



DATA SCIENCE

Clase 47

Feature Importance en árboles y ensambles

2017



Evaluación de Modelos e Importancia de Features



- Explicar cómo se calcula la importancia de los features para los árboles de decisión
- 2 Calcular importancia de los features manualmente
- 3 Extraer la importancia de los features con scikit-learn
- 4 Ampliar el cálculo a modelos de ensamble (RF, ET)



Importancia de los Features en modelos No-Paramétricos





Introducción

- Cuando construimos un modelo de machine learning no sólo estamos interesados en la precisión de la predicción. Muy a menudo estamos construyendo un modelo para tener una idea sobre cuales son las variables predictoras relevantes.
- Por ejemplo, si tiene 1000 features para predecir la retención de usuarios.
 - ¿Qué features son relevantes?
 - ¿Cómo se pueden identificar?



Modelos Paramétricos

- Anteriormente se habló de la selección de features en el contexto de la Regresión Logística. La regresión logística es un modelo paramétrico, lo que significa que la hipótesis se describe con un número predeterminado de coeficientes que ajustamos para mejorar la precisión del modelo.
- En particular, dado que la regresión logística es un modelo lineal, cada parámetro está asociado a un feature específico. Por lo tanto, si los features están normalizados, podemos interpretar el tamaño de cada coeficiente como indicador de la importancia relativa de ese feature específico.
- También se vió como Scikit-Learn implementa varios métodos para la selección de features. Entre ellos podemos mencionar:
 - Eliminación recursiva de features
 - Selección de features basado en L1



Árboles de decisión

 Los modelos basados en árboles no son paramétricos, por lo tanto no tenemos coeficientes para ajustar como lo hicimos en modelos lineales. Sin embargo aún nos puede interesar saber cuáles features son más importantes.



Árboles de decisión

- Los modelos basados en árboles no son paramétricos, por lo tanto no tenemos coeficientes para ajustar como lo hicimos en modelos lineales. Sin embargo aún nos puede interesar saber cuáles features son más importantes.
- Cuando se entrena un árbol, se puede calcular cuánto cada feature disminuye la impureza al sumar todas las ganancias de pureza donde ese feature es usado para determinar una división.
- En otras palabras, la importancia de un feature se calcula como la reducción total (normalizada) del criterio por ese feature. También se conoce como la importancia de Gini.



Random Forest

¿Cómo extendería la definición de la importancia de los features de los árboles de decisión a los Random Forest?



Random Forest

- ¿Cómo extendería la definición de la importancia de los features de los árboles de decisión a los Random Forest?
- Podemos calcular la importancia de los features de cada árbol en el bosque y luego promediar las importancias en todo el bosque.
- Un random forest es un conjunto de árboles entrenados en muestras aleatorias y subconjuntos aleatorios de features.
- Por lo tanto, para cada árbol la importancia de un feature se puede calcular usando el mismo procedimiento esbozado antes. Luego los resultados se promedian en todo el bosque.

Demo: Importancia de los Features en un Árbol de decisión





Demo: Importancia de los features en un Árbol de decisión

Tomemos nuevamente el dataset de autos y supongamos que estamos trabajando en una empresa de automóviles y que tenemos la tarea de identificar qué features impulsan la aceptación de un auto.

Hemos recogido algunos datos sobre varios features:

PRECIO precio total

buying precio de compra

maint precio del mantenimiento

TÉCNICAS features técnicos

CONFORT confort

doors número de puertas

persons cantidad de personas que puede llevar

lug boot tamaño del baúl

safety seguridad estimada del auto



Los valores de los features son:

buying v-high, high, med, low maint v-high, high, med, low

doors 2, 3, 4, 5-more

persons 2, 4, more lug_boot small, med, big low, med, high

La distribución de clases (número de ocurrencias de cada clase)

clase	N	N[%]	
unacc	1210	(70.023 %)	
acc	384	(22.222 %)	
good	69	(3.993 %)	
v-good	65	(3.762 %)	



Vamos a comenzar con la lectura del dataset de aceptabilidad de autos.

```
import pandas as pd
df = pd.read_csv('./datasets/car.csv')
df.head()
```

	buying	maint	doors	persons	lug_boot	safety	acceptability
0	vhigh	vhigh	2	2	small	low	unacc
1	vhigh	vhigh	2	2	small	med	unacc
2	vhigh	vhigh	2	2	small	high	unacc
3	vhigh	vhigh	2	2	med	low	unacc
4	vhigh	vhigh	2	2	med	med	unacc



Si el objetivo es una clasificación con K clases posibles.

Si el nodo m representa una región Rm con Nm muestras, donde Nk son muestras de la clase k, la proporción de la clase k en nodo m puede escribirse como:

$$C_k = \frac{N_k}{N_m}$$

El índice de impureza Gini se define entonces como:

import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
C0 = np.linspace(0,1)
C1 = 1.0 - C0
gini = 1 - (C0**2 + C1**2)
plt.plot(C0, gini)





Aquí vamos a verificar el cálculo del índice Gini en el nodo raíz del árbol.

```
cantidad ocurrencias clases = pd.Series(y).value counts()
total observaciones = sum( cantidad ocurrencias clases )
proporciones_clases = cantidad_ocurrencias_clases / total_observaciones
print "Proporciones Clases"
print proporciones clases
gini = 1 - sum( proporciones_clases ** 2 )
print "Gini: ",gini
  Proporciones Clases
       0.700231
      0.222222
       0.039931
       0.037616
  dtype: float64
  Gini: 0.457283763074
```

```
persons_2 ≤ 0.5
gini = 0.4573
samples = 100.0%
value = [0.22, 0.04, 0.7, 0.04]
class = unacc
True
```



Ahora veamos la importancia de los features del árbol generado.

Para lo cual utilizaremos feature_importances_

	importancia	
safety_low	0.545239	
persons_2	0.363493	
maint_vhigh	0.091268	
buying_high	0.000000	
doors_5more	0.000000	

Observar que solo tres features tienen alguna importancia. Esto se debe a que solamente esos tres fueron utilizados para hacer divisiones, dado que restringimos artificialmente el árbol ser pequeño.



Ahora verifiquemos el cálculo de la importancia.

```
ganancia_gini_persons_2 = 1.000 * 0.4573 - 0.667 * 0.5792 - 0.333 * 0.0000
ganancia_gini_safety_low = 0.666 * 0.5792 - 0.444 * 0.6288 - 0.222 * 0.0000
ganancia_gini_buying_vhigh = XXXXX

norm = ganancia_gini_persons_2 + ganancia_gini_safety_low + ganancia_gini_buying_vhigh

print "persons_2:", ganancia_gini_persons_2 / norm
print "safety_low:", ganancia_gini_safety_low / norm

print "buying_vhigh:", ganancia_gini_buying_vhigh / norm

persons_2: 0.363296106372
safety_low: 0.545453987045
buying vhigh: 0.0912499065828
```

Práctica guiada: Importancia de los features en modelos Ensamble



PRÁCTICA: IMPORTANCIA EN MODELOS ENSAMBLE



Scikit Learn implementa importancia de features en random forest y extra trees.

Vamos a entrenar ambos modelos e investigar la importancia de los features.

```
from sklearn.ensemble import RandomForestClassifier, ExtraTreesClassifier
rf = RandomForestClassifier(class_weight='balanced', n_jobs=-1)
rf.fit(X, y)
```

El Random forest expone la importancia de los features y lo calcula como la media de la importancia de los features de los árboles base. Vamos a verificar eso.

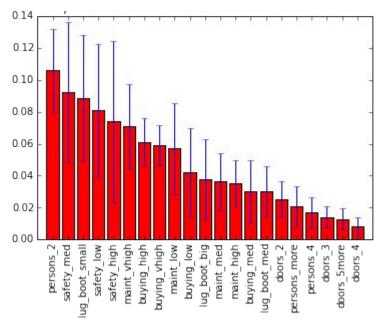
```
importancias = rf.feature_importances_
print all(importancias == np.mean([tree.feature_importances_ for tree in rf.estimators_], axis=0))
True

# Calcule la desviación estándar de la importancia de los features haciendo un bucle sobre los árboles en el random forest
std = ?????
```

indices = np.argsort(importancias)[::-1]



```
nombres features = X.columns
# Graficar la importancia de los features
 en el random forest
plt.figure()
plt.title("Importancia de los features")
plt.bar(range(X.shape[1]), importancias[indices],
    color="r", yerr=std[indices], align="center")
plt.xticks(range(X.shape[1]),
    nombres features[indices], rotation=90)
plt.xlim([-1, X.shape[1]])
plt.show()
```

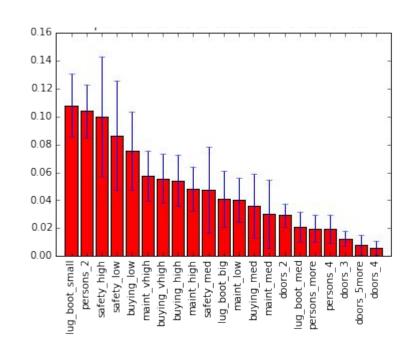


std = np.std([tree.feature_importances_ for tree in rf.estimators_], axis=0)



Aquí calculamos la importancia de los features para ExtraTrees

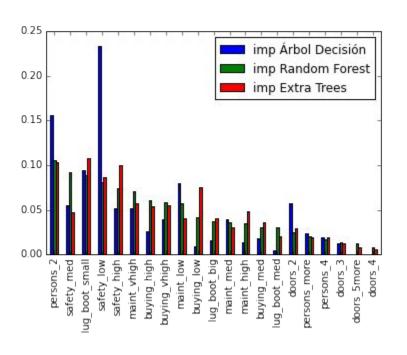
```
et = ExtraTreesClassifier(class_weight='balanced', n_jobs=-1)
et.fit(X, y)
importancias = et.feature importances
std = np.std([tree.feature importances
             for tree in et.estimators ], axis=0)
indices = np.argsort(importancias)[::-1]
nombres features = X.columns
# Graficar la importancia de los features
plt.figure()
plt.title("Importancia de los features en ExtraTrees")
plt.bar(range(X.shape[1]), importancias[indices],
      color="r", yerr=std[indices], align="center")
plt.xticks(range(X.shape[1]), nombres features[indices],
      rotation=90)
plt.xlim([-1, X.shape[1]])
plt.show()
```





Finalmente comparemos los 3 modelos

	imp Árbol Decisión	imp Random Forest	imp Extra Trees
persons_2	0.155542	0.106006	0.103813
safety_med	0.055551	0.092098	0.047409
lug_boot_small	0.094315	0.088645	0.107911
safety_low	0.233312	0.081021	0.086503
safety_high	0.051794	0.073872	0.099826



CONCLUSIÓN





- Hasta aquí aprendimos sobre la importancia de los features y cómo se calculan para los modelos basados en árboles.
- También hemos profundizado nuestra comprensión de la medidas Gini.