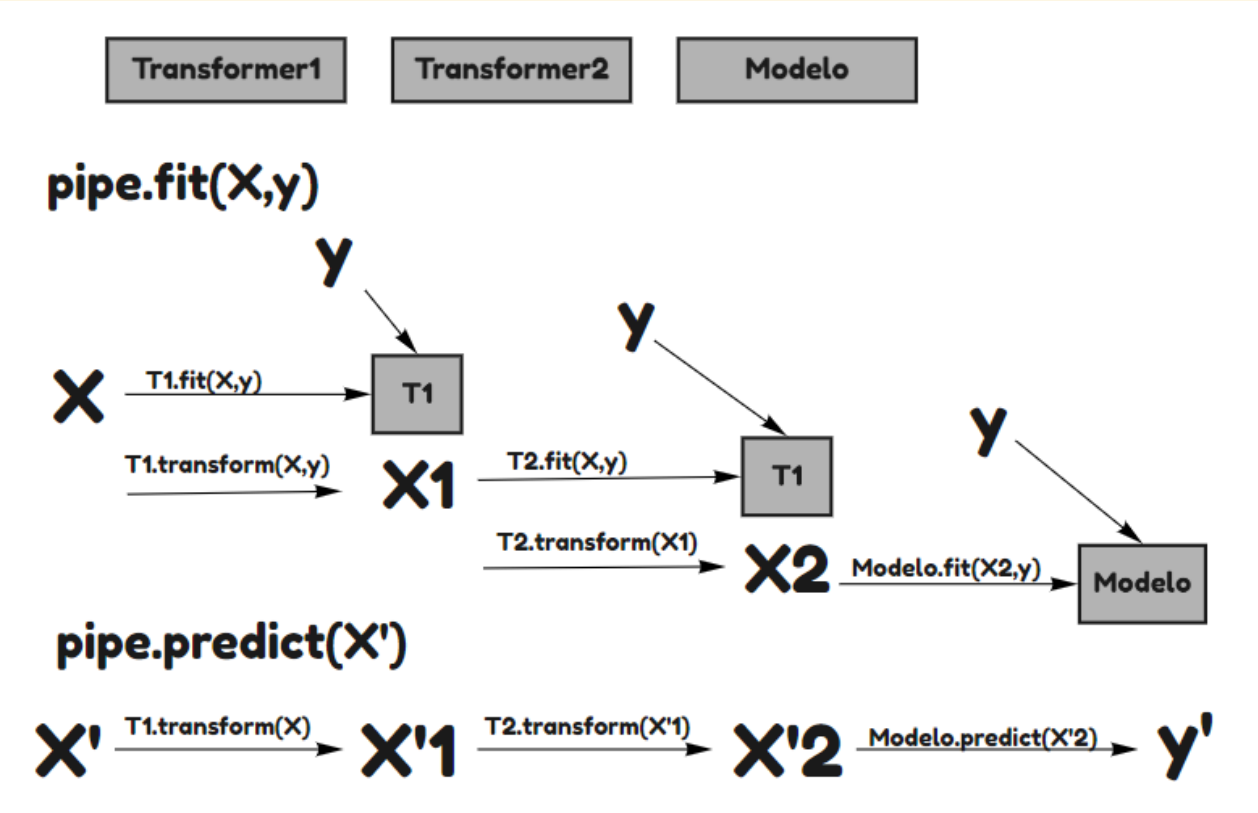
Pipelines en Scikit-Learn

Alfonso Tobar Arancibia
Data Scientist
05-10-2020


github.com/Rcubes/clases-ml/Slides

Pipelines

Trabajar con modelos de Machine Learning muchas veces requiere la combinación de muchos pasos que sean reproducibles tanto para el proceso de Entrenamiento como de Testeo/Validación. Es por eso que se necesita de una estructura robusta que soporte esto de manera estable.



Pipelines

```
from sklearn.pipeline import Pipeline
from category_encoders import OneHotEncoder
from sklearn.feature_selection import SelectPercentile, mutual_info_classif
from sklearn.model_selection import LogisticRegression



pipe = Pipeline(steps = [
  ('ohe', OneHotEncoder(use_cat_names = True))
  ('vs', SelectPercentile(mutual_info_clasif, percentile = 70)),
  ('lr', LogisticRegression(random_state = 123))
])

pipe.fit(X_train, y_train)
```

> NOTA: `pipe` ahora es un modelo, pero de muchas etapas. Esta es la manera correcta de trabajar en `scikit-learn` cuando se está en el proceso de entrenamiento/experimentación de un modelo. Todos los pasos pueden ser `Transformers`, pero sólo el último paso puede ser un `Estimator`.

Tratamiento de Nulos

Normalmente existen dos tipos de Nulos, los informativos y los MAR (missing at Random). Los informativos pueden ser útiles y quizás se pueden utilizar como una variable nueva. En cambio los valores MAR son por errores de proceso, no disponibilidad de información, etc.

Una estrategia simple en `scikit-learn` es utilizar `SimpleImputer()`:

```
from sklearn.imputer import SimpleImputer
from sklearn.preprocessing import StandardScaler
from sklearn.model_selection import LinerRegression

num = Pipeline(steps = [
  ('imp_num', SimpleImputer(strategy = 'mean')),
  ('sc', StandardScaler()),
  ('lr', LinearRegression())
])
```

- strategy: Corresponde a la estrategia de imputación numérica disponible:
  - **'mean'**: Rellena con la media de cada columna.
  - **'median'**: Rellena con la mediana de cada columna.
  - **'most_frequent'**: Rellena con el valor más frecuenta. Normalmente utilizado con categorías.
  - **'constant'**: Reemplaza con un valor dado. Se debe agregar el parámetro adicional 'fill_value' con el valor a rellenar.

Tratamiento de Nulos en Categorías

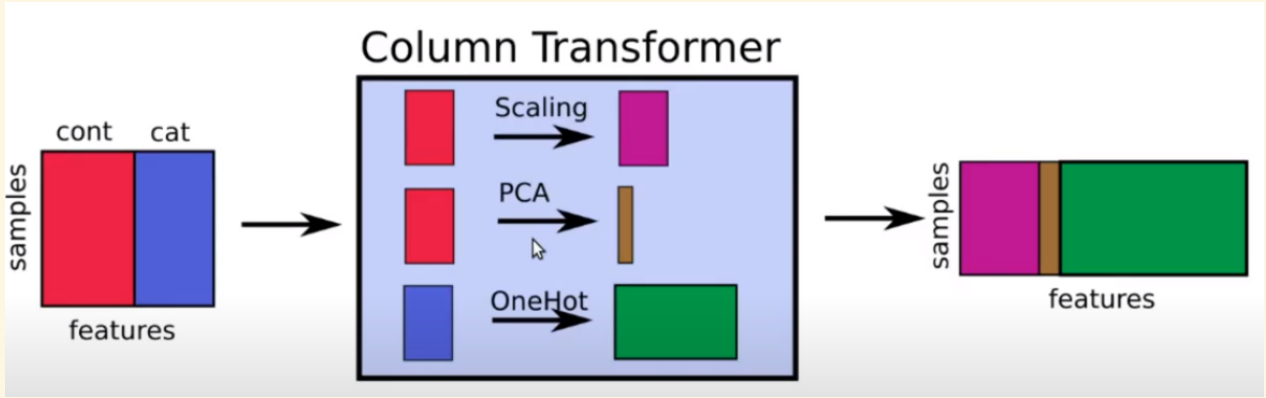
- La librería `category_encoders` es capaz de lidiar con variables nulos. Normalmente crear estrategias que le permitan manejar los valores nulos de manera autónoma.
- Además le permite lidiar con categorías no vistas durante el entrenamiento
- Puede crear categorías nuevas para los valores nulos.
- Podría no necesitar un proceso de Imputer ya que la librería se encarga.

```
cat = Pipeline(steps = [
  ('ohe', OneHotEncoder(use_cat_names = True))
  ('lr', LinearRegression())
])
```

Y qué pasa si quiero tratar categorías y números de manera distinta?

Existe el `ColumnTransformer()` que es un meta-estimator que ayuda a realizar procedimiento diferenciado a distintos sets de variables.

```
from sklearn.compose import ColumnTransformer
prep = ColumnTransformer(trasformers = [
  ('cont', num_pipeline, var_num),
  ('cat', cat_pipeline, var_cat)
])
```



Manipulando Pipelines

Accediendo a valores Internos.

Cuando queremos recuperar atributos de etapas intermedias de un Pipeline necesitamos acceder a él utilizando `.named_steps.etapa_del_pipeline`. Donde `etapa_del_pipeline` es el nombre que nosotros asignamos a las distintas etapas de un Pipeline. Estas propiedades están disponibles sólo después de **fitear** el modelo.

```
num = Pipeline(steps = [
  ('imp_num', SimpleImputer(strategy = 'mean')),
  ('sc', StandardScaler()),
  ('lr', LinearRegression())
])

# permite llamar los coeficientes que entrega
# una lr dentro de un pipeline.
num.named_steps.lr.coef_
```

> NOTA: Cuando queremos ingresar a una etapa de un ColumnTransformer se debe utilizar `.named_transformers_`.

Manipulando Pipelines

Qué pasa con el GridSearch?

La convención de `Scikit-Learn` para acceder hiperparámetros de un Pipeline es utilizando el nombre de la etapa y luego un doble underscore para el nombre del hipeparámetro.

Adicionalmente existe el comando `'passthrough'` que permite saltarse la etapa.

> NOTA: Usar con cuidado ya que puede fallar si me salto una etapa que tiene hiperparámetros en búsqueda.

```
num = Pipeline(steps = [
  ('imp_num', SimpleImputer(strategy = 'mean')),
  ('sc', StandardScaler()),
  ('lr', LinearRegression())
])

params = {'imp_num__strategy': ['mean', 'median'], # prueba dos estrategias de imputación
          'sc': ['passthrough', StandardScaler()]} # va a probar con y sin estandarización

GridSearchCV(num, params, cv = 5, scoring = 'accuracy', n_jobs = -1)
```