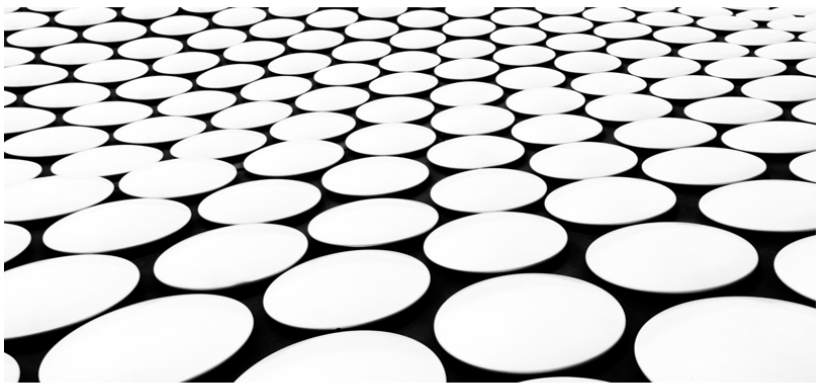


SCHOOL OF AI
ITALIA

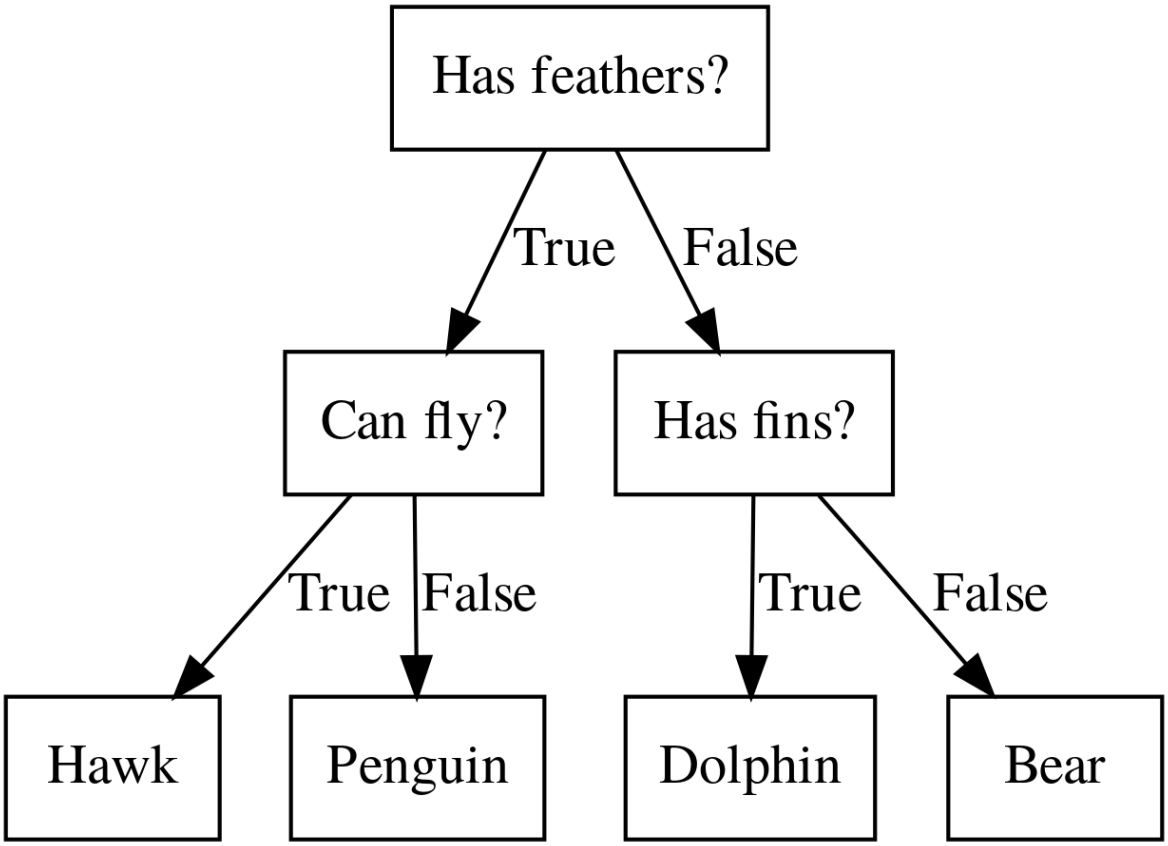
MACHINE LEARNING AVANZATO DA ZERO

ANTONIO DI CECCO - SCHOOL OF AI

Decision Tree, Random Forest ed Ensemble di modelli

Decision Tree per la classificazione

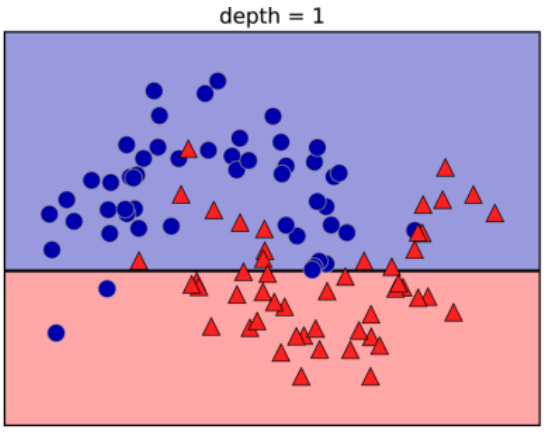
"Akinator" Idea: una serie di domande binarie

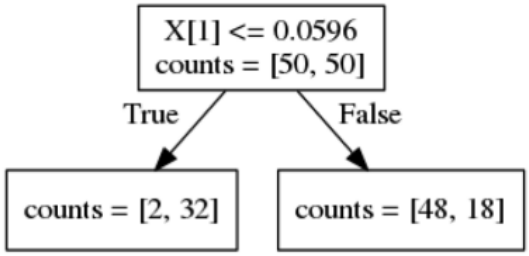


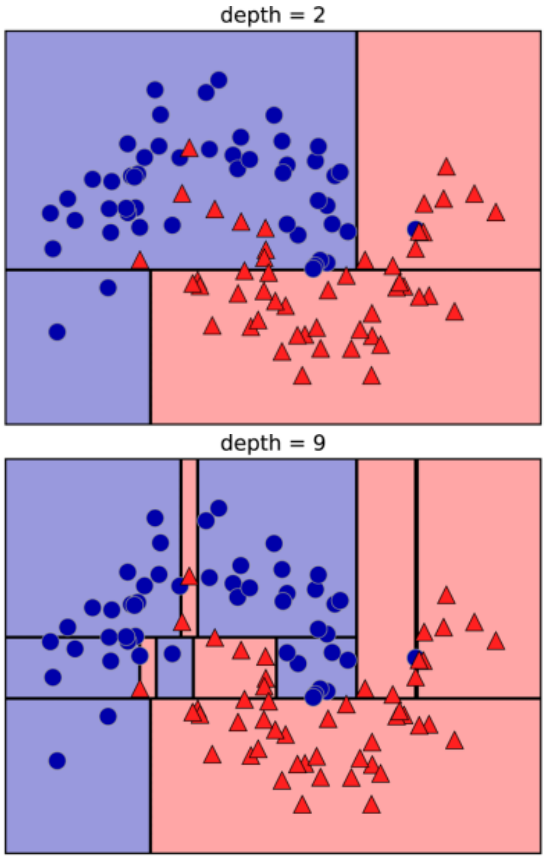
Costruire gli alberi

Feature continue:

- le “domande” sono i treshold su ogni feature
- Minimizzare l'impurità







Criteri (per la classificazione)

- Indice di Gini:

$$H_{\text{gini}}(X_m) = \sum_{k \in \mathcal{Y}} p_{mk}(1 - p_{mk})$$

- Cross-Entropy:

$$H_{\text{CE}}(X_m) = -\sum_{k \in \mathcal{Y}} p_{mk} \log(p_{mk})$$

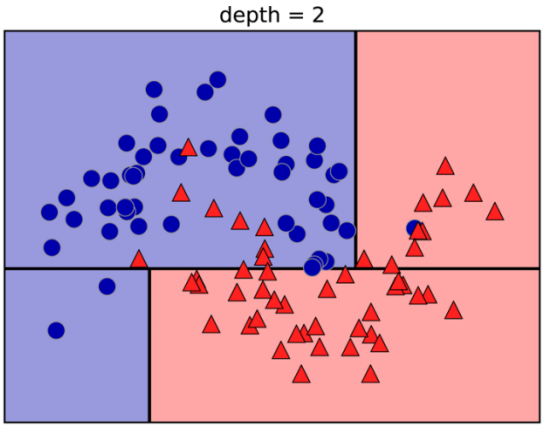
X_m osservazioni nel nodo m

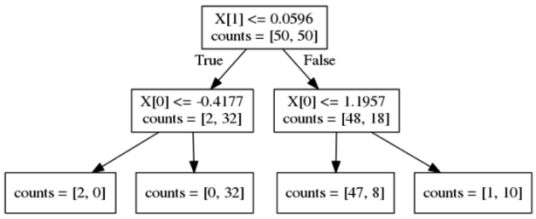
y classi

p_m distribuzione sulle classi nel nodo m

Predizione

attraverso l'albero fino alla foglia molto veloce





Alberi di regressione

La predizione è la media dei target nella foglia

- Predizione

$$\bar{y}_m = \frac{1}{N_m} \sum_{i \in N_m} y_i$$

Il criteri di impurity invece

- Mean Squared Error:

$$H(X_m) = \frac{1}{N_m} \sum_{i \in N_m} (y_i - \bar{y}_m)^2$$

- Mean Absolute Error:

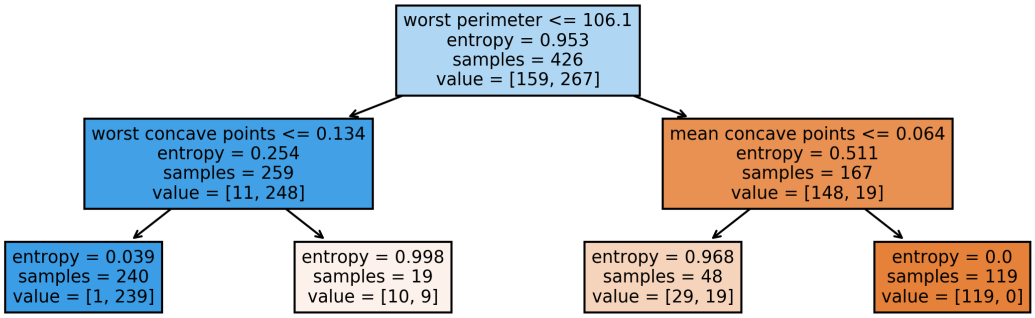
$$H(X_m) = \frac{1}{N_m} \sum_{i \in N_m} |y_i - \bar{y}_m|$$

Visualizzare gli alberi con sklearn

```
from sklearn.datasets import load_breast_cancer
cancer = load_breast_cancer()
X_train, X_test, y_train, y_test = train_test_split(cancer.data,cancer.target,
                                                    stratify=cancer.target,
                                                    random_state=0)

from sklearn.tree import DecisionTreeClassifier
tree = DecisionTreeClassifier(max_depth=2)
tree.fit(X_train, y_train)
```

```
from sklearn.tree import plot_tree
tree_dot = plot_tree(tree, feature_names=cancer.feature_names)
```



Tuning dei parametri

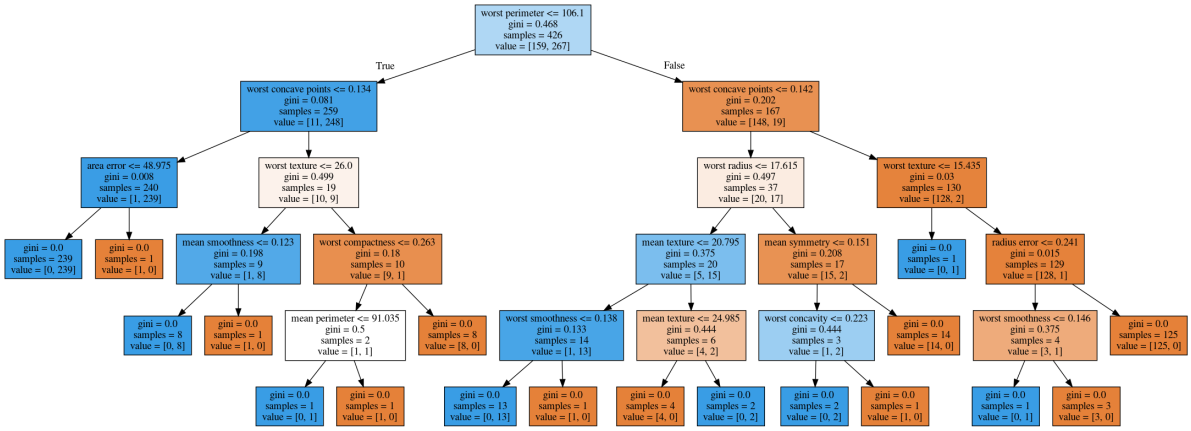
Pre-pruning vs post-pruning

Pre-pruning: Limita la dimensione dell'albero

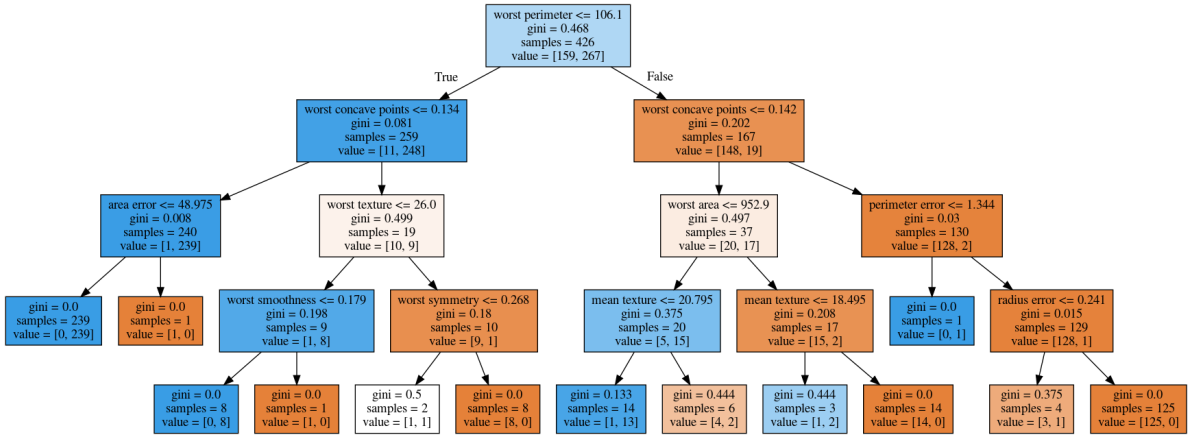
esempi

- max_depth
- max_leaf_nodes
- min_samples_split
- min_impurity_decrease

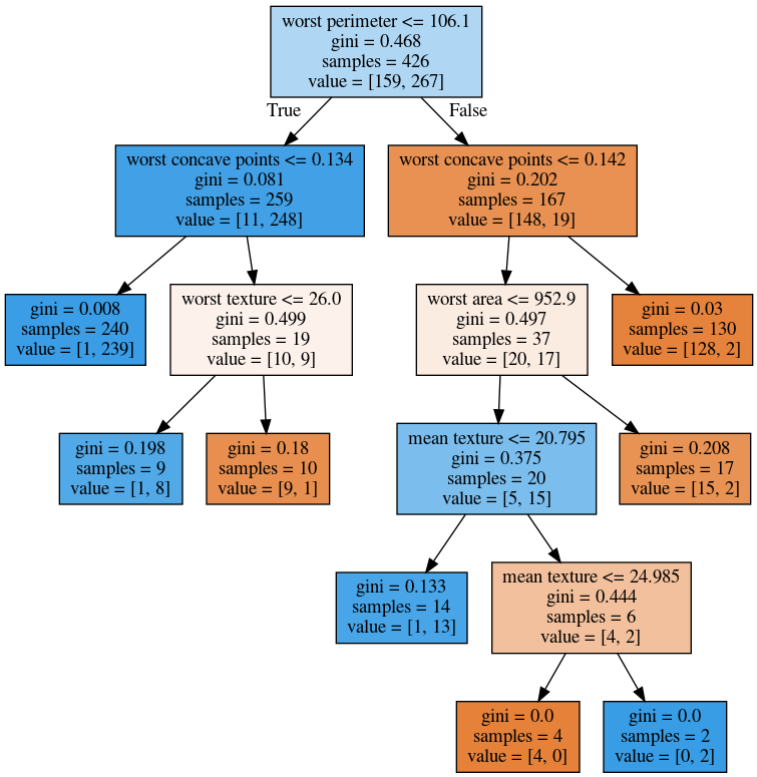
Nessun pruning



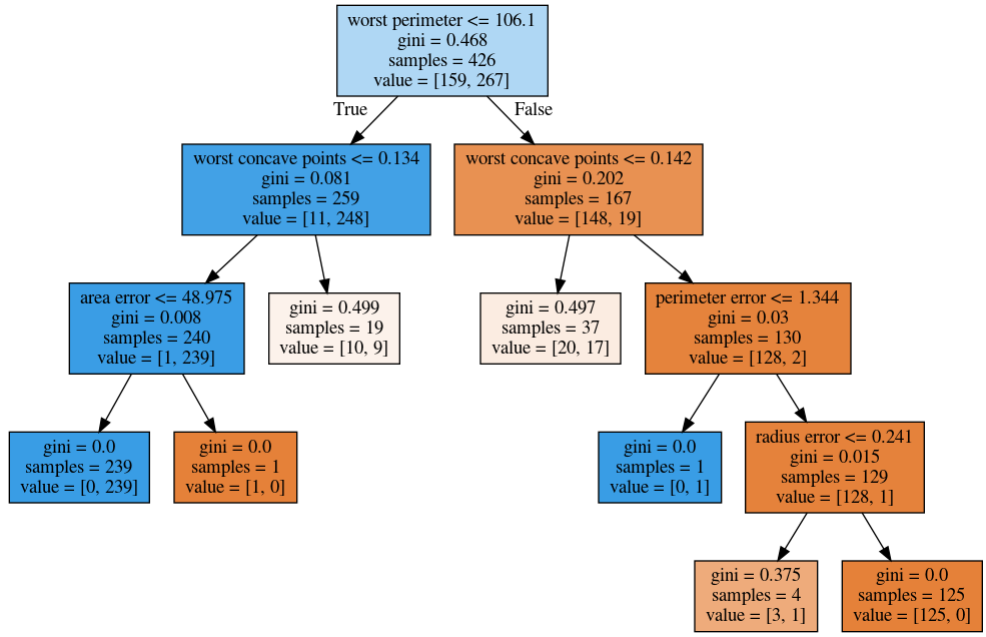
max_depth = 4



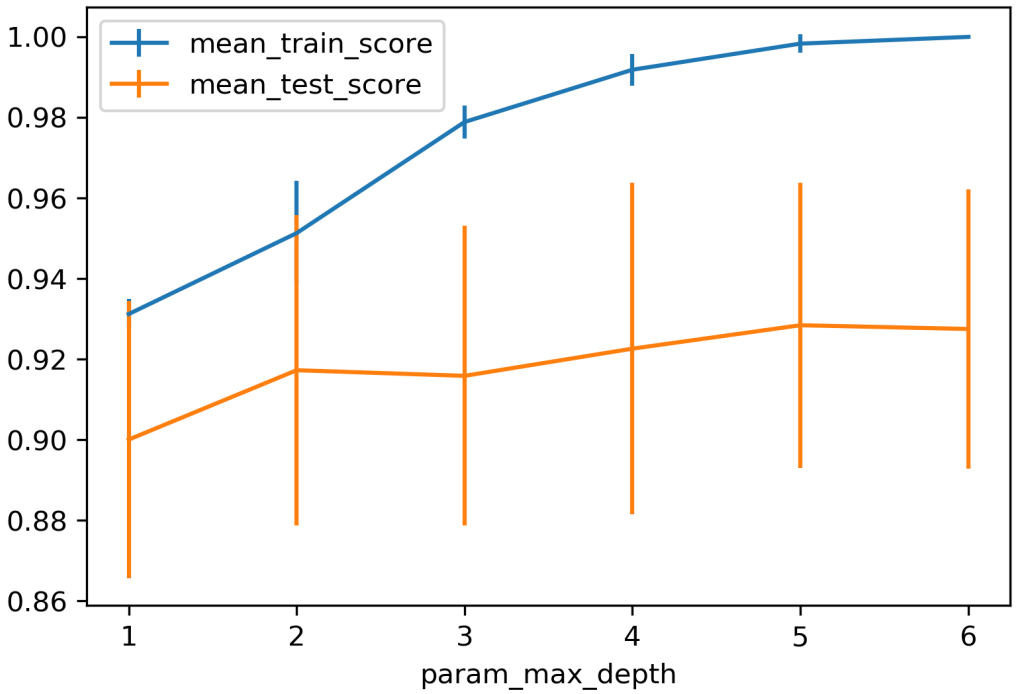
max_leaf_nodes = 8



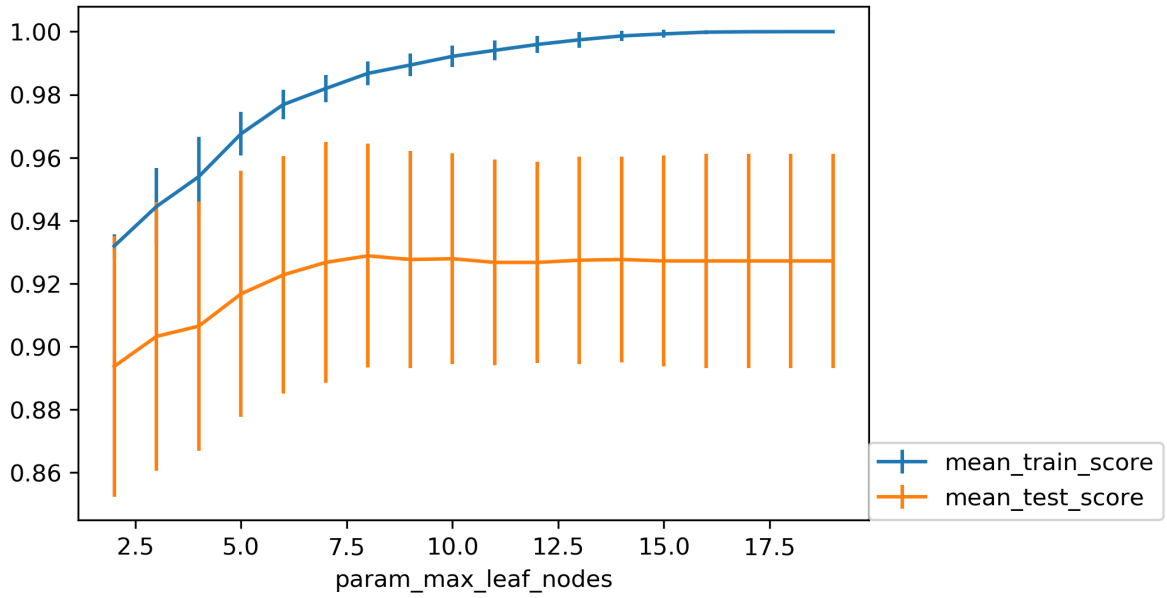
min_samples_split = 50




```
from sklearn.model_selection import GridSearchCV
param_grid = {'max_depth':range(1, 7)}
grid = GridSearchCV(DecisionTreeClassifier(random_state=0),
                    param_grid=param_grid, cv=10)
grid.fit(X_train, y_train)
```




```
param_grid = {'max_leaf_nodes':range(2, 20)}
```



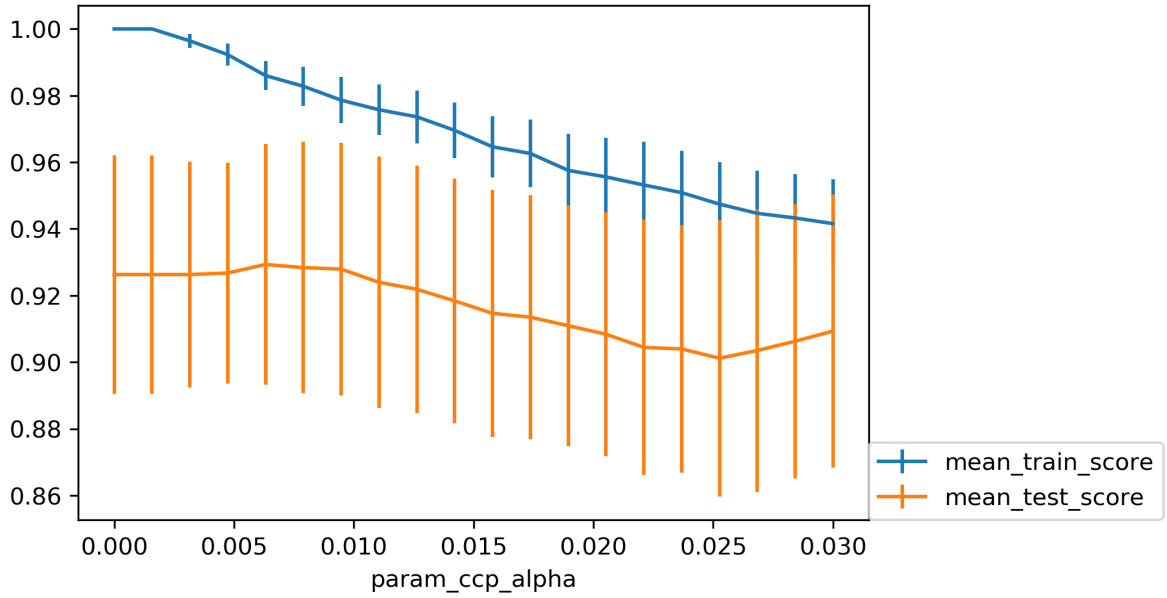
Post pruning

Cost Complexity Pruning

$$R_\alpha(T) = R(T) + \alpha|T|$$

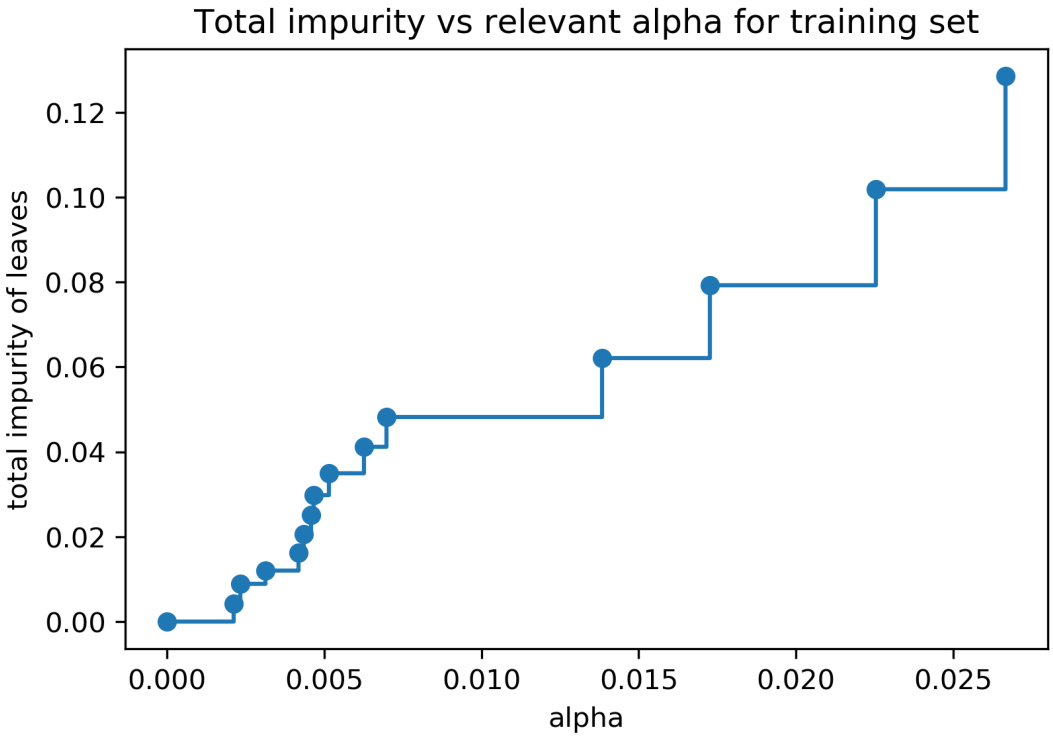
$R(T)$ is total leaf impurity
$|T|$ is number of leaf nodes
α is free parameter.

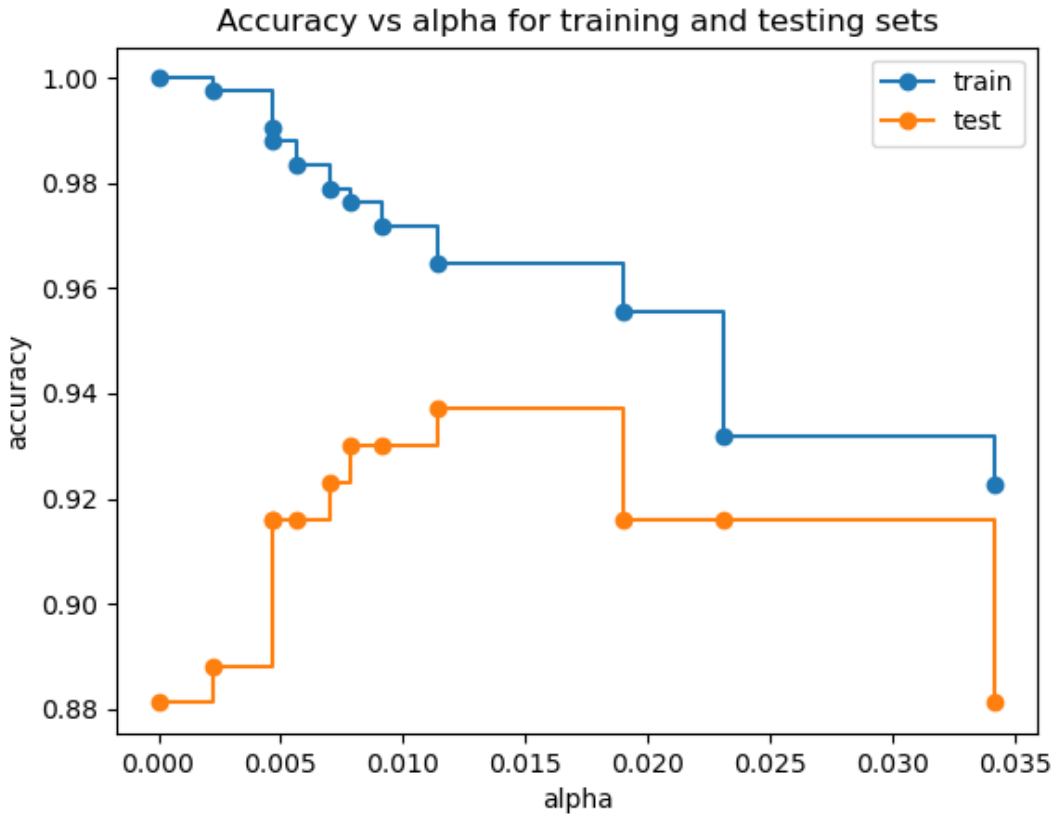
```
param_grid = {'ccp_alpha': np.linspace(0., 0.03, 20)}
```



Pruning efficiente

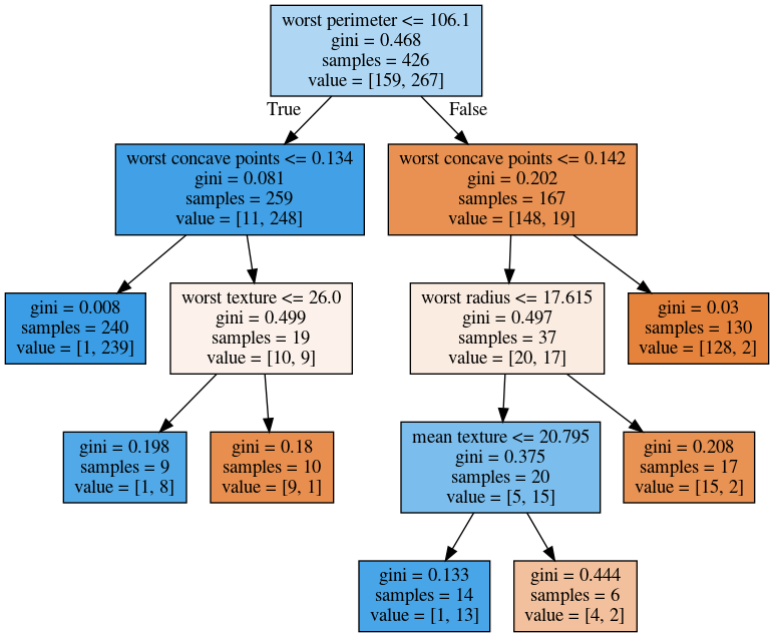
```
clf = DecisionTreeClassifier(random_state=0)
path = clf.cost_complexity_pruning_path(X_train, y_train)
ccp_alphas, impurities = path.ccp_alphas, path.impurities
```



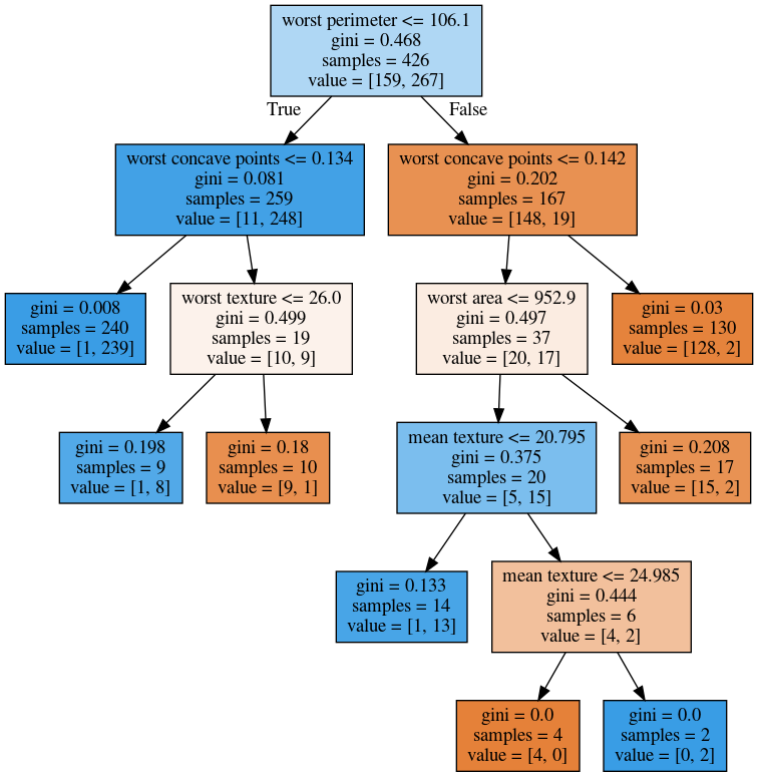


Confronto post-pruned vs pre-pruned

Cost-complexity pruning



Max leaf nodes search

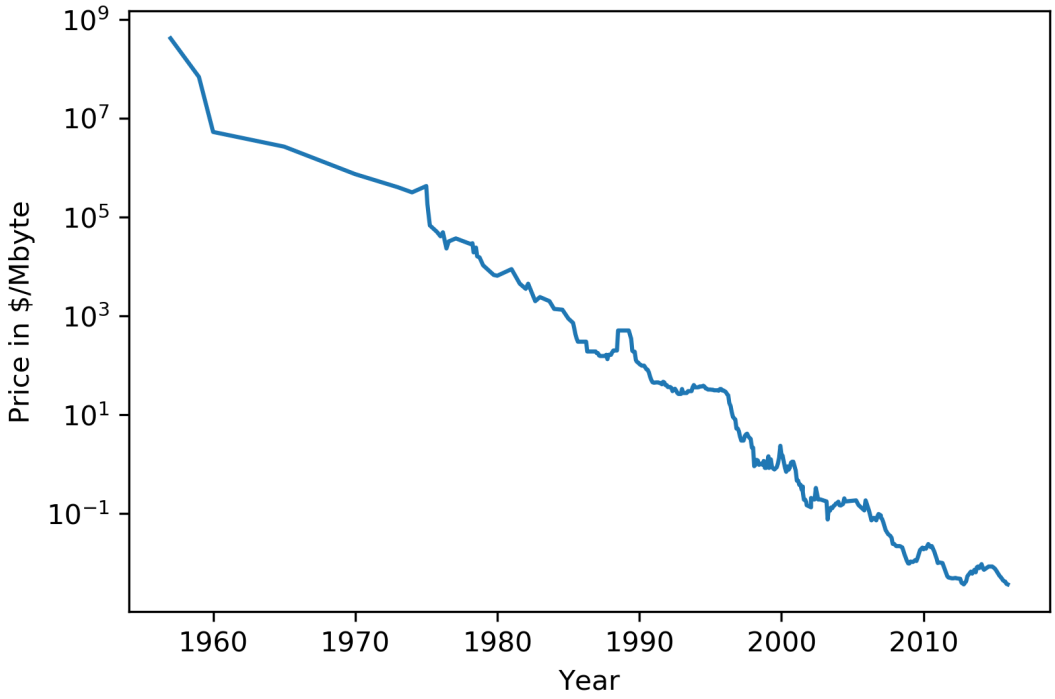


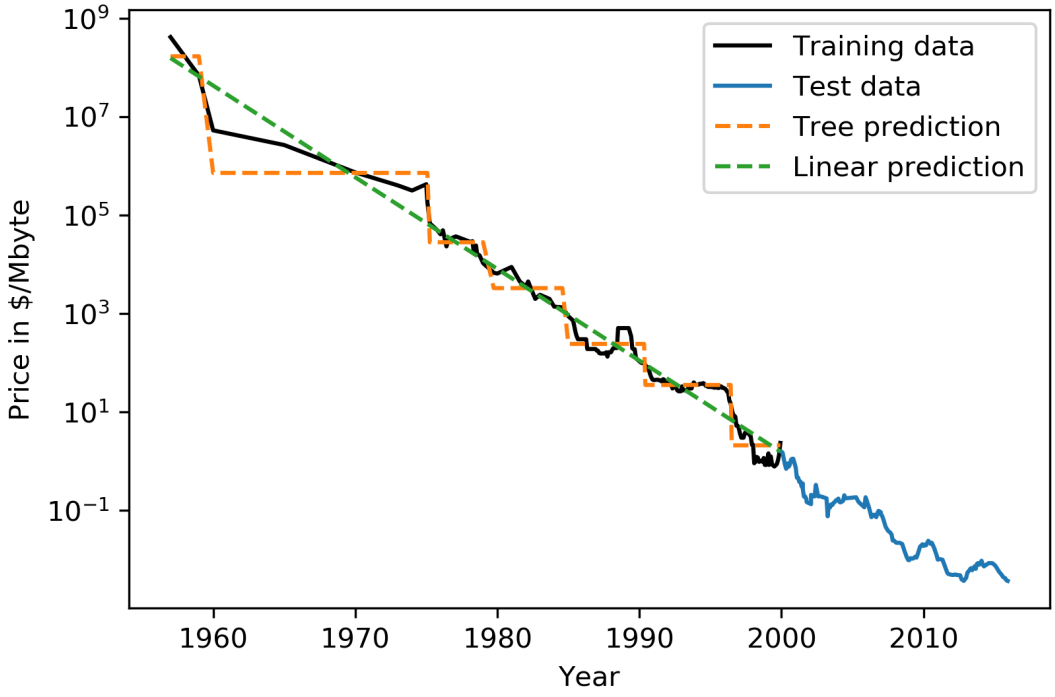
Extrapolazione

Molti modelli in Machine Learning sono nati per interpolare e non sanno estrapolare

estrapolare è estendere la predizione lontano dall "*nuvola*" dei dati

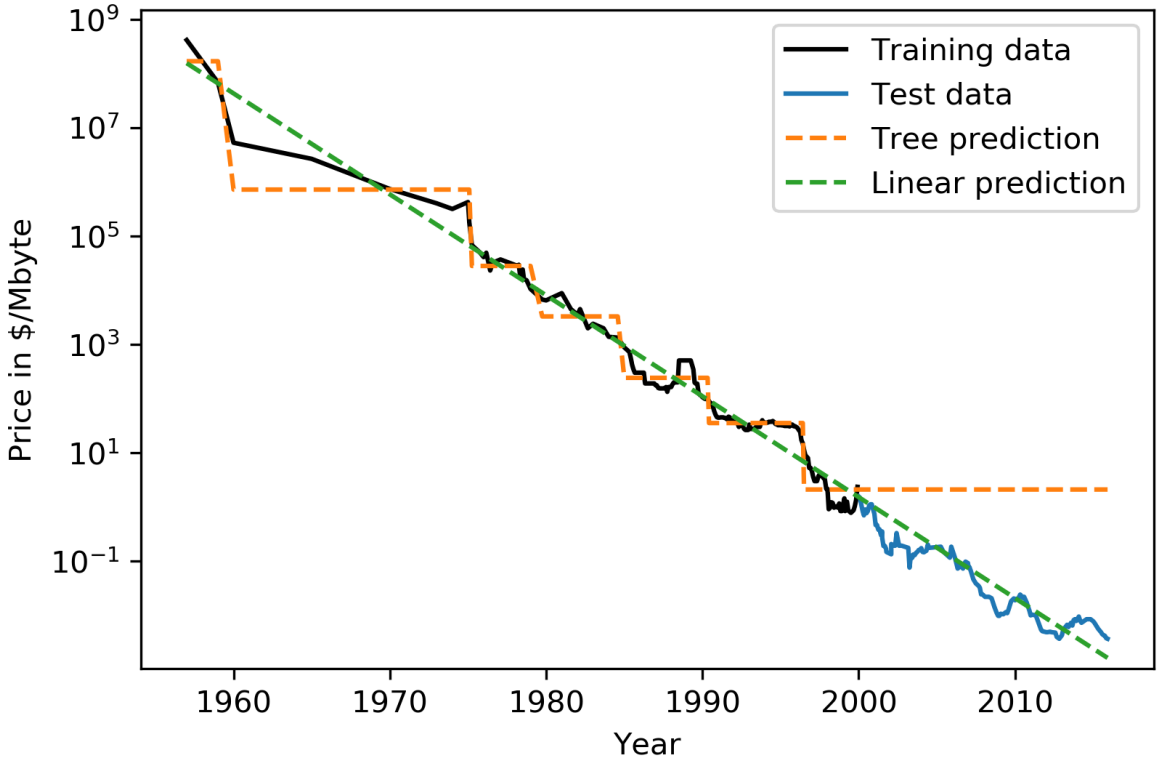
Prendiamo una serie temporale





“gli alberi non sanno estrapolare”

I Decision Tree sono come il KNN effettuano medie dei valori vicini (quelli presenti nella stessa foglia)



non riescono a vedere il trend

come posso ovviare a questa situazione?

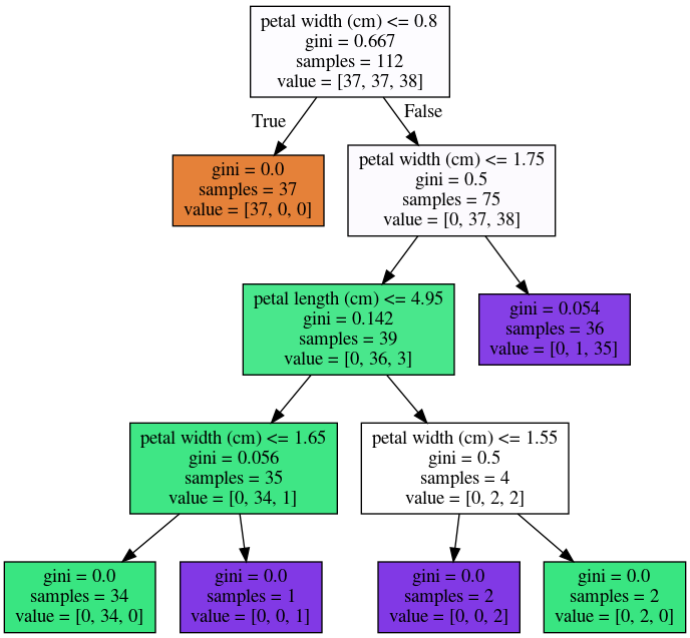
OSSERVAZIONE: C'è differenza tra estrapolazione e generalizzazione

Relatione con il Nearest Neighbors

- Predice la media dei vicini che siano k, una ϵ-palla o una foglia.
- Gli alberi sono molto più veloci in predizione.
- Entrambi non riescono ad estrapolare
- 1KK e Decision Tree non regolarizzati hanno un *perfetto overfit*

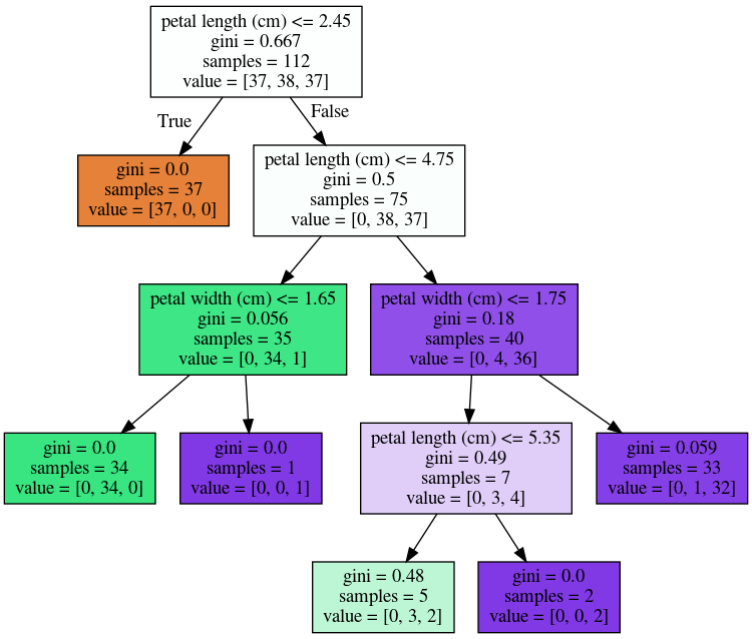
Instabilità

```
X_train, X_test, y_train, y_test = train_test_split(
    iris.data, iris.target, stratify=iris.target, random_state=0)
tree = DecisionTreeClassifier(max_leaf_nodes=6)
tree.fit(X_train, y_train)
```



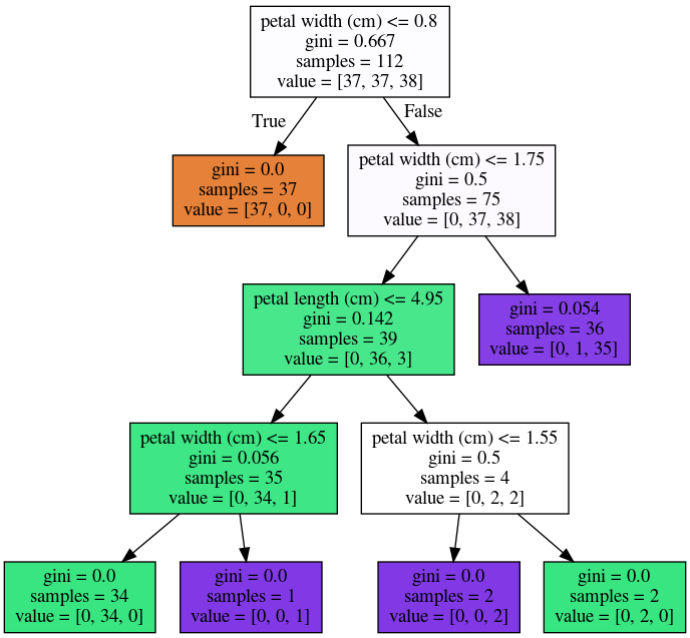
cambio solo il seme

```
X_train, X_test, y_train, y_test = train_test_split(
    iris.data, iris.target, stratify=iris.target, random_state=1)
tree = DecisionTreeClassifier(max_leaf_nodes=6)
tree.fit(X_train, y_train)
```

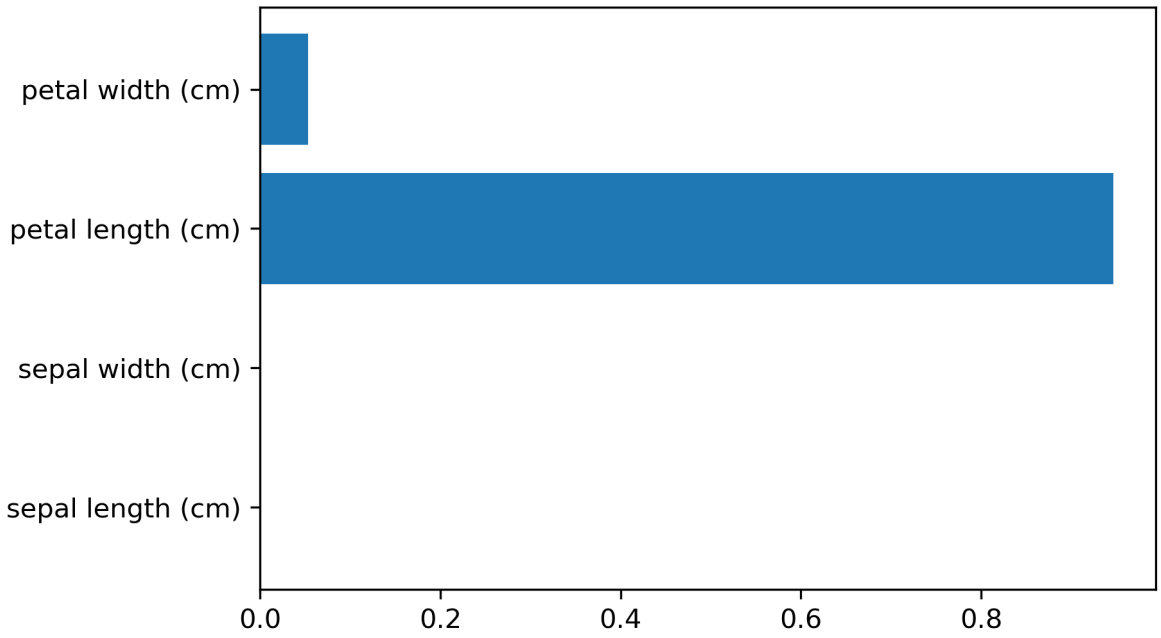


Feature importance

```
X_train, X_test, y_train, y_test = train_test_split(
    iris.data, iris.target, stratify=iris.target, random_state=0)
tree = DecisionTreeClassifier(max_leaf_nodes=6)
tree.fit(X_train,y_train)
```




```
tree.feature_importances_
array([0.0, 0.0, 0.414, 0.586])
```



Ogni volta che una particolare feature è scelta nell'albero accumuli come viene diminuita la sua impurezza.

Se uso una feature più volte aggiungo le diminuzioni di purezza (gli aumenti di purezza)

Il problema principale è che l'instabilità del modello rende instabile anche la feature importance

(ci sono poi problemi che vanno oltre i limiti del modello la causalità, se diverse feature sono correlate *sostituibili tra loro* e trattare modelli con un numero enorme di feature).

Dati Categorici

- Trattano i dati categorici nativamente
- Gli split vengono fatti tra insiemi diversi
- 2^n valori molte possibilità di split
- Possible da fare in O(n_values . log(n_values)) esattamente per gini index e classificazione binaria
- Viene usata un'euristica in pratica per il multiclasse
- Non c'è ancora in sklearn

Predire le probabilità

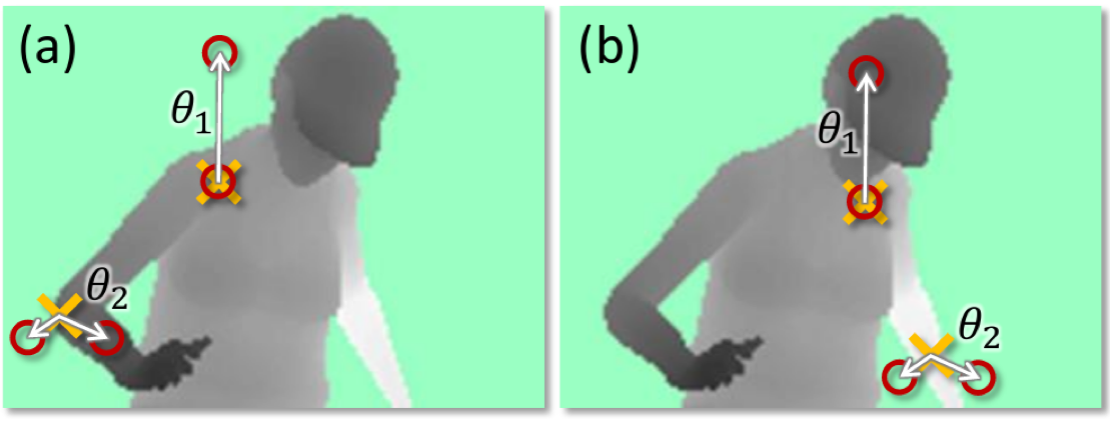
- Frazione della classe nella foglia
- Senza il pruning sempre 100% certo
- Perfino con il pruning troppa sicurezza

Alberi di inferenza condizionale

- Scelgono il "best" split correggendo per diversi test di ipotesi
- Più "fair" verso le variabili categoriche
- c'è solo in R

I decision tree sono molto flessibili

(preso da Shotton et. al. Real-Time Human Pose Recognition ..)



Un'imagine di profondità per capuire sove sono le differenti parti del corpo

Mi chiedo la profondità di altri pixel rispetto a un pixel di riferimento

Quindi paragono pixel o regioni di pixel

Vantaggi

- posso usare qualsiasi cosa come candidato allo split

- Computer vision: paragoni di pixel
- ad esempio alberi che hanno modelli lineari sulle foglie

Ensemble di modelli

- Costruisco mopdelli differenti
- Medio i risultati
- Owen Zhang (primo su kaggle per molto tempo): modelli XGBoosting con diversi random seed
- Più modelli sono meglio se non sono correlati
- Funziona anche con le reti neurali
- Puoi fare la media di quanti modelli vuoi basta che diano buone probabilità (*calibrate*)
- Scikit-learn: VotingClassifier hard and soft voting

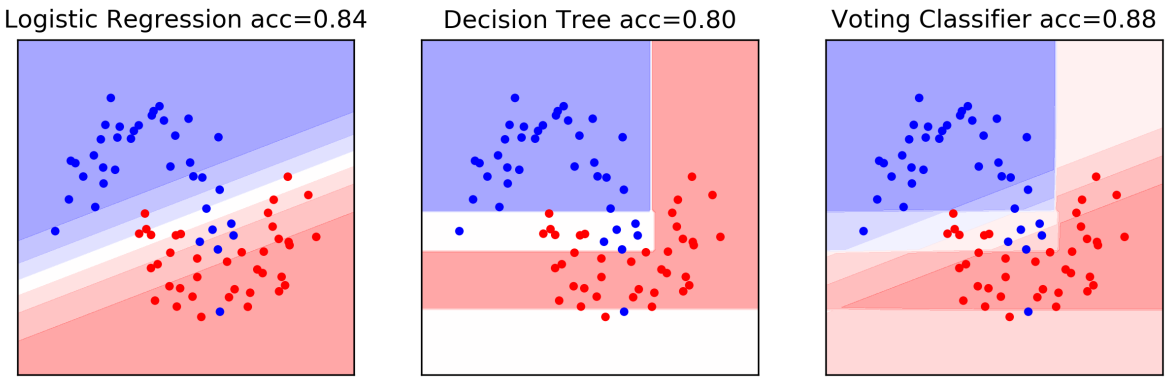
  Soft voting vuol dire fare la media delle probabilità e prendere arg max.

  Hard voting vuol dire ognuno fa una previsione e prendiamo quelllo più votato

VotingClassifier

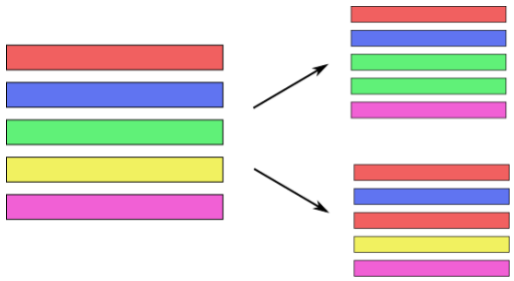
```
voting = VotingClassifier(
    [('logreg', LogisticRegression(C=100)),
     ('tree', DecisionTreeClassifier(max_depth=3, random_state=0))],
    voting='soft')
voting.fit(X_train, y_train)
lr, tree = voting.estimators_
tree.score(X_test, y_test), lr.score(X_test, y_test), voting.score(X_test,
y_test)
```

```
0.80 0.84 0.88
```



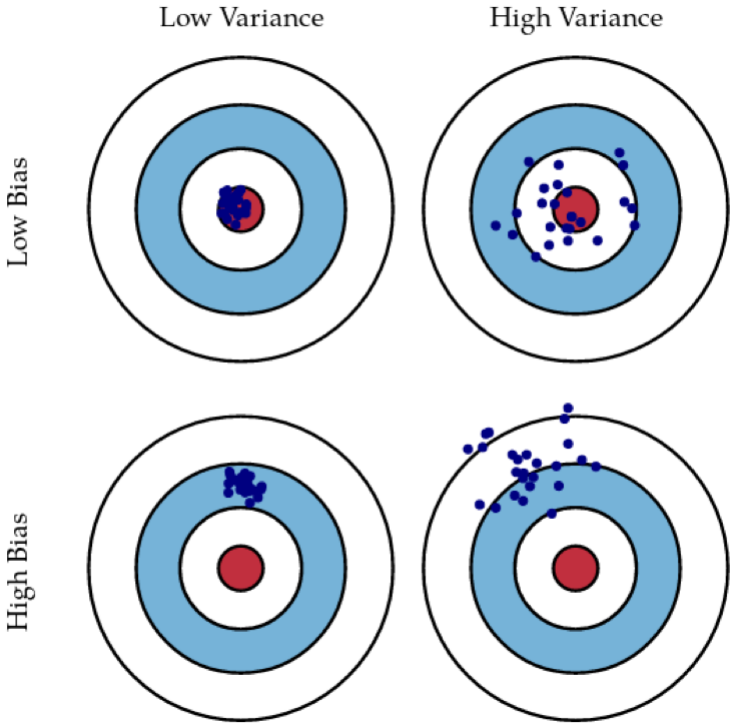
Bagging (Bootstrap AGGregation)

- Modo generale per costruire modelli abbastanza differenti
- Bootstrap sollevandosi tirandosi per i lacci



- BaggingClassifier, BaggingRegressor

Bias and Varianza



http://scott.fortmann-roe.com/docs/BiasVariance.html

$$Err(x) = E[(Y - \hat{f}(x))^2]$$

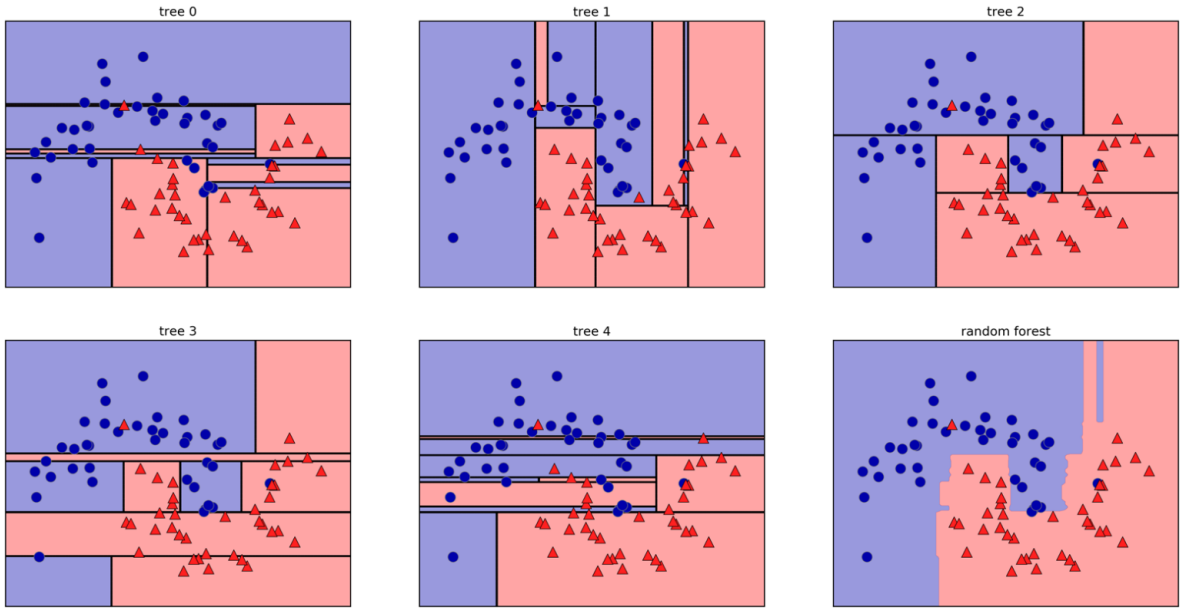
$$Err(x) = \left(E[\hat{f}(x)] - f(x)\right)^2 + E\left[\left(\hat{f}(x) - E[\hat{f}(x)]\right)^2\right] + \sigma_e^2$$

$$Err(x) = \text{Bias}^2 + \text{Variance} + \text{Irreducible Error}$$

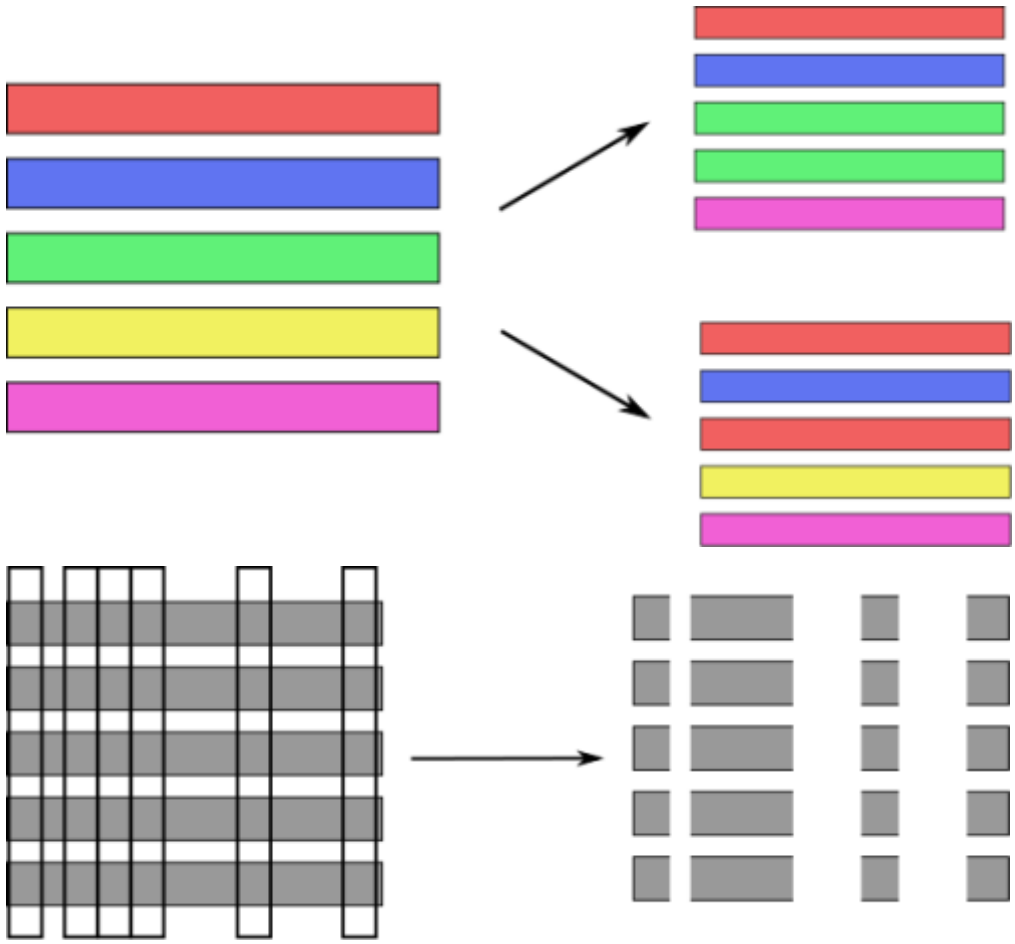
- Breiman ha mostrato che la generalizzazione dipende dalla forza dei singoli classificatori e *inversamente* dalla loro correlazione
- Trovare modelli scorrelati potrebbe essere più importante che trovare modelli forti

---

Random Forest



Randomizzare in due modi



- Per ogni albero:
  - campionamento bootstrap dei dati
- Per ogni split:
  - campionamento random delle feature a caso
- Più alberi sono sempre meglio

Tuning Random Forest

- Il paramentro più importante: max_features
  - circa sqrt(n_features) per la classificazione
  - circa n_features per la regressione
- n_estimators > 100
- Prepruning potrebbe aiutare sicuramente riduce la dimensione del modello
- max_depth, max_leaf_nodes, min_samples_split

Extremely Randomized Trees

- Ancora più a caso
- Il threshold è scelto a caso per ogni feature
- non usa il bootstrap
- più veloce non cerca e non mette in ordine

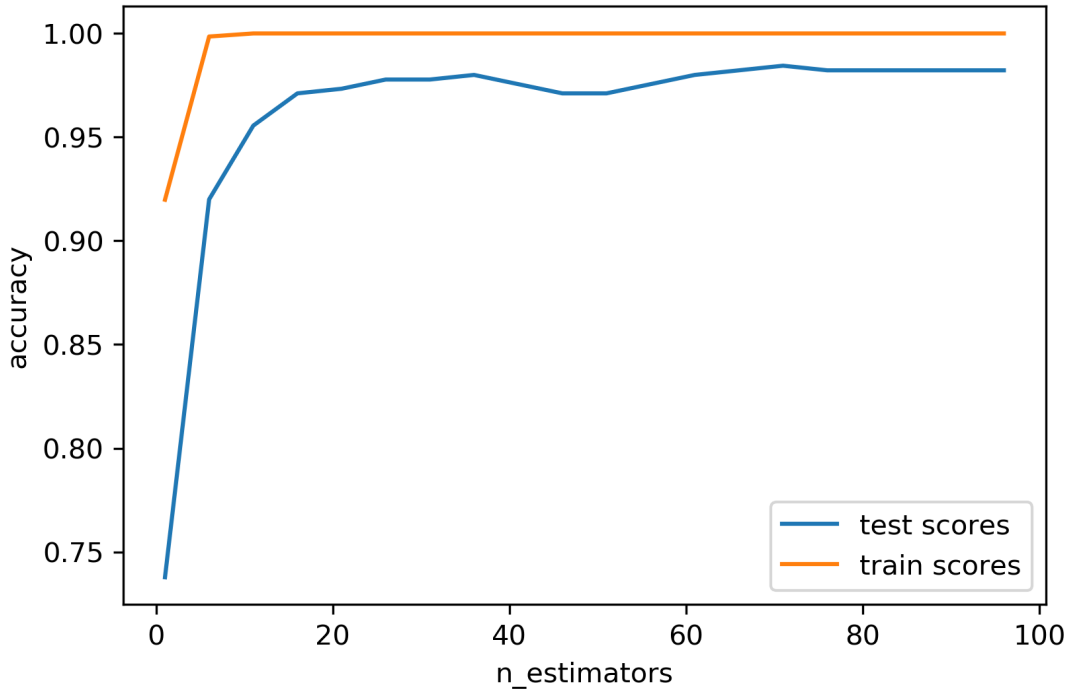
- ha boundary più smooth

> Random forest e ERT funzionano senza preprocessing. Basta che metti gli estimatori abbastanza alti. Non sarà il modello migliore ma funzionano

Warm-Start

```
train_scores = []
test_scores = []

rf = RandomForestClassifier(warm_start=True)
estimator_range = range(1, 100, 5)
for n_estimators in estimator_range:
    rf.n_estimators = n_estimators
    rf.fit(X_train, y_train)
    train_scores.append(rf.score(X_train, y_train))
    test_scores.append(rf.score(X_test, y_test))
```

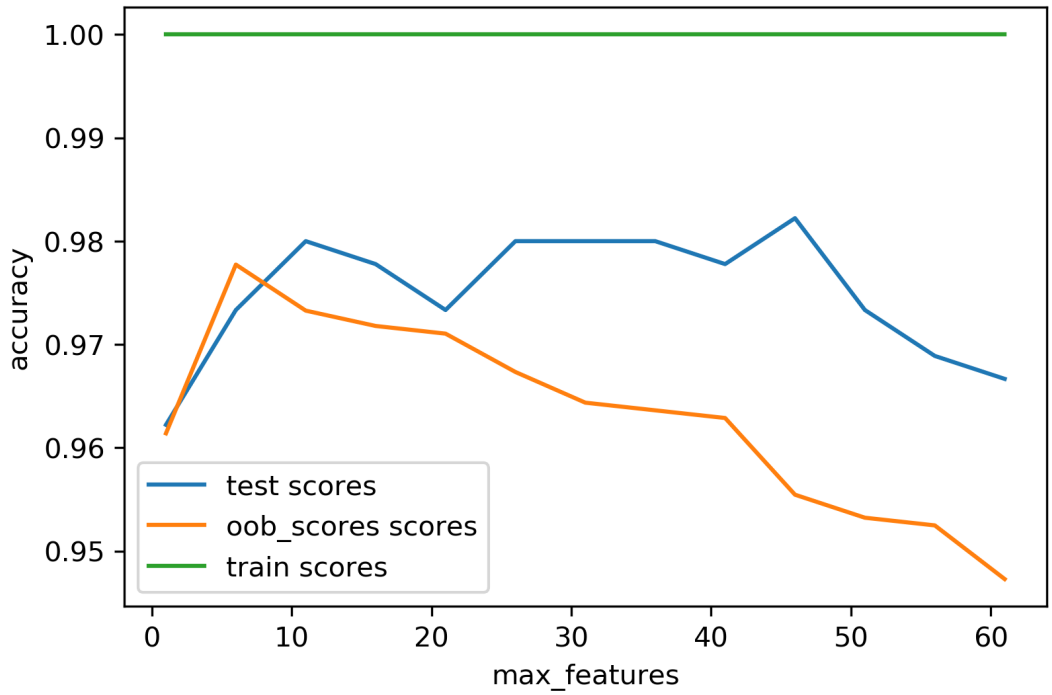


Stime Out-of-bag

- Ogni tree usa circa ~66% dei dati
- Possiamo valutarlo sul resto!
- Facciamo previsioni sull' out-of-bag, average, score.
- Ogni predizione è una media su differenti sottoinsiemi di alberi

```
train_scores = []
test_scores = []
oob_scores = []

feature_range = range(1, 64, 5)
for max_features in feature_range:
    rf = RandomForestClassifier(max_features=max_features, oob_score=True,
                                n_estimators=200, random_state=0)
    rf.fit(X_train, y_train)
    train_scores.append(rf.score(X_train, y_train))
    test_scores.append(rf.score(X_test, y_test))
    oob_scores.append(rf.oob_score_)
```

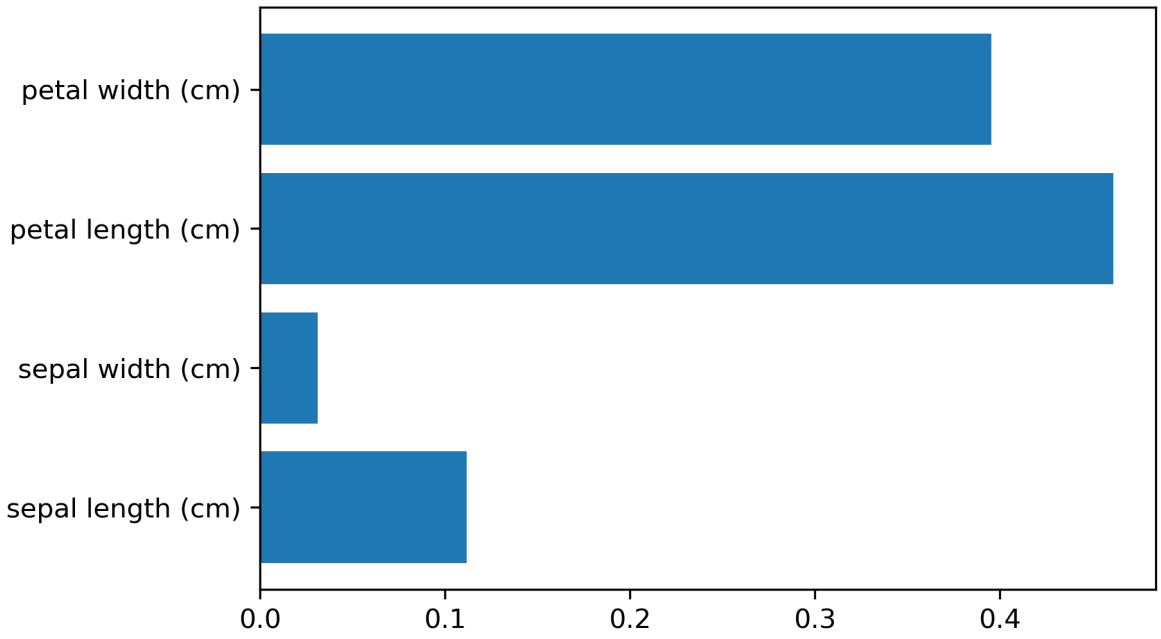


E' molto carino e perbette di avere un risultato paragonabile alla cross validation (in pratica anche più pessimista)

Variable Importance

```
X_train, X_test, y_train, y_test = train_test_split(
    iris.data, iris.target, stratify=iris.target, random_state=1)
rf = RandomForestClassifier().fit(X_train, y_train)
rf.feature_importances_
plt.barh(range(4), rf.feature_importances_)
plt.yticks(range(4), iris.feature_names);
```

```
array([ 0.126,  0.033,  0.445,  0.396])
```



Com’è calcolata la feature importance?

Quando una particolare feature viene usata guardo alla diminuzione di impurità le aggrego e alla fine le normalizzo a somma 1