1).to numpy(copy=True)
        X train, X test = X[is test == 0], X[is test == 1]
        y train, y test = y[is test == 0], y[is test == 1]
        ntrees list = [10, 50, 100, 200, 300, 400, 500]
        for ntrees in ntrees list:
            clf = RandomForestClassifier(n estimators=ntrees, random state=10).fit(X train, y train)
            y test hat = clf.predict(X test)
            acc = accuracy score(y test, y test hat)
            print(f'RF {ntrees} trees, test err {1 - acc:.1%}')
       RF 10 trees, test err 6.3%
       RF 50 trees, test err 5.0%
       RF 100 trees, test err 4.9%
       RF 200 trees, test err 4.8%
       RF 300 trees, test err 4.9%
```

3 Boosting

RF 400 trees, test err 4.8% RF 500 trees, test err 4.8%

3.1 Boosting

Modelo aditivo de funciones base adaptativas: ensamble visto como suma de modelos base, no necesariamente árboles

$$f(oldsymbol{x};oldsymbol{ heta}) = \sum_{m=1}^M eta_m \, F_m(oldsymbol{x};oldsymbol{ heta}_m)$$

Objetivo: minimizar la pérdida empírica (con regularizador)

$$\mathcal{L}(f) = \sum_{i=1}^N \ell(y_i, f(oldsymbol{x}_i))$$

Boosting (potenciación): ajusta secuencialmente modelos aditivos de clasificadores binarios, $F_m \in \{-1, +1\}$

- Primero ajusta F_1 a los datos y se ponderan con más peso los errores
- Luego ajusta F_2 a los datos ponderados en el paso anterior
- ullet El proceso sigue hasta llegar a M componentes
- Si la precisión de cada **weak learner** F_m es mejor que el azar (50%), la del **strong learner** f será aún mejor

Ventaja frente a bagging y bosques: ofrece mejores resultados pues reduce el sesgo del aprendiz fuerte ajustando árboles que dependen unos de otros; bagging y bosques solo reducen la varianza ajustando árboles independientes

Evolución: propuesto en aprendizaje PAC para clasificación binaria con pérdida específica; actualmente se plantea bajo un marco estadístico general, con pérdidas diversas para extender su aplicación a regresión, clasificación multi-clase, ranking, etc.

Ejemplo: clasificación de correos en spam y no-spam

```
import pandas as pd
import numpy as np
from catboost import CatBoostClassifier
from sklearn.metrics import accuracy_score
df = pd.read_csv("https://github.com/empathy87/The-Elements-of-Statistical-Learning-Python-Notebooks/blob/ris_test = df.test.values; y = df.spam.values; X = df.drop(['test','spam'], axis=1).to_numpy(copy=True)
```

```
Boosting 10 trees, test err 6.2%
Boosting 50 trees, test err 5.4%
Boosting 100 trees, test err 4.7%
Boosting 200 trees, test err 4.6%
Boosting 300 trees, test err 4.8%
Boosting 400 trees, test err 4.6%
Boosting 500 trees, test err 4.4%
```

3.2 Modelado aditivo por etapas hacia adelante

Forward stagewise additive modeling (FSAM): optimiza la empírica con pérdida genérica y f modelo aditivo

Objetivo FSAM (para el modelo base m): empírica con pérdida genérica, $\ell(y,\hat{y})$

$$L_m(oldsymbol{eta},oldsymbol{ heta}) = \sum_{i=1}^N \ell(y_i,f_{m-1}(oldsymbol{x}_i) + eta F(oldsymbol{x}_i;oldsymbol{ heta}))$$

Minimización del objetivo y reajuste del modelo: $(eta_m,m{ heta}_m)= \mathrm{argmin}_{eta,m{ heta}} \ L_m(eta,m{ heta})$

$$f_m(oldsymbol{x}) = f_{m-1}(oldsymbol{x}) + eta_m F_m(oldsymbol{x}) \qquad ext{con} \qquad F_m(oldsymbol{x}) = F(oldsymbol{x};oldsymbol{ heta}_m)$$

3.3 Boosting mínimos cuadrados

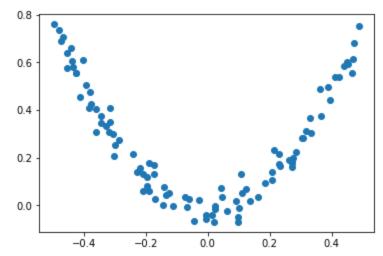
Objetivo FSAM con pérdida cuadrática: $\ell(y,\hat{y}) = (y-\hat{y})^2$

$$L_m(eta,oldsymbol{ heta}) = \sum_{i=1}^N (r_{im} - eta F(oldsymbol{x}_i;oldsymbol{ heta}))^2 \qquad ext{con residuos} \qquad r_{im} = y_i - f_{m-1}(oldsymbol{x}_i)$$

Boosting mínimos cuadrados: minimiza el objetivo fijando eta=1 y ajustando F a los residuos

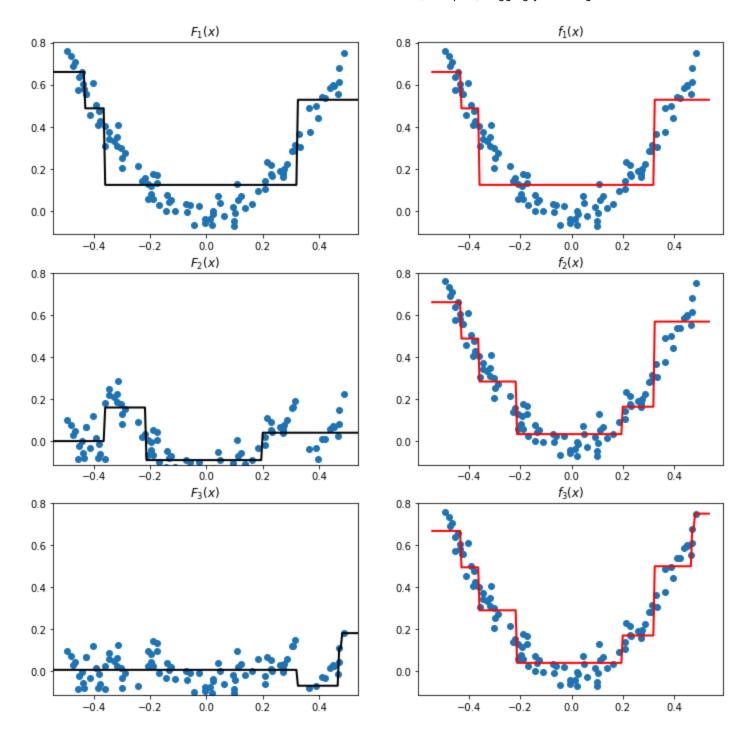
Ejemplo: regresión simple con boosting mínimos cuadrados

```
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
np.random.seed(42)
X = np.random.rand(100, 1) - 0.5
y = 3 * X[:, 0] ** 2 + 0.05 * np.random.randn(100)
fig, ax = plt.subplots(figsize=(6, 4)); ax.scatter(X, y)
x_min, x_max = ax.get_xlim(); y_min, y_max = ax.get_ylim()
```



```
In [2]: from sklearn.tree import DecisionTreeRegressor
M = 3; fig, axes = plt.subplots(M, 2, figsize=(12, M * 4))
res = np.copy(y); tt = []; xx = np.linspace(x_min, x_max, 200)
for m in np.arange(M):
    tree = DecisionTreeRegressor(max_depth=2, random_state=42)
    tree.fit(X, res); tt.append(tree)
    ax = axes[m, 0]
    ax.set_title('$F_{{}}(x)$'.format(m+1))
    ax.set_xlim(x_min, x_max); ax.set_ylim(y_min, y_max)
    ax.scatter(X, res)
    res_pred = tree.predict(xx.reshape(-1, 1))
    ax.plot(xx, res_pred, 'k-', linewidth=2)
    ax = axes[m, 1]
```

```
ax.set_title('$f_{}(x)$'.format(m+1))
ax.scatter(X, y)
y_pred = sum(t.predict(xx.reshape(-1, 1)) for t in tt)
ax.plot(xx, y_pred, 'r-', linewidth=2)
res -= tree.predict(X)
```



3.4 AdaBoost

3.4.1 Objetivo FSAM con pérdida exponencial

Si
$$\ell(ilde{y}, \hat{y}) = \exp(- ilde{y}\hat{y})$$
 con $ilde{y} \in \{-1, +1\}$

$$egin{aligned} L_m(eta,oldsymbol{ heta}) &= \sum_{i=1}^N \exp(- ilde{y}_i(f_{m-1}(oldsymbol{x}_i) + eta F(oldsymbol{x}_i;oldsymbol{ heta}))) \ &= \sum_{i=1}^N w_{im} \exp(-eta ilde{y}_i F(oldsymbol{x}_i;oldsymbol{ heta})) \quad ext{con} \quad w_{im} = \exp(- ilde{y}_i f_{m-1}(oldsymbol{x}_i)) \ &= e^eta \sum_{oldsymbol{y}_i
eq F(oldsymbol{x}_i;oldsymbol{ heta})} w_{im} + e^{-eta} \left(\sum_{i=1}^N w_{im} - \sum_{oldsymbol{y}_i
eq F(oldsymbol{x}_i;oldsymbol{ heta})} w_{im}
ight) \ &= (e^eta - e^{-eta}) \sum_{i=1}^N w_{im} \mathbb{I}(ilde{y}_i
eq F(oldsymbol{x}_i;oldsymbol{ heta})) + e^{-eta} \sum_{i=1}^N w_{im} \end{aligned}$$

3.4.2 Minimización del objetivo en dos pasos

Primero hallamos $oldsymbol{ heta}_m$ a partir de los datos ponderados:

$$oldsymbol{ heta}_m = rgmin_{oldsymbol{ heta}} \sum_{i=1}^N w_{im} \mathbb{I}(ilde{y}_i
eq F(oldsymbol{x}_i; oldsymbol{ heta}))$$

Luego obtenemos β_m mediante minimización en β de $L_m(\beta, \boldsymbol{\theta}_m)$:

$$eta_m = rgmin_eta \ L_m(eta, oldsymbol{ heta}_m) = rac{1}{2} \log rac{1 - \operatorname{err}_m}{\operatorname{err}_m} \qquad \operatorname{con} \qquad \operatorname{err}_m = rac{1}{\sum_{i=1}^N w_{im}} \sum_{i=1}^N w_{im} \mathbb{I}(ilde{y}_i
eq F_m(oldsymbol{x}_i))$$

3.4.3 Adaboost

Adaboost: halla $F_m(\cdot)$ y eta_m en la iteración m y reajusta el modelo

Pesos de los datos para la primera iteración: $w_{i1}=1/N$

Pesos de los datos para la iteración m+1: se calculan tras hallar $F_m(\cdot)$ y eta_m en la iteración m

$$egin{aligned} w_{i,m+1} &= \exp(- ilde{y}_i f_m(oldsymbol{x}_i)) \ &= \exp(- ilde{y}_i f_{m-1}(oldsymbol{x}_i) - ilde{y}_i eta_m F_m(oldsymbol{x}_i)) \ &= w_{im} \exp(- ilde{y}_i eta_m F_m(oldsymbol{x}_i)) \ &= w_{im} \exp(eta_m (2\mathbb{I}(ilde{y}_i
eq F_m(oldsymbol{x}_i)) - 1)) \ &= w_{im} \exp(2eta_m \mathbb{I}(ilde{y}_i
eq F_m(oldsymbol{x}_i))) \exp(-eta_m) \end{aligned}$$

El factor $\exp(-\beta_m)$ se puede ignorar ya que es constante para todos los datos en el objetivo FSAM de la iteración m+1. Así pues, los pesos de los datos para la iteración m+1 son:

$$w_{i,m+1} = \left\{egin{array}{ll} w_{im} \exp(2eta_m) & ext{si $ ilde{y}$}_i
eq F_m(oldsymbol{x}_i) \ w_{im} & ext{en otro caso} \end{array}
ight.$$

Modelo ajustado para clasificación binaria: $f(m{x}) = \mathrm{sgn}(\sum_m eta_m F_m(m{x}))$

Modelos para regresión y clasificación multi-clase: se usan variantes de Adaboost convenientemente adaptadas

3.4.4 Propiedades de Adaboost

Sensibilidad a outliers: ya que los pesos de los datos mal clasificados crecen exponencialmente

Dificultad para estimar probabilidades: en teoría, el riesgo de un modelo $f(m{x})$ con pérdida exponencial es

$$\mathbb{E}[\exp(- ilde{y}f(oldsymbol{x}))\mid oldsymbol{x}] = p(ilde{y} = 1\mid oldsymbol{x})\exp(-f(oldsymbol{x})) + p(ilde{y} = -1\mid oldsymbol{x})\exp(f(oldsymbol{x}))$$

Derivando con respecto a f(x) e igualando a cero, tenemos que el modelo de mínimo riesgo teórico halla la mitad de la log-odds:

$$f(oldsymbol{x}) = rac{1}{2} \mathrm{log} \, rac{p(ilde{y} = 1 \mid oldsymbol{x})}{p(ilde{y} = -1 \mid oldsymbol{x})}$$

Aunque no obtenemos probabilidades directamente, este resultado justifica la aplicación del operador signo al modelo

Ejemplo: clasificación de correos en spam y no-spam

```
In [1]: import pandas as pd
import numpy as np
from sklearn.ensemble import AdaBoostClassifier
from sklearn.metrics import accuracy_score
df = pd.read_csv("https://github.com/empathy87/The-Elements-of-Statistical-Learning-Python-Notebooks/blob/r
is_test = df.test.values; y = df.spam.values; X = df.drop(['test','spam'], axis=1).to_numpy(copy=True)
X_train, X_test = X[is_test == 0], X[is_test == 1]
y_train, y_test = y[is_test == 0], y[is_test == 1]
ntrees_list = [10, 50, 100, 200, 300, 400, 500]
for ntrees in ntrees_list:
    clf = AdaBoostClassifier(n_estimators=ntrees, random_state=10, learning_rate=0.2).fit(X_train, y_train y_test_hat = clf.predict(X_test)
    acc = accuracy_score(y_test, y_test_hat)
    print(f'AdaBoosting {ntrees} trees, test err {1 - acc:.1%}')

AdaBoosting 10 trees, test err 10.9%
```

```
AdaBoosting 10 trees, test err 10.9% AdaBoosting 50 trees, test err 7.2% AdaBoosting 100 trees, test err 5.9% AdaBoosting 200 trees, test err 5.7% AdaBoosting 300 trees, test err 5.7% AdaBoosting 400 trees, test err 5.5% AdaBoosting 500 trees, test err 5.5%
```

3.5 LogitBoost

Predicción probabilística: usamos el modelo aditivo para predecir la mitad de la log-odds

$$p(ilde{y} \mid oldsymbol{x}; oldsymbol{ heta}) = \sigma(ilde{y}a) \qquad ext{con} \qquad a = 2f(oldsymbol{x}; oldsymbol{ heta})$$

Objetivo FSAM con log-pérdida y eta=1: $\ell(ilde{y},m{ heta};m{x})=-\log p(ilde{y}\midm{x};m{ heta})$

$$egin{aligned} L_m(oldsymbol{ heta}) &= -\sum_{i=1}^N \log(\sigma(ilde{y}_i 2[f_{m-1}(oldsymbol{x}_i) + F(oldsymbol{x}_i; oldsymbol{ heta})])) \ &= \sum_{i=1}^N \log(1 + \exp(-2 ilde{y}_i [f_{m-1}(oldsymbol{x}_i) + F(oldsymbol{x}_i; oldsymbol{ heta})])) \end{aligned}$$

LogitBoost: algoritmo de Newton para minimizar este objetivo directamente

3.6 Gradient boosting

Gradient boosting: FSAM visto como descenso por gradiente para un problema de minimización en un espacio funcional

$$\hat{m{f}} = rgmin_{m{f}} \mathcal{L}(m{f}) \quad ext{con} \quad \mathcal{L}(m{f}) = \sum_{i=1}^N \ell(y_i, f(m{x}_i))$$

Funciones base simplificadas: valores en el conjunto de entrenamiento, $extbf{ extit{f}} = (f(m{x}_1), \dots, f(m{x}_N))^t$

Descenso por gradiente: escoge la "dirección" de máximo descenso, esto es, la del neg-gradiente de $\mathcal{L}(m{f})$ en $m{f}_{m-1}$, $m{g}_m$

$$m{f}_m = m{f}_{m-1} - eta_m m{g}_m \qquad ext{con} \qquad g_{im} = \left[rac{\partial \ell(y_i, f(m{x}_i))}{\partial f(m{x}_i)}
ight]_{f_{m-1}(m{x}_i)}$$

Factor de aprendizaje: eta_m puede escogerse por búsqueda lineal

Funciones base generalizadas: para poder generalizar, se ajusta un aprendiz débil al neg-gradiente con pérdida cuadrática

$$F_m = \operatorname*{argmin}_F \sum_{i=1}^N (-g_{im} - F(oldsymbol{x}_i))^2$$

3.6.1 Algoritmo básico

El algoritmo básico prescinde de eta_m pero incluye un **shrinkage factor** $0<
u\leq 1$ para facilitar la regularización:

- 1. Inicializar $f_0(oldsymbol{x}) = \operatorname{argmin}_F \sum_{i=1}^N \ell(y_i, F(oldsymbol{x}_i))$
- 2. for m=1:M do
- 3. Calcular el neg-gradiente o (pseudo-) $m{residuo}$ $r_{im} = -igg[rac{\partial \ell(y_i,f(m{x}_i))}{\partial f(m{x}_i)}igg]_{f_{m-1}(m{x}_i)}$
- 4. Usar el aprendiz débil para hallar $F_m = \operatorname{argmin}_F \sum_{i=1}^N (r_{im} F(m{x}_i))^2$
- 5. Actualizar $f_m(oldsymbol{x}) = f_{m-1}(oldsymbol{x}) +
 u F_m(oldsymbol{x})$
- 6. Devolver $f({m x}) = f_M({m x})$

3.6.2 Regresión

Salidas: $y_i \in \mathbb{R}$

Pérdida cuadrática o su mitad: $\ell(y_i, f(m{x}_i)) = rac{1}{2}(y_i - f(m{x}_i))^2$ (como boosting mínimo cuadrados)

Residuo de la pérdida cuadrática: $r_i = y_i - f(oldsymbol{x}_i)$

Pérdida valor absoluto: $\ell(y_i, f(oldsymbol{x}_i)) = |y_i - f(oldsymbol{x}_i)|$

Residuo de la pérdida valor absoluto: $r_i = \mathrm{sgn}(y_i - f(oldsymbol{x}_i))$

3.6.3 Clasificación binaria

Salidas: $\tilde{y}_i \in \{-1, +1\}$

Pérdida exponencial: $\ell(ilde{y}_i, f(m{x}_i)) = \exp(- ilde{y}_i f(m{x}_i))$ (como Adaboost)

Residuo de la pérdida exponencial: $r_i = { ilde y}_i \exp(-{ ilde y}_i f({m x}_i))$

Log-pérdida binaria: $\ell(ilde{y}_i, f(m{x}_i)) = \log(1 + \exp(- ilde{y}_i f(m{x}_i)))$ (como LogitBoost)

Residuo de la log-pérdida binaria:

$$egin{aligned} r_i = -rac{1}{1+\exp(- ilde{y}_i f(oldsymbol{x}_i))} \exp(- ilde{y}_i f(oldsymbol{x}_i))(- ilde{y}_i) = ilde{y}_i rac{1}{1+\exp(ilde{y}_i f(oldsymbol{x}_i))} = ilde{y}_i \sigma(- ilde{y}_i f(oldsymbol{x}_i)) \end{aligned}$$

3.6.4 Clasificación multiclase

Salidas: $y_i \in \{1,\ldots,C\}$

 ${f Log-p\'erdida:}\ \$ se ajustan C modelos aditivos, uno por cada clase, cuyas predicciones se normalizan mediante una softmax

$$\ell(y_i, f_1(oldsymbol{x}_i), \dots, f_C(oldsymbol{x}_i)) = -\sum_c \mathbb{I}(y_i = c) \log \pi_{ic} \quad ext{con} \quad \pi_{ic} = S(f_1(oldsymbol{x}_i), \dots, f_C(oldsymbol{x}_i))_c = rac{\exp(f_c(oldsymbol{x}_i))}{\sum_{c'=1}^C \exp(f_{c'}(oldsymbol{x}_i))}$$

Residuo de la log-pérdida: para cada clase c

$$egin{aligned} r_{ic} &= -rac{\partial \ell(y_i, f_1(oldsymbol{x}_i), \ldots, f_C(oldsymbol{x}_i))}{\partial f_c(oldsymbol{x}_i)} \ &= rac{\partial}{\partial f_c(oldsymbol{x}_i)} \sum_{ ilde{c}} \mathbb{I}(y_i = ilde{c}) \log \pi_{i ilde{c}} \ &= \mathbb{I}(y_i = c) rac{1}{\pi_{ic}} \pi_{ic} (1 - \pi_{ic}) \ &= \mathbb{I}(y_i = c) (1 - \pi_{ic}) \end{aligned}$$

3.6.5 Gradient tree boosting

Gradient tree boosting: gradient boosting con árbol de regresión como aprendiz débil

$$F_m = \sum_{j=1}^{J_m} w_{jm} \mathbb{I}(oldsymbol{x} \in R_{jm})$$

- ullet R_{jm} y w_{jm} son la región y salida asociadas a la hoja j del árbol añadido en la iteración m
- La salida puede ser un escalar o, más generalmente, un vector (de probabilidades, por ejemplo)

Aprendizaje de las regiones: CART sobre residuos

Aprendizaje de las salidas: minimización del riesgo empírico con los datos de la hoja

$$\hat{w}_{jm} = \operatorname*{argmin}_{w} \sum_{oldsymbol{x}_i \in R_{jm}} \ell(y_i, f_{m-1}(oldsymbol{x}_i) + w)$$

Aprendizaje de las salidas con pérdida cuadrática: \hat{w}_{jm} es la media empírica de los residuos de la hoja

3.6.6 XGBoost

Extreme gradient boosting (XGBoost): implementación muy popular de gradient tree boosting con algunos refinamientos

- · Objetivo regularizado
- Aproximación de segundo orden de la pérdida
- Muestreo de características en nodos internos
- Técnicas algorítmicas varias para mejorar la escabilidad

4 Interpretación de ensambles de árboles

4.1 Importancia de características

Importancia de una característica k en un árbol T: suma de ganancias (reducciones de coste) en los nodos v_i que la usan

33/39

$$R_k(T) = \sum_j G_j \mathbb{I}(v_j = k)$$

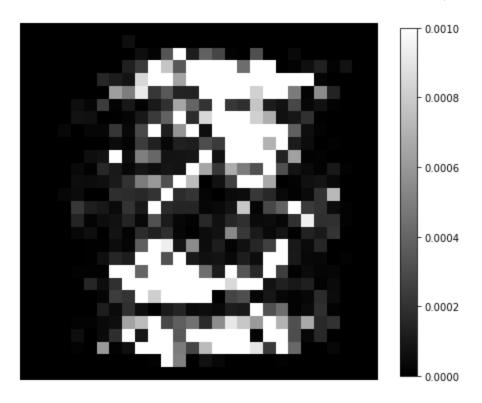
Importancia de una característica k en un ensamble de M árboles: extensión mediante promediado

$$R_k = rac{1}{M} \sum_{m=1}^M R_k(T_m)$$

Normalización de importancias: suelen normalizarse con respecto a la máxima (100%)

Ejemplo: importancias para clasificador (de dígitos escogidos en) MNIST

```
In [1]: import numpy as np
        from sklearn.datasets import fetch openml
        mnist = fetch openml('mnist 784', version=1, parser='auto')
         mnist.data = mnist.data.astype(np.float32).to numpy()
        mnist.target = mnist.target.astype(np.uint8).to numpy()
In [2]: from sklearn.ensemble import RandomForestClassifier
        X = mnist["data"]
         y = mnist["target"]
        mask = (y == 6) \mid (y == 9) \# <<< escoge dígitos
        X \text{ mask} = X[\text{mask}, :]
        y mask = y[mask]
        print(X mask.shape, y mask.shape)
        clf = RandomForestClassifier(n estimators=20, random state=42)
         clf.fit(X mask, y mask)
        image = clf.feature importances .reshape(28, 28)
        (13834, 784) (13834,)
In [3]: import matplotlib.pyplot as plt
        fig, ax = plt.subplots(1, 1, figsize=(8, 8))
         ax.set(aspect='equal'); ax.axis('off')
        plt.imshow(image, cmap='gray', interpolation="none", vmin=0.0, vmax=0.001)
        plt.colorbar(ax=ax, shrink=0.8);
```



4.2 Gráficos de dependencia parcial

Gráfico de dependencia parcial: muestra la predicción del modelo en función de una (x_k) o dos (x_j, x_k) características

$$egin{aligned} ar{f}_k(x_k) &= rac{1}{N} \sum_{n=1}^N f(oldsymbol{x}_{n,-k}, x_k) \ ar{f}_{jk}(x_j, x_k) &= rac{1}{N} \sum_{n=1}^N f(oldsymbol{x}_{n,-jk}, x_j, x_k) \end{aligned}$$

Gráfico de dependencia parcial en clasificación binaria: muestra la log-odds en función de x_k (y x_k)

Ejemplo: dependencia parcial de log-odds de la clase spam; aumenta con la frecuencia de ch! y remove; edu y hp la disminuyen

```
In [1]: import pandas as pd
    df = pd.read_csv("https://github.com/empathy87/The-Elements-of-Statistical-Learning-Python-Notebooks/blob/r
    X = df.drop(['test','spam'], axis=1); y = df.spam.values; X.info()
```

<class 'pandas.core.frame.DataFrame'>
RangeIndex: 4601 entries, 0 to 4600
Data columns (total 57 columns):

# 	Column	Non-Null Count	Dtype
0	word_freq_make	4601 non-null	
1	word_freq_address	4601 non-null	float64
2	word_freq_all	4601 non-null	float64
3	word_freq_3d	4601 non-null	float64
4	word_freq_our	4601 non-null	float64
5	word_freq_over	4601 non-null	float64
6	word_freq_remove	4601 non-null	float64
7	word_freq_internet	4601 non-null	float64
8	word_freq_order	4601 non-null	float64
9	word_freq_mail	4601 non-null	float64
10	word_freq_receive	4601 non-null	float64
11	word_freq_will	4601 non-null	float64
12	word_freq_people	4601 non-null	float64
13	word_freq_report	4601 non-null	float64
14	word_freq_addresses	4601 non-null	float64
15	word_freq_free	4601 non-null	float64
16	word_freq_business	4601 non-null	float64
17	word_freq_email	4601 non-null	float64
18	word_freq_you	4601 non-null	float64
19	word_freq_credit	4601 non-null	float64
20	word_freq_your	4601 non-null	float64
21	word_freq_font	4601 non-null	float64
22	word_freq_000	4601 non-null	float64
23	word_freq_money	4601 non-null	float64
24	word_freq_hp	4601 non-null	float64
25	word_freq_hpl	4601 non-null	float64
26	word_freq_george	4601 non-null	float64
27	word_freq_650	4601 non-null	float64
28	word_freq_lab	4601 non-null	float64
29	word_freq_labs	4601 non-null	
30	word_freq_telnet	4601 non-null	
31	word_freq_857	4601 non-null	
32	word_freq_data	4601 non-null	
33	word_freq_415	4601 non-null	float64
34	word_freq_85	4601 non-null 4601 non-null	float64
35	word_freq_technology		
36	word_freq_1999	4601 non-null	float64

```
37 word freq parts
                                       4601 non-null
                                                       float64
                                                       float64
        38 word freq pm
                                       4601 non-null
        39 word freq direct
                                       4601 non-null
                                                      float64
        40 word freq cs
                                       4601 non-null
                                                      float64
        41 word freq meeting
                                       4601 non-null
                                                      float64
        42 word freq original
                                                      float64
                                       4601 non-null
        43 word freq project
                                                      float64
                                       4601 non-null
        44 word freq re
                                       4601 non-null
                                                      float64
        45 word freq edu
                                                      float64
                                       4601 non-null
        46 word freq table
                                       4601 non-null
                                                      float64
        47 word freq conference
                                                      float64
                                       4601 non-null
                                       4601 non-null
                                                      float64
        48 char freq;
        49 char freq (
                                                      float64
                                       4601 non-null
        50 char freq [
                                                      float64
                                       4601 non-null
        51 char freq!
                                       4601 non-null
                                                      float64
        52 char freq $
                                       4601 non-null
                                                      float64
        53 char freq #
                                       4601 non-null
                                                     float64
        54 capital run length average 4601 non-null
                                                      float64
        55 capital run length longest 4601 non-null
                                                      int64
        56 capital run length total
                                       4601 non-null
                                                      int64
       dtypes: float64(55), int64(2)
       memory usage: 2.0 MB
In [2]: from sklearn.ensemble import GradientBoostingClassifier
        clf = GradientBoostingClassifier(n estimators=100, random state=0).fit(X, y)
In [3]:
        import matplotlib.pyplot as plt
        from sklearn.inspection import PartialDependenceDisplay
        fig, ax = plt.subplots(figsize=(12, 4))
        PartialDependenceDisplay.from estimator(clf, X, ['char freq !', 'word freq remove'], ax=ax)
        fig, ax = plt.subplots(figsize=(12, 4))
        PartialDependenceDisplay.from estimator(clf, X, ['word freq edu', 'word freq hp'], ax=ax);
```

