

# 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

# 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  $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^D$ , 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  $\mathbf{x}_{d_i} \leq t_i$ ,  $\mathbf{x}$  se sigue procesando por la rama izquierda; si no, se procesa por la derecha
- El procesamiento de  $\mathbf{x}$  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:**  $\theta = \{(R_j, w_j) : j = 1 : J\}$ , de  $J$  hojas, donde  $R_j$  y  $w_j$  denotan la región y salida asociadas a la hoja  $j$

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

**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

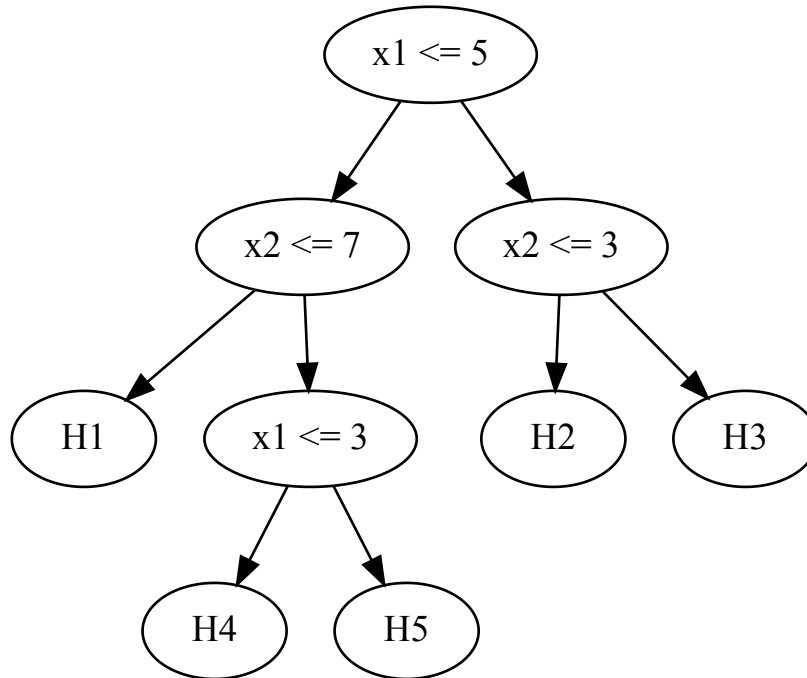
t = Digraph()
t.node('N1', 'x1 <= 5');
with t.subgraph() as s:
    s.attr(rank='same')
    s.node('N2', 'x2 <= 7')
    s.node('N3', 'x2 <= 3')
with t.subgraph() as s:
    s.attr(rank='same')
    s.node('H1')
    s.node('N4', 'x1 <= 3')
```

```

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

```

Out[1]:



In [2]:

```

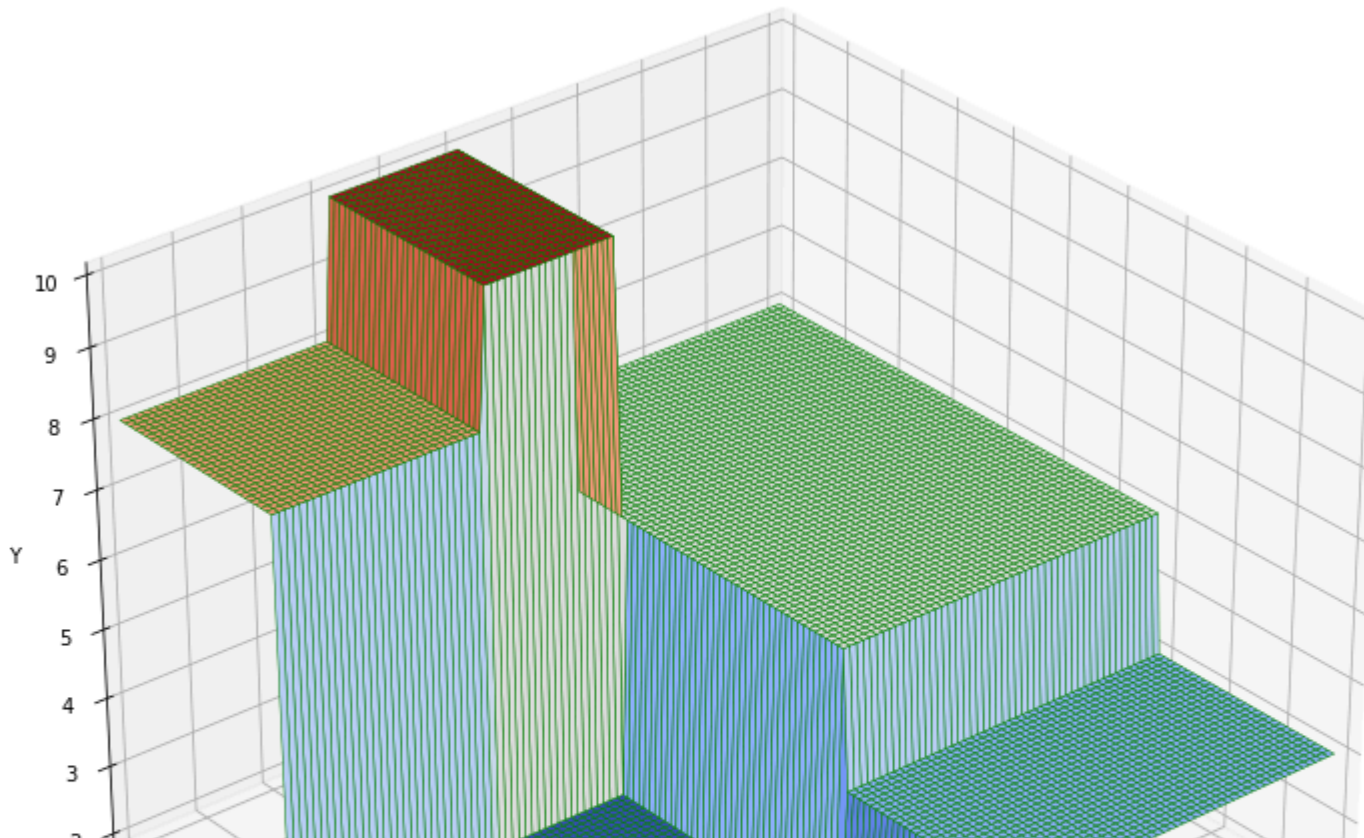
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
x11 = 5; x12 = 3; x21 = 7; x22 = 3 # umbrales de corte
h = 0.1; M = 10; X1 = X2 = np.arange(0, M + h, h)
L1 = X1 <= x11; R1 = X2 <= x21 # hoja 1
L2 = X1 > x11; R2 = X2 <= x22 # hoja 2
L3 = X1 > x11; R3 = X2 > x22 # hoja 3
L4 = X1 <= min(x11, x22); R4 = X2 > x21 # hoja 4
L5 = (X1 <= 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] & L2[j]:
            tree[i, j] = 1
        elif L1[i] & L3[j]:
            tree[i, j] = 2
        elif L2[i] & L4[j]:
            tree[i, j] = 3
        elif L2[i] & L5[j]:
            tree[i, j] = 4
        elif L3[i] & L4[j]:
            tree[i, j] = 5
        elif L3[i] & L5[j]:
            tree[i, j] = 6

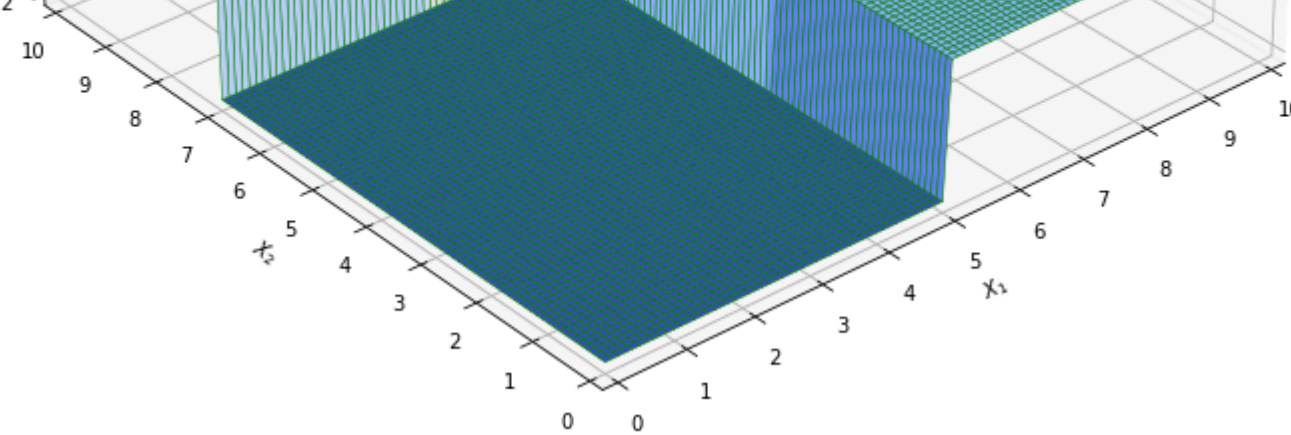
```

```

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]:
    tree[i, j] = r[3] # salida de la hoja 4
if L5[i] & R5[j]:
    tree[i, j] = r[4] # salida de la hoja 5
X, Y = np.meshgrid(X1, X2, indexing="ij")
ax = plt.figure(figsize=(10, 10)).add_subplot(projection="3d")
ax.plot_surface(X, Y, tree, cmap="coolwarm", lw=0.5, rstride=1, cstride=1, edgecolor=["g"], color="w", antialias
ax.set_xlabel("$X_1$"); ax.set_xticks(range(11)); ax.set_xmargin(0.001)
ax.set_ylabel("$X_2$"); ax.set_yticks(range(11)); ax.set_ymargin(0.001)
ax.set_zlabel("Y")
ax.view_init(None, 50 + 180)
plt.tight_layout()

```





## 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  $\theta = \{(R_j, w_j) : j = 1 : J\}$  de la pérdida empírica

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

**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  $i$ ,  $\mathcal{D}_i = \{(\mathbf{x}_n, y_n)\}$

- 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:

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

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

$$\mathcal{D}_i^L(j, t) = \{(\mathbf{x}_n, y_n) \in \mathcal{D}_i : x_{nj} = t\}$$

$$\mathcal{D}_i^R(j, t) = \{(\mathbf{x}_n, y_n) \in \mathcal{D}_i : x_{nj} \neq t\}$$

## 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

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

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

$$c(\mathcal{D}_i) = \frac{1}{|\mathcal{D}_i|} \sum_{(\mathbf{x}_n, y_n) \in \mathcal{D}_i} (y_n - \bar{y})^2 \quad \text{con} \quad \bar{y} = \frac{1}{|\mathcal{D}_i|} \sum_{(\mathbf{x}_n, y_n) \in \mathcal{D}_i} y_n$$

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

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

**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

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

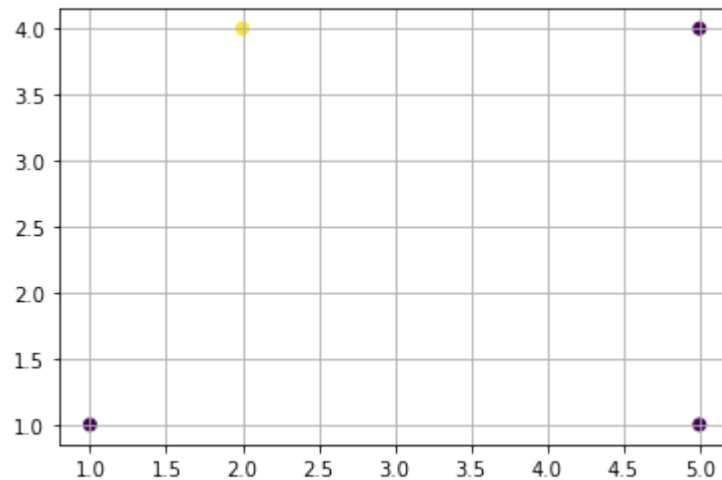
**Entropía:** de la distribución empírica de las clases en el nodo

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

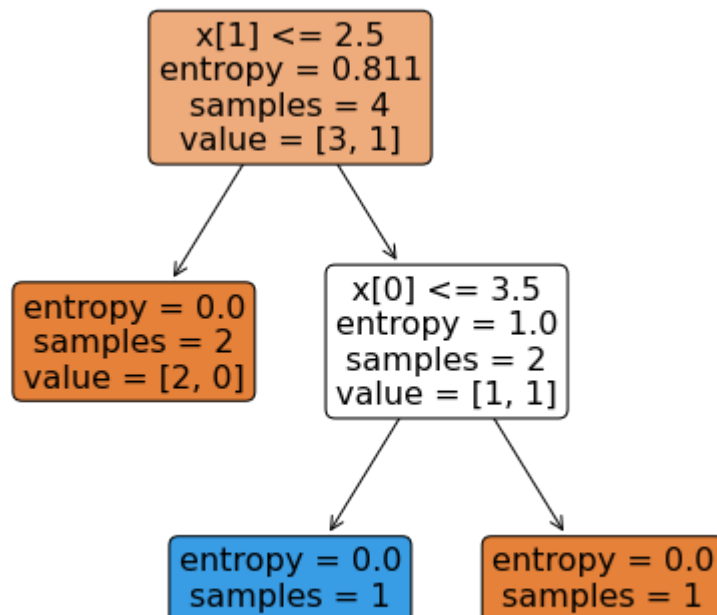
- **Mínima entropía:**  $\hat{\pi}_{ic} = \delta(c = c^*) \Rightarrow H_i = -1 \log 1 - \sum_{c \neq c^*} 0 \log 0 = 0$
- **Máxima entropía:**  $\hat{\pi}_{ic} = 1/C \Rightarrow H_i = - \sum_{c=1}^C \frac{1}{C} \log \frac{1}{C} = - \log \frac{1}{C} = \log C$

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

```
In [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);
```

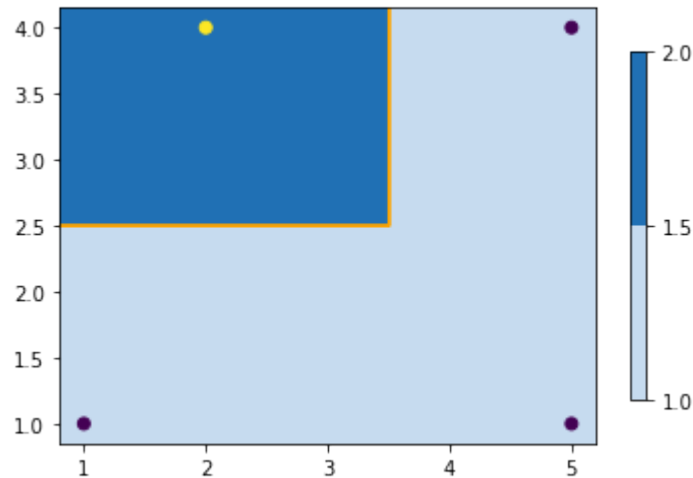


value = [0, 1]

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', linestyle='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 complementos observados

## 1.5 Ventajas e inconvenientes

### 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 Inconvenientes

- 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

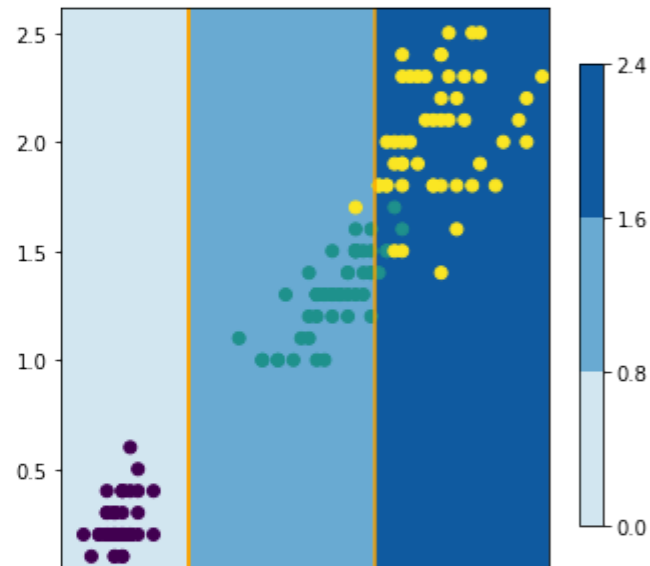
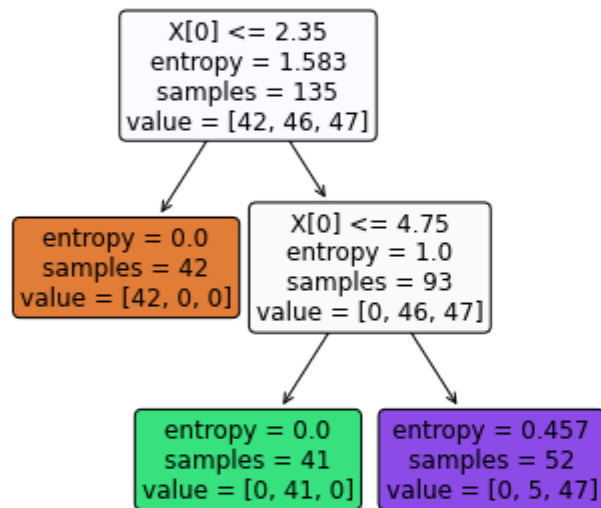
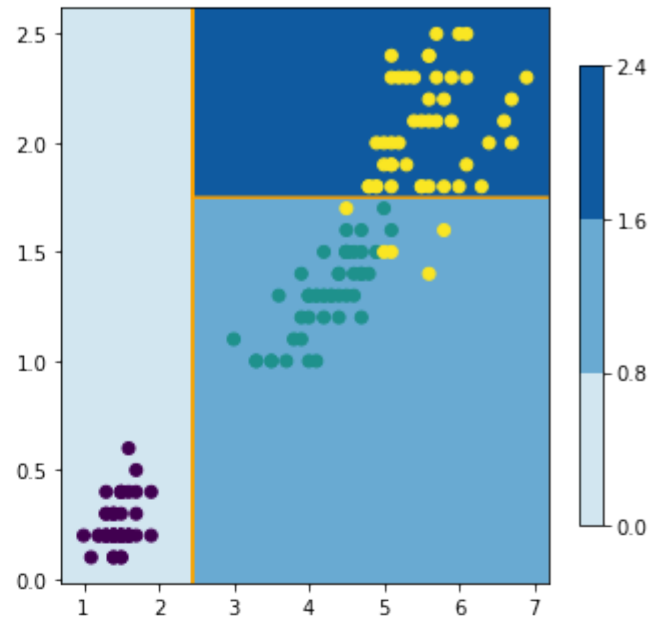
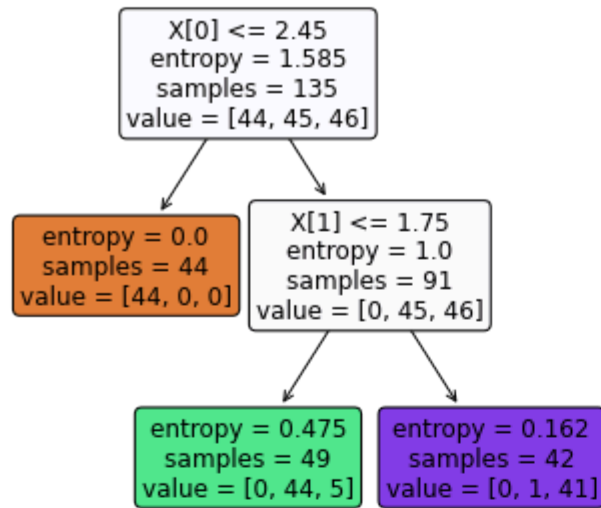
```
In [1]: import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
from sklearn.datasets import load_iris
from sklearn.model_selection import train_test_split
from sklearn.tree import DecisionTreeClassifier, plot_tree
iris = load_iris()
ndx = [2, 3] # petal length and width
X = iris.data[:, ndx]
y = iris.target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

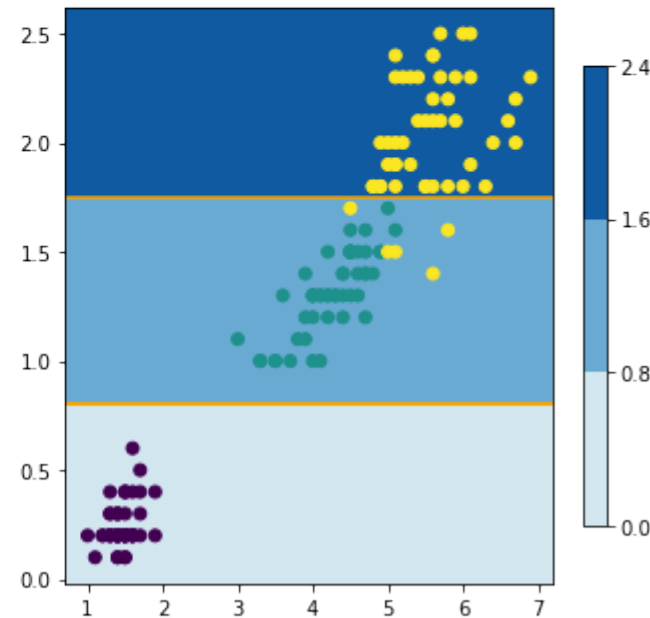
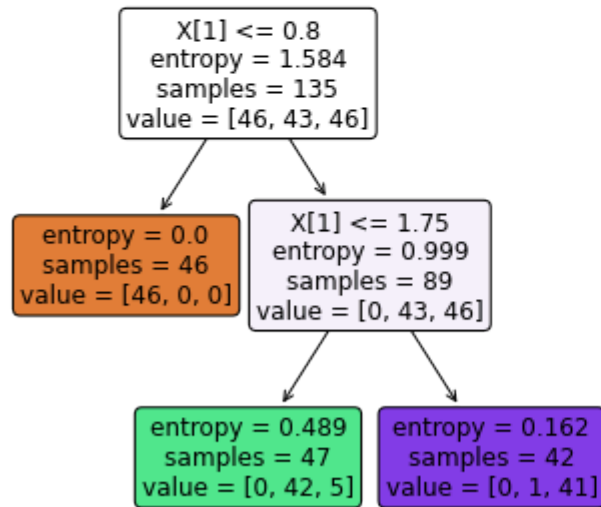
```
In [2]: nrows = 3
fig, axes = plt.subplots(nrows, 2, figsize=(12, 6 * nrows))
for n in np.arange(nrows):
    X_train, X_test, y_train, y_test = train_test_split(X, y, test_size=0.1, shuffle=True)
```

```

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_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), 2, colors='orange', linestyle='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 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  $\{f_m\}$

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

**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  $\theta$

- Dada una muestra la clase 1, la clase escogida por el modelo base  $m$  puede verse con una Bernoulli  $Y_m \in \{0, 1\}$ , para todo  $m$

- Así, la suma de los votos a la clase 1,  $S = \sum_m Y_{m,i}$ , es una binomial  $\text{Bin}(M, \theta)$
- En definitiva, la probabilidad de acierto del comité puede hallarse a partir de la función de distribución binomial:

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

```
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 bootstrapping (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

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

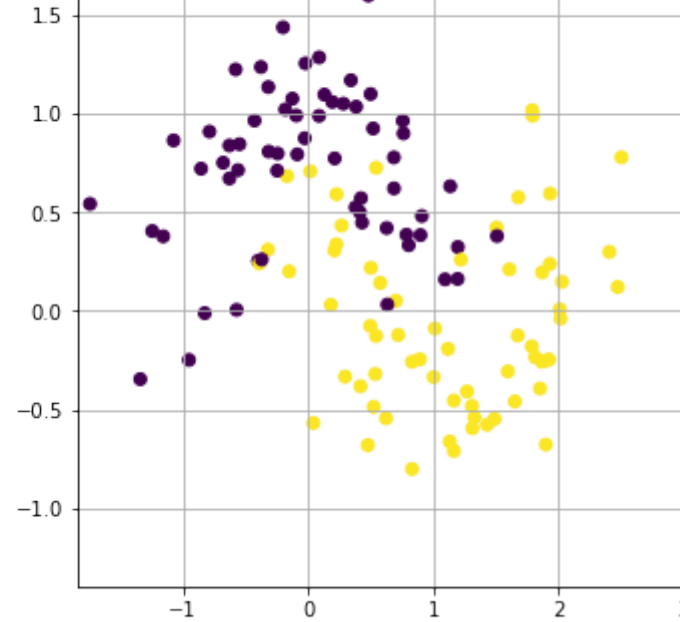
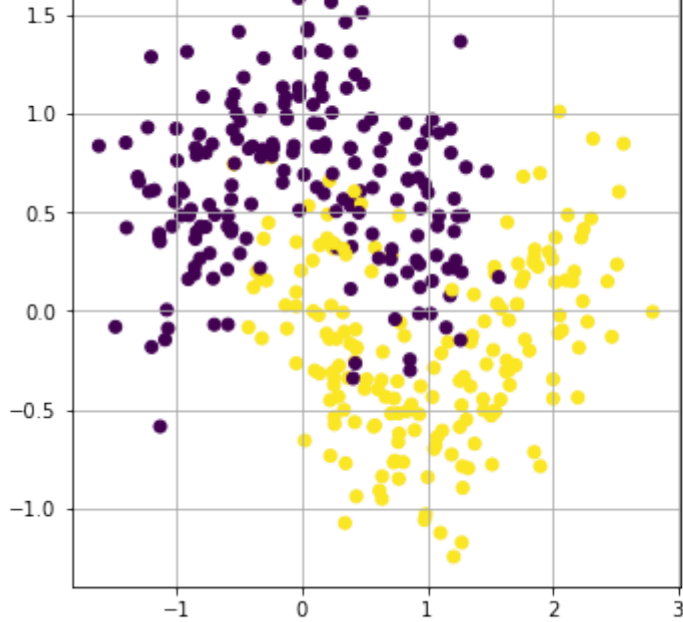
**Ventaja:** el 37% de muestras **out-of-bag** puede usarse en test

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

**Ejemplo:** bagging de árboles

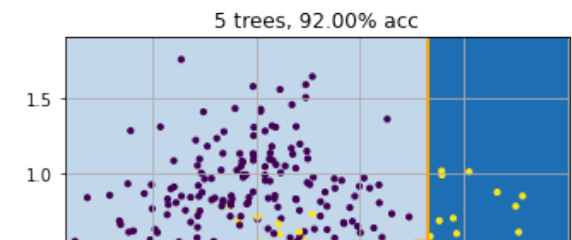
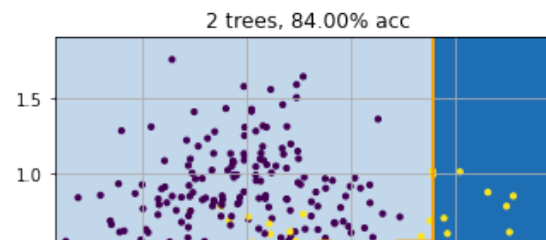
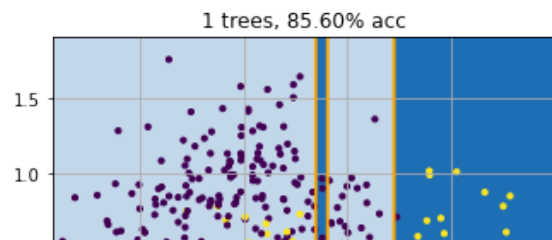
```
In [1]: import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
from sklearn.datasets import make_moons
from sklearn.model_selection import train_test_split
X, y = make_moons(n_samples=500, noise=0.30, random_state=42)
X_train, X_test, y_train, y_test = train_test_split(X, y, random_state=42)
fig, axes = 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);
```

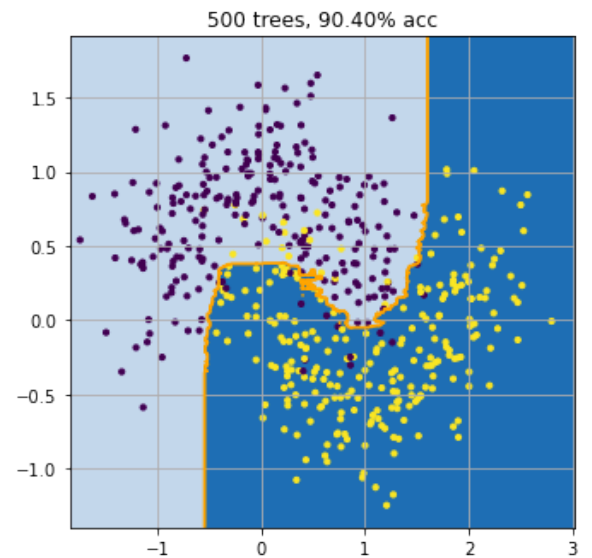
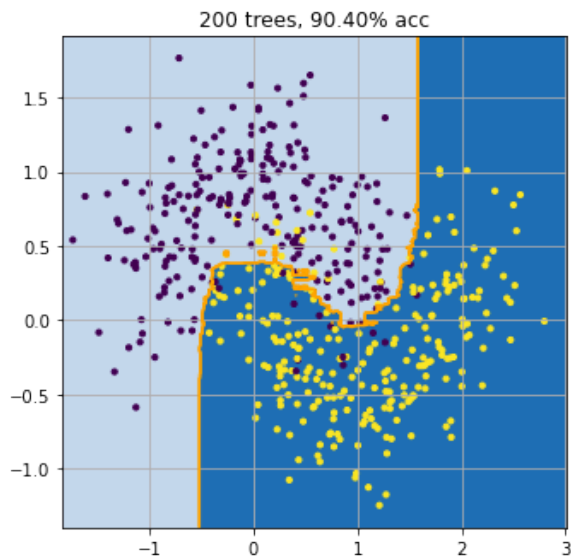
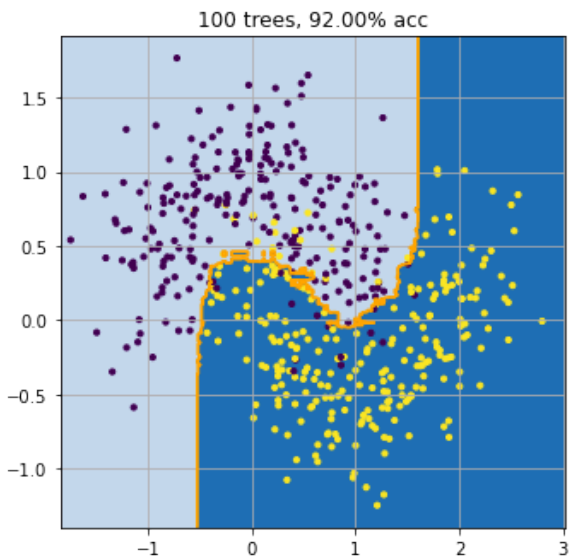
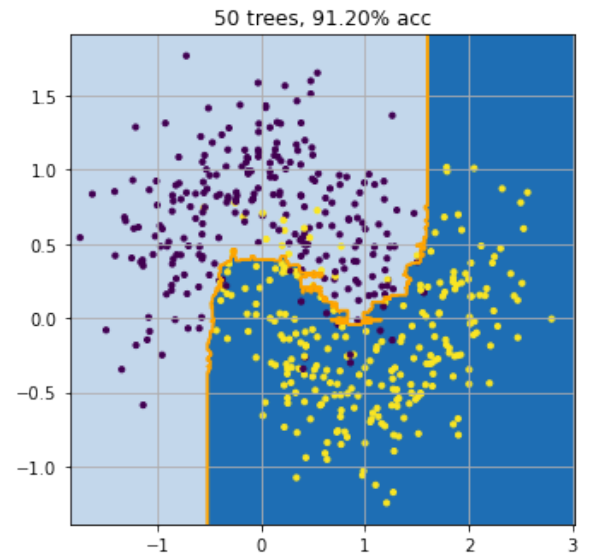
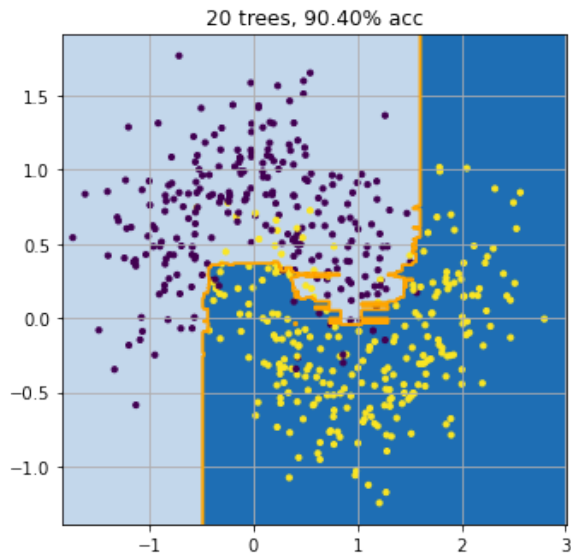
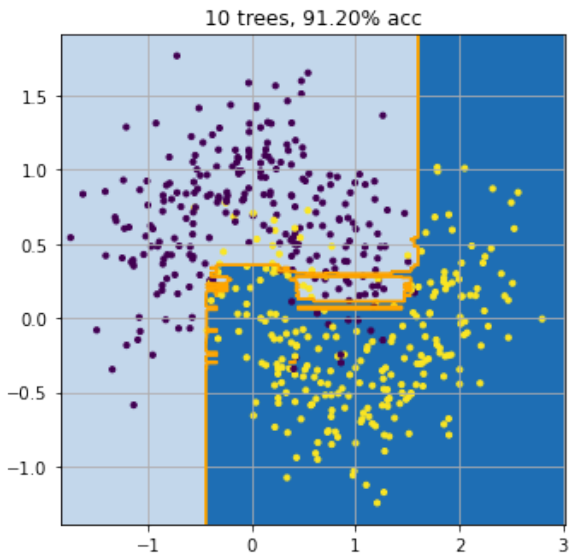
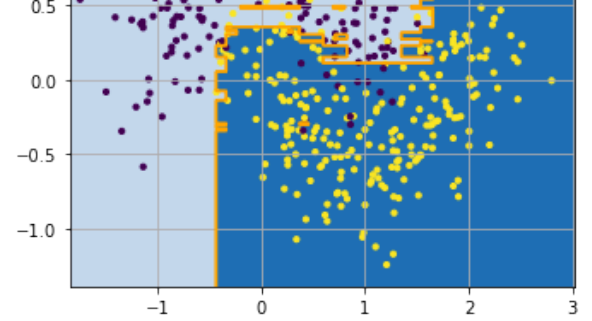
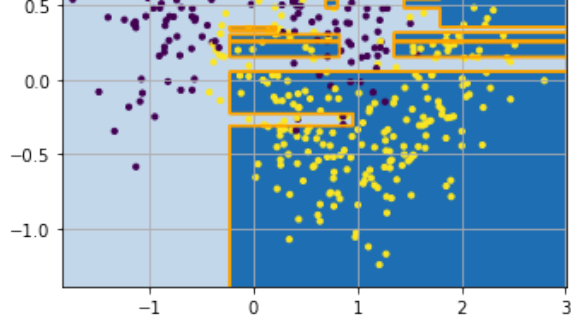
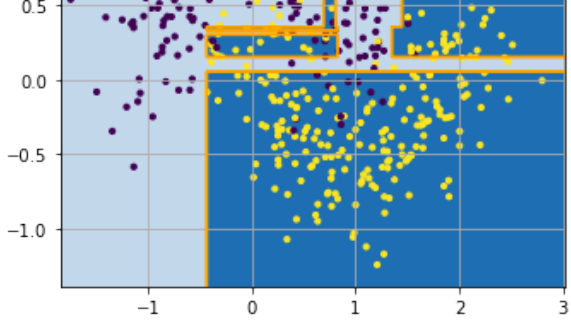




In [2]:

```
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):
    ax = axes.flat[i]
    clf = BaggingClassifier(DecisionTreeClassifier(random_state=42), n_estimators=bag_size,
                           max_samples=100, bootstrap=True, random_state=42)
    clf.fit(X_train, y_train)
    y_pred = clf.predict(X_test)
    acc = accuracy_score(y_test, y_pred)
    ax.grid(); ax.set_xlim(x_min, x_max); ax.set_ylim(y_min, y_max);
    xx, yy = np.meshgrid(np.linspace(x_min, x_max, num=1000), np.linspace(y_min, y_max, num=1000))
    zz = clf.predict(np.c_[xx.ravel(), yy.ravel()])
    ax.contour(xx, yy, zz.reshape(xx.shape), 1, colors='orange', linestyle='solid')
    ax.contourf(xx, yy, zz.reshape(xx.shape), 1, cmap='Blues'); ax.scatter(*X.T, c=y, s=10)
    ax.set_title('{} trees, {:.2%} acc'.format(bag_size, acc))
```





**Ejemplo:** clasificación de correos en spam y no-spam

```
In [3]: import pandas as pd
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/master")
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  $S_i \subseteq \{1, \dots, D\}$ ,

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

**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/master")
```

```

df = pd.read_csv('https://github.com/jupyter/elements-of-statistical-learning-python-notebooks/blob/master/
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%
RF 400 trees, test err 4.8%
RF 500 trees, test err 4.8%

```

## 3 Boosting

### 3.1 Boosting

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

$$f(\mathbf{x}; \boldsymbol{\theta}) = \sum_{m=1}^M \beta_m F_m(\mathbf{x}; \boldsymbol{\theta}_m)$$

**Objetivo:** minimizar la pérdida empírica (con regularizador)

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

**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
- 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

```
In [1]: 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/master')
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 = CatBoostClassifier(iterations=ntrees, random_state=10, learning_rate=0.2, verbose=False).fit(X_train,
y_test_hat = clf.predict(X_test)
acc = accuracy_score(y_test, y_test_hat)
print(f'Boosting {ntrees} trees, test err {1 - acc:.1%}')
```

```
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,  $\ell(y, \hat{y})$

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

**Minimización del objetivo y reajuste del modelo:**  $(\beta_m, \theta_m) = \operatorname{argmin}_{\beta, \theta} L_m(\beta, \theta)$

$$f_m(\mathbf{x}) = f_{m-1}(\mathbf{x}) + \beta_m F_m(\mathbf{x}) \quad \text{con} \quad F_m(\mathbf{x}) = F(\mathbf{x}; \boldsymbol{\theta}_m)$$

### 3.3 Boosting mínimos cuadrados

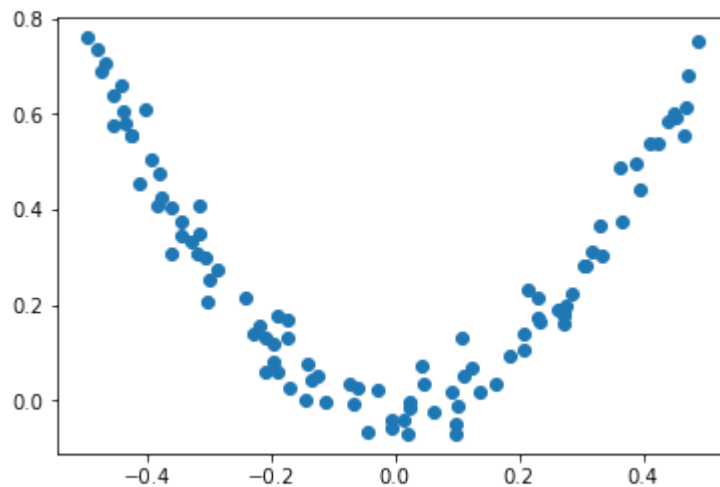
**Objetivo FSAM con pérdida cuadrática:**  $\ell(y, \hat{y}) = (y - \hat{y})^2$

$$L_m(\beta, \boldsymbol{\theta}) = \sum_{i=1}^N (r_{im} - \beta F(\mathbf{x}_i; \boldsymbol{\theta}))^2 \quad \text{con residuos} \quad r_{im} = y_i - f_{m-1}(\mathbf{x}_i)$$

**Boosting mínimos cuadrados:** minimiza el objetivo fijando  $\beta = 1$  y ajustando  $F$  a los residuos

**Ejemplo:** regresión simple con boosting mínimos cuadrados

```
In [1]: 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()
```

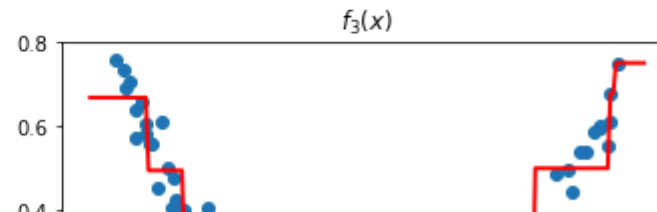
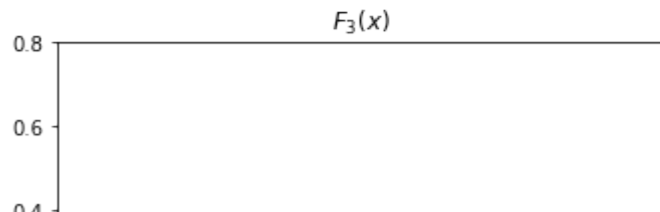
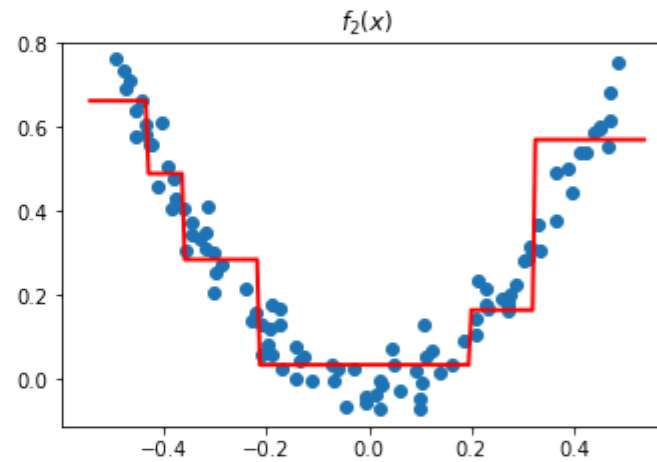
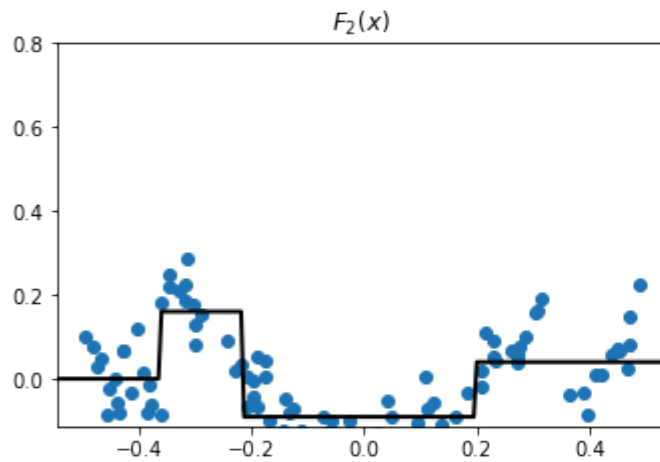
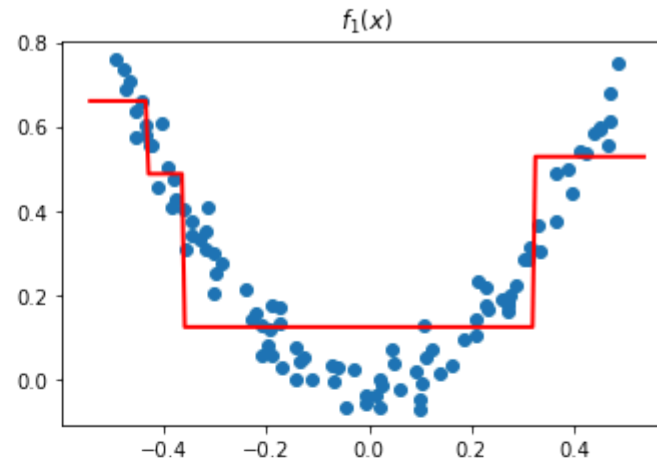
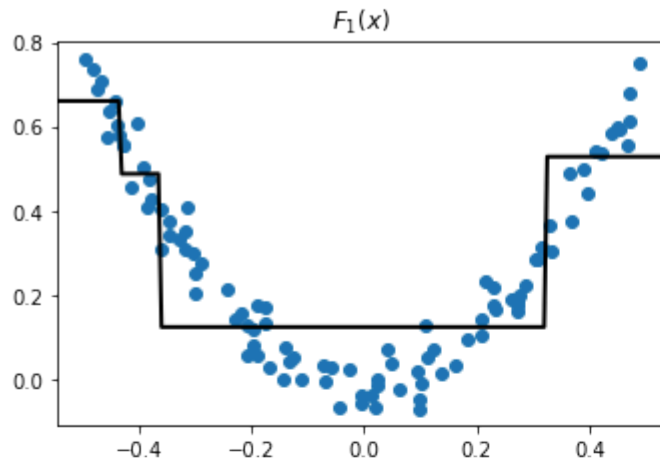


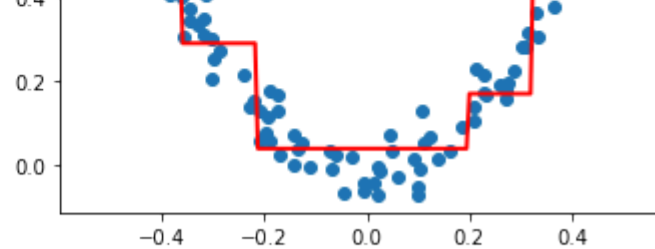
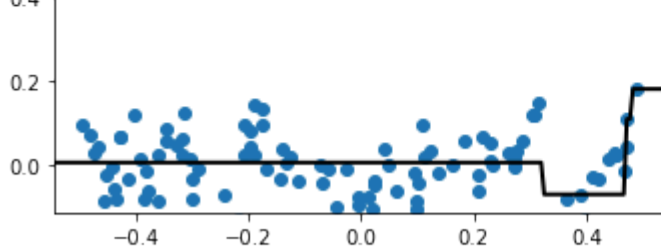
```
In [2]: from sklearn.tree import DecisionTreeRegressor
M = 3; fig, axes = plt.subplots(M, 2, figsize=(12, M * 4))
res = np.copy(y); tt = []; xx = np.linspace(x_min, x_max, 200)
for m in np.arange(M):
    tree = DecisionTreeRegressor(max_depth=2, random_state=42)
    tree.fit(X, res); tt.append(tree)
```

```

tree.fit(X, res); tt.append(tree)
ax = axes[m, 0]
ax.set_title('$F_{\{m\}}(x)$'.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('$f_{\{m\}}(x)$'.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  $\ell(\tilde{y}, \hat{y}) = \exp(-\tilde{y}\hat{y})$  con  $\tilde{y} \in \{-1, +1\}$

$$\begin{aligned}
 L_m(\beta, \boldsymbol{\theta}) &= \sum_{i=1}^N \exp(-\tilde{y}_i(f_{m-1}(\mathbf{x}_i) + \beta F(\mathbf{x}_i; \boldsymbol{\theta}))) \\
 &= \sum_{i=1}^N w_{im} \exp(-\beta \tilde{y}_i F(\mathbf{x}_i; \boldsymbol{\theta})) \quad \text{con} \quad w_{im} = \exp(-\tilde{y}_i f_{m-1}(\mathbf{x}_i)) \\
 &= e^{\beta} \sum_{\tilde{y}_i \neq F(\mathbf{x}_i; \boldsymbol{\theta})} w_{im} + e^{-\beta} \sum_{\tilde{y}_i = F(\mathbf{x}_i; \boldsymbol{\theta})} w_{im} \\
 &= e^{\beta} \sum_{\tilde{y}_i \neq F(\mathbf{x}_i; \boldsymbol{\theta})} w_{im} + e^{-\beta} \left( \sum_{i=1}^N w_{im} - \sum_{\tilde{y}_i \neq F(\mathbf{x}_i; \boldsymbol{\theta})} w_{im} \right) \\
 &= (e^{\beta} - e^{-\beta}) \sum_{i=1}^N w_{im} \mathbb{I}(\tilde{y}_i \neq F(\mathbf{x}_i; \boldsymbol{\theta})) + e^{-\beta} \sum_{i=1}^N w_{im}
 \end{aligned}$$

### 3.4.2 Minimización del objetivo en dos pasos

Primero hallamos  $\boldsymbol{\theta}_m$  a partir de los datos ponderados:

$$\boldsymbol{\theta}_m = \underset{\boldsymbol{\theta}}{\operatorname{argmin}} \sum_{i=1}^N w_{im} \mathbb{I}(\tilde{y}_i \neq F(\mathbf{x}_i; \boldsymbol{\theta}))$$

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

$$\beta_m = \underset{\beta}{\operatorname{argmin}} L_m(\beta, \boldsymbol{\theta}_m) = \frac{1}{\log 2} \log \frac{1 - \operatorname{err}_m}{\operatorname{err}_m} \quad \text{con} \quad \operatorname{err}_m = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N w_{im} \mathbb{I}(\tilde{y}_i \neq F(\mathbf{x}_i; \boldsymbol{\theta}_m))$$

$$\rho_m = \arg\min_{\beta} L_m(\rho, \theta_m) = \frac{1}{2} \log \frac{\text{err}_m}{\text{err}_m} \quad \text{err}_m = \frac{1}{\sum_{i=1}^N w_{im}} \sum_{i=1}^N w_{im} \mathbb{I}(\tilde{y}_i \neq F_m(\mathbf{x}_i))$$

### 3.4.3 Adaboost

**Adaboost:** halla  $F_m(\cdot)$  y  $\beta_m$  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  $\beta_m$  en la iteración  $m$

$$\begin{aligned} w_{i,m+1} &= \exp(-\tilde{y}_i f_m(\mathbf{x}_i)) \\ &= \exp(-\tilde{y}_i f_{m-1}(\mathbf{x}_i) - \tilde{y}_i \beta_m F_m(\mathbf{x}_i)) \\ &= w_{im} \exp(-\tilde{y}_i \beta_m F_m(\mathbf{x}_i)) \\ &= w_{im} \exp(\beta_m (2\mathbb{I}(\tilde{y}_i \neq F_m(\mathbf{x}_i)) - 1)) \\ &= w_{im} \exp(2\beta_m \mathbb{I}(\tilde{y}_i \neq F_m(\mathbf{x}_i))) \exp(-\beta_m) \end{aligned}$$

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:

$$w_{i,m+1} = \begin{cases} w_{im} \exp(2\beta_m) & \text{si } \tilde{y}_i \neq F_m(\mathbf{x}_i) \\ w_{im} & \text{en otro caso} \end{cases}$$

**Modelo ajustado para clasificación binaria:**  $f(\mathbf{x}) = \text{sgn}(\sum_m \beta_m F_m(\mathbf{x}))$

**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  $f(\mathbf{x})$  con pérdida exponencial es

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

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

$$f(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \log \frac{p(\tilde{y} = 1 \mid \mathbf{x})}{p(\tilde{y} = -1 \mid \mathbf{x})}$$

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/master")
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 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

$$p(\tilde{y} \mid \mathbf{x}; \boldsymbol{\theta}) = \sigma(\tilde{y}a) \quad \text{con} \quad a = 2f(\mathbf{x}; \boldsymbol{\theta})$$

**Objetivo FSAM con log-pérdida y  $\beta = 1$ :**  $\ell(\tilde{y}, \boldsymbol{\theta}; \mathbf{x}) = -\log p(\tilde{y} \mid \mathbf{x}; \boldsymbol{\theta})$

$$\begin{aligned} L_m(\boldsymbol{\theta}) &= -\sum_{i=1}^N \log(\sigma(\tilde{y}_i 2[f_{m-1}(\mathbf{x}_i) + F(\mathbf{x}_i; \boldsymbol{\theta})])) \\ &= \sum_{i=1}^N \log(1 + \exp(-2\tilde{y}_i[f_{m-1}(\mathbf{x}_i) + F(\mathbf{x}_i; \boldsymbol{\theta})])) \end{aligned}$$

**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

$$\hat{\mathbf{f}} = \underset{\mathbf{f}}{\operatorname{argmin}} \mathcal{L}(\mathbf{f}) \quad \text{con} \quad \mathcal{L}(\mathbf{f}) = \sum_{i=1}^N \ell(y_i, f(\mathbf{x}_i))$$

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

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

$$\mathbf{f}_m = \mathbf{f}_{m-1} - \beta_m \mathbf{g}_m \quad \text{con} \quad g_{im} = \left[ \frac{\partial \ell(y_i, f(\mathbf{x}_i))}{\partial f(\mathbf{x}_i)} \right]_{f_{m-1}(\mathbf{x}_i)}$$

**Factor de aprendizaje:**  $\beta_m$  puede escogerse por búsqueda lineal

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

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

### 3.6.1 Algoritmo básico

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

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

### 3.6.2 Regresión

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

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

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

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

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

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

### 3.6.3 Clasificación binaria

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

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

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

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

**Residuo de la log-pérdida binaria:**

$$r_i = -\frac{1}{1 + \exp(-\tilde{y}_i f(\mathbf{x}_i))} \exp(-\tilde{y}_i f(\mathbf{x}_i))(-\tilde{y}_i) = \tilde{y}_i \frac{1}{1 + \exp(\tilde{y}_i f(\mathbf{x}_i))} = \tilde{y}_i \sigma(-\tilde{y}_i f(\mathbf{x}_i))$$

### 3.6.4 Clasificación multiclase

**Salidas:**  $y_i \in \{1, \dots, C\}$

**Log-pérdida:** se ajustan  $C$  modelos aditivos, uno por cada clase, cuyas predicciones se normalizan mediante una softmax

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

**Residuo de la log-pérdida:** para cada clase  $c$

$$\begin{aligned} r_{ic} &= -\frac{\partial \ell(y_i, f_1(\mathbf{x}_i), \dots, f_C(\mathbf{x}_i))}{\partial f_c(\mathbf{x}_i)} \\ &= \frac{\partial}{\partial f_c(\mathbf{x}_i)} \sum_{\tilde{c}} \mathbb{I}(y_i = \tilde{c}) \log \pi_{i\tilde{c}} \\ &= \mathbb{I}(y_i = c) \frac{1}{\pi_{ic}} \pi_{ic} (1 - \pi_{ic}) \end{aligned}$$



$$= \mathbb{I}(y_i = c)(1 - \pi_{ic})$$



### 3.6.5 Gradient tree boosting

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

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

- $R_{jm}$  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

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

**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 escalabilidad

## 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  $v_j$  que la usan

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

**Importancia de una característica  $k$  en un ensemble de  $M$  árboles:** extensión mediante promediado

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

**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) | (y == 9) # <<< escoge dígitos
X_mask = X[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

$$\bar{f}_k(x_k) = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N f(\mathbf{x}_{n,-k}, x_k)$$

$$\bar{f}_{jk}(x_j, x_k) = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N f(\mathbf{x}_{n,-jk}, x_j, x_k)$$

**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/master")
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   float64
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 | float64 |
| 30 | word_freq_telnet     | 4601 | non-null | float64 |
| 31 | word_freq_857        | 4601 | non-null | float64 |
| 32 | word_freq_data       | 4601 | non-null | float64 |
| 33 | word_freq_415        | 4601 | non-null | float64 |
| 34 | word_freq_85         | 4601 | non-null | float64 |
| 35 | word_freq_technology | 4601 | non-null | float64 |
| 36 | word_freq_1999       | 4601 | non-null | float64 |
| 37 | word_freq_parts      | 4601 | non-null | float64 |
| 38 | word_freq_pm         | 4601 | non-null | float64 |
| 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   | 4601 | non-null | float64 |
| 43 | word_freq_project    | 4601 | non-null | float64 |
| 44 | word_freq_re         | 4601 | non-null | float64 |
| 45 | word_freq_edu        | 4601 | non-null | float64 |
| 46 | word_freq_table      | 4601 | non-null | float64 |
| 47 | word_freq_conference | 4601 | non-null | float64 |
| 48 | char_freq_;          | 4601 | non-null | float64 |
| 49 | char_freq_(          | 4601 | non-null | float64 |
| 50 | char_freq_[          | 4601 | non-null | float64 |
| 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);

```

