UNIDAD 2. Adaboost, Random Forest.

Adaboost

AdaBoost (Adaptive Boosting, refuerzo adaptativo, Freund y Schapire, 1996) es un meta-algoritmo de aprendizaje automático que construye de forma iterativa un conjunto de reglas simples de clasificación (clasificadores débiles), que después se utilizan de forma conjunta para elaborar una regla compleja (clasificador fuerte), de forma similar a la utilización de un conjunto de expertos que decide por mayoría –para resolver un problema determinado- en lugar de emplear un único experto.

Un clasificador aleatorio decide al azar la clase a la que pertenece cada elemento. Se denomina clasificador débil a aquel que produce resultados solo ligeramente mejores que un clasificador aleatorio. En cualquier conjunto de datos tendremos en general muchas variables relacionadas con el criterio de clasificación o variable de interés, y la mayoría de ellas pueden ser utilizadas como clasificador débil.

El término boosting (fortalecimiento, refuerzo) se refiere a la idea de mejorar un clasificador débil, para intentar conseguir un grado de acierto mucho más alto, un clasificador fuerte, generalmente utilizando un cierto número de clasificadores débiles o bien una modificación y mejora progresiva de uno solo.

Si buscamos una clasificación con k clases, y decidimos la clase de cada elemento de forma totalmente aleatoria acertaremos en promedio 1/k (50% si son dos clases, 20% si son cinco, …), y el error de clasificación será 1-1/k: a los clasificadores débiles se les pide simplemente que tengan un error menor que 1-1/k, y del resto se encarga AdaBoost. Por ejemplo si queremos "adivinar" si un trabajador está en paro o no, un clasificador débil puede ser la edad, considerando que la proporción de parados es mayor entre los que tienen menos de 30 años: en lugar de decidir al azar lanzando una moneda diremos que es parado si es menor de 30 años y ocupado en otro caso. De ese modo mejoraremos ligeramente la tasa de éxito. Otros clasificadores débiles se pueden construir con variables adicionales como sexo, sector de actividad, profesión, o nivel de estudios.

El "refuerzo adaptativo" consiste en una estrategia que pondera de forma distinta los casos bien y mal clasificados en cada iteración, dando un peso mayor a los mal clasificados, para modificar de forma progresiva la regla de decisión.

Es un meta-algoritmo, porque los clasificadores débiles pueden ser generados por métodos diversos, como por ejemplo una simple recta que divide el plano en dos clases, o bien algún método más complejo como regresión logística o un árbol de clasificación.

Se considera que Adaboost es robusto al sobreajuste, problema común a la mayoría de los métodos de clasificación supervisada. El sobreajuste a los datos de la muestra hace que el método consiga clasificar con un alto grado de acierto la muestra disponible, es decir los casos utilizados en el entrenamiento, pero funciona mucho peor con casos nuevos, no utilizados para la construcción de la regla de clasificación.

Basicamente el algoritmo es el siguiente:

1) Se asignan pesos o ponderaciones iniciales iguales 1/n a todos los casos de la muestra de entrenamiento.

2) Se aplica el clasificador débil a los datos ponderados, y se asigna al clasificador un peso en función de la tasa de error "e" obtenida: peso = 0.5 ln[(1-e)/e].

Este paso se repite T veces modificando los pesos de los casos, aumentando los correspondientes a los casos mal asignados, con el fin de centrar los esfuerzos en clasificar bien los casos erróneos. En cada iteración se recalculan las ponderaciones de los casos, se aplica el clasificador, y se calcula el peso o ponderación del clasificador obtenido.

3) Finalmente se construye el clasificador mejorado como una combinación lineal de los T clasificadores encontrados, aplicando los pesos calculados en las T iteraciones.

Utilizaremos para la aplicación de este método la función boosting, del paquete de R adabag; esta función realiza el refuerzo adaptativo empleando como clasificadores débiles árboles de clasificación, que son entrenados con los datos de la muestra. Su sintaxis básica es la siguiente:

boosting(formula, data)

La fórmula debe expresar la variable de clasificación en función de los predictores; el argumento data, opcional, permite indicar el conjunto de datos al que se refieren los nombres de variables indicados en la fórmula.

Utilizaremos el conjunto de datos "deudas", en el archivo con formato de R "deudas.RData". Se trata de una muestra de 100 clientes de un banco, algunos de los cuales han presentado impagos, de los que se dispone de información relativa a su edad, nivel educativo, antigüedad en el empleo, antigüedad en su lugar de residencia actual, ingresos, relación entre deudas e ingresos, importe de las deudas por tarjeta de crédito, e importe de otras deudas. El banco está interesado en predecir o identificar los clientes que tendrán impagos basándose en esa información disponible.

```
setwd("C:/CURSO DM")     #  configura la carpeta o directorio de trabajo
load("deudas.RData")     #  carga el conjunto de datos
names(deudas)            #  listado de variables
summary(deudas)          #  resumen descriptivo
```

```
> names(deudas)
[1] "Edad"      "Formacion" "Empleo"    "Residencia" "Ingreso"   "Deud_ing"
[7] "Deud_tarj" "Deud_otr"  "Impago"
```

```
> summary(deudas)
    Edad               Formacion             Empleo            Residencia
 entre 30 y 40:36  bachillerato       :28  entre 5 y 10 años:24  entre 5 y 10:21
 mas de 40    :37  elemental          :56  más de 10 años   :41  más de 10   :39
 menos de 30  :27  estudios universit.:16  menos de 5 años  :35  menos de 5  :40

    Ingreso          Deud_ing        Deud_tarj          Deud_otr      Impago
 Min.   : 15.00   Min.   : 0.600   Min.   : 0.0300   Min.   : 0.090   No:68
 1st Qu.: 27.00   1st Qu.: 3.550   1st Qu.: 0.3675   1st Qu.: 0.940   Si:32
 Median : 38.50   Median : 6.400   Median : 0.8700   Median : 1.780
 Mean   : 46.27   Mean   : 8.915   Mean   : 1.2622   Mean   : 2.448
 3rd Qu.: 57.00   3rd Qu.:12.725   3rd Qu.: 1.5225   3rd Qu.: 3.027
 Max.   :176.00   Max.   :35.300   Max.   :11.3600   Max.   :16.670
```

Empezaremos instalando (menú de R Gui Paquetes → instalar paquetes) el paquete adabag, que será después cargado con la orden library.

```
library(adabag)        # carga el paquete adabag que contiene la función boosting
```

Dividimos los datos en dos submuestras. Una de ellas, de tamaño 80, será utilizada para construir el clasificador, y la otra, con los 20 casos restantes, la utilizaremos para validar los resultados: se predice la clase de cada elemento de la muestra de validación con las funciones generadas sin utilizar los datos de ese elemento.

Es conveniente elegir al azar los casos que formarán la muestra de entrenamiento. Sin embargo en este curso, dado que la muestra está previamente aleatorizada, emplearemos los 80 primeros para ese fin, y los 20 restantes como muestra de validación, para que los resultados obtenidos coincidan de forma aproximada con los mostrados en la unidad. La coincidencia no será total, ya que el algoritmo utiliza elementos aleatorios para la construcción de los clasificadores débiles, aunque los resultados globales deben ser similares.

```
entrenamiento <- deudas[1:80, ]          # muestra de entrenamiento
prueba <- deudas[81:100, ]               # muestra de validación
```

{ para obtener una muestra aleatoria utilizaríamos:

```
    set.seed(123)                        # inicializa el arranque del generador aleatorio
    muestra <- sample(1:nrow(deudas), 80)  # muestra de 80 números entre 1 y 100
    entrenamiento <- deudas[muestra, ]   # muestra de entrenamiento
    prueba <- deudas[-muestra, ]         # muestra de validación
```

Hemos elegido una muestra o lista de 80 números al azar entre 1 y 100 (número de filas, nrow, del conjunto deudas). Si marcamos con el cursor "muestra" y ejecutamos podremos ver la lista de números obtenida. La muestra de entrenamiento –conjunto de datos "entrenamiento"- está formada por los 80 casos o filas del conjunto deudas correspondientes a esa lista, y el conjunto "prueba" por los 20 restantes. }

La orden set.seed se utiliza para fijar el arranque de la secuencia aleatoria, de forma que si repetimos la orden con el mismo número volveremos a obtener exactamente la misma muestra, lo que permite reproducir los resultados exactos. Sin embargo pueden obtenerse rmuestras y resultados distintos con equipos, sistemas operativos, o versiones de R diferentes, aunque los resultados serán en general similares.

Ahora utilizamos la función boosting, generando el objeto de resultados al que llamaremos "modelo", con los dos argumentos descritos anteriormente: la fórmula que

relaciona la variable dependiente con las variables predictoras, y el conjunto de datos utilizado "entrenamiento". El símbolo ~ que indica relación lineal se puede obtener en el teclado con AltGr + 4 seguido de un espacio. El método Adaboost es lento; debemos tener paciencia si el programa tarda uno o varios minutos –dependiendo de los datos y del ordenador- en completar todos los cálculos, y esperar hasta que aparezca en la ventana de salida la orden ejecutada (> modelo <- boosting ....).

modelo <- boosting(Impago ~ Edad + Formacion + Empleo + Residencia + Ingreso + Deud_ing + Deud_tarj + Deud_otr, data = entrenamiento)

Cuando las variables explicativas son todas, como en este ejemplo, existe una forma de abreviar la fórmula, sustituyendo el conjunto de predictores por un punto, que representa a todas las variables excepto la dependiente:

modelo <- boosting(Impago ~ ., data = entrenamiento)

El objeto creado "modelo" contiene todos los resultados. El algoritmo genera 100 reglas o clasificadores débiles con forma de árbol de decisión, que se pueden listar con:

modelo$trees

El último árbol, número 100, se muestra a continuación a título de ejemplo (el árbol 100 encontrado por los alumnos puede ser distinto, debido a los elementos aleatorios del inicio del algoritmo, aunque la interpretación de su significado es similar):

```
1) root 80 39 Si (0.48750000 0.51250000)
  2) Ingreso>=53 31  2 No (0.93548387 0.06451613) *
  3) Ingreso< 53 49 10 Si (0.20408163 0.79591837)
    6) Deud_tarj< 0.35 7  0 No (1.00000000 0.00000000) *
    7) Deud_tarj>=0.35 42  3 Si (0.07142857 0.92857143) *

1) root 80 32 No (0.60000000 0.40000000)
  2) Ingreso>=32 54 12 No (0.77777778 0.22222222)
    4) Deud_tarj< 6.17 45  3 No (0.93333333 0.06666667) *
    5) Deud_tarj>=6.17 9  0 Si (0.00000000 1.00000000) *
  3) Ingreso< 32 26  6 Si (0.23076923 0.76923077)
    6) Deud_tarj< 0.355 7  1 No (0.85714286 0.14285714) *
    7) Deud_tarj>=0.355 19  0 Si (0.00000000 1.00000000) *
```

Ese árbol tiene 7 nodos. El nodo raiz contiene los 80 casos del conjunto de entrenamiento; la función de pérdida (loss) para este nodo vale 32 (número de casos mal clasificados ponderados), con un 60,00% de acierto. El nodo 2 separa a los 54 clientes que tienen ingresos mayores o iguales que 32, entre los cuales solo hay 12 impagos, por lo que predice No impago (con probabilidad 0,777). El árbol predice impago (Si), con probabilidad 0,769, si los ingresos del cliente son inferiores a 32, y especialmente (con probabilidad 1) si además las deudas por tarjeta igualan o superan el valor 0,355.

La asignación final se realiza con las 100 reglas o clasificadores conjuntamente, ponderando cada una de ellas con el peso asignado al clasificador. Podemos ver las ponderaciones de los 100 clasificadores débiles con el elemento de resultado modelo$weights:

```
> modelo$weights
[1] 1.2561528 0.9899155 0.8929566 0.7621818 1.0661920 2.1970240 0.7933632
[8] 0.7957567 0.7552962 1.2618526 1.6829648 0.7484512 1.7536905 1.2596583
  ..................
```

La clase asignada a cada caso (impago si/no) se puede ver con el elemento modelo$class:

```
> modelo$class
 [1] "Si" "No" "No" "Si" "No" "No" "Si" "No" "No" "Si" "No" "No" "No" "No"
[15] "No" "Si" "No" "No" "No" "No" "Si" "No" "No" "No" "No" "Si" "No" "Si"
  ..................
```

La probabilidad de pertenencia a cada clase para cada caso del conjunto de datos –permite valorar la fiabilidad de la asignación- se puede ver con el elemento modelo$prob:

```
> modelo$prob
            [,1]        [,2]
 [1,] 0.18581894 0.814181060
 [2,] 0.99295593 0.007044072
 [3,] 0.97727717 0.022722828
 [4,] 0.01230334 0.987696657
 [5,] 0.81787235 0.182127649
    ..................
```

La columna [,1] corresponde a "Impago NO" y la siguiente a "Impago SI".
La importancia de cada variable en el proceso de asignación se puede ver con el elemento modelo$importance:

```
> modelo$importance
Deud_ing  Deud_otr  Deud_tarj    Edad     Empleo    Formacion Ingreso   Residencia
31.8136114 7.1780794 28.1677446  2.5911123  0.5015603  6.2900531 23.0274880  0.4303509
```

El estadístico de importancia está expresado en porcentaje (la suma es 100). Las variables Deud_ing (31,81%) y Deud_tarj (28,17%) son las que contribuyen en mayor medida a la clasificación.

Podemos utilizar el modelo para predecir la clase de cualquier elemento o caso con la función predict. Por ejemplo, aplicada a todos los elementos del conjunto "entrenamiento":

```
resultados.entrenamiento <- predict(modelo, newdata = entrenamiento, type = "class")
```

Los resultados de la predicción, en el objeto resultados.entrenamiento (que se pueden visualizar ejecutando el nombre del objeto), incluyen los votos ponderados "votes" de los predictores obtenidos en todas las iteraciones del algoritmo, la probabilidad "prob" de que cada caso pertenezca a una u otra clase, la clase "class" asignada en consecuencia (la más probable), y especialmente la matriz de "confusion" que cruza la clase real con la predicción en una tabla de doble entrada:

resultados.entrenamiento$confusion

```
                Observed Class
      Predicted Class No Si
                 No 55  0
                 Si  0 25
```

El 100% de los casos utilizados ha sido identificado correctamente.

Sin embargo nos queda la duda de si el método servirá para clasificar también correctamente elementos nuevos, no utilizados en el análisis. Para esto lo aplicamos a la muestra de prueba:

```
resultados.prueba <- predict(modelo, newdata = prueba, type = "class")
t <- resultados.prueba$confusion
t  ;  100 * sum(diag(t)) / sum(t)     #  calcula el porcentaje global de acierto
```

Le hemos llamado t a la matriz de confusión, para calcular a continuación el porcentaje de éxito, mediante la suma de los casos que están en la diagonal diag(t) dividida por la suma de todos los casos o elementos de la matriz sum(t).

```
                Observed Class
      Predicted Class No Si
                   No 13  0
                   Si  0  7
[1] 100
```

El porcentaje de acierto es el 100%; por lo tanto se confirma la capacidad del método para identificar con precisión el impago.

La asignación de cada cliente del banco a Impago SI/NO se realiza a la clase más probable. En la muestra ya sabemos si cada cliente ha tenido o no impagos; sin embargo el banco puede aplicar el modelo construido a los casos desconocidos (clientes nuevos, de los que no se sabe si han tenido impagos o no); para ello solo es necesario añadir los casos nuevos al conjunto (con la variable Impago = NA) y observar la probabilidad de impago con la variable prob del objeto de resultado, resultados.prueba$prob:

```
> resultados.prueba$prob
         [,1]        [,2]
 [1,] 0.10982305 0.89017695
 [2,] 0.90191372 0.09808628
 [3,] 0.52801599 0.47198401
 [4,] 0.90957958 0.09042042
 [5,] 0.11235137 0.88764863
      ……..
```

La probabilidad de impago es la que aparece en la última columna.

Como ahora sabemos que no hay problema de sobreajuste podemos mejorar el modelo utilizando los 100 casos, toda la información disponible, es decir el conjunto completo deudas en lugar de 80 casos (recordemos que quizás tarde un minuto):

```
modelo <- boosting(Impago ~ ., data = deudas)
resultados <- predict(modelo, newdata = deudas, type = "class")
t <- resultados$confusion
t ;  100 * sum(diag(t)) / sum(t)
```

```
                  Observed Class
      Predicted Class No Si
                    No 68  0
                    Si  0 32
[1] 100
```

El resultado es del 100% de acierto.

Random Forest

Random Forest o Bosque Aleatorio (Leo Breiman y Adele Cutler, 2001) consiste en una combinación de árboles de predicción. Se trata de una técnica de clasificación supervisada no paramétrica que busca segmentar el espacio de los predictores en regiones simples, definidas por intervalos de valores de los predictores o variables explicativas, dentro de las cuales la predicción es mucho más eficaz que en el espacio completo.

Un árbol de clasificación es fácil de interpretar, admite la representación gráfica, permite utilizar predictores cuantitativos –que deben ser categorizados- o cualitativos (o ambos combinados simultáneamente), y no requiere hipótesis restrictivas.

El árbol, representación gráfica de las reglas que permiten establecer la clasificación, está formado por nodos –internos y externos- y arcos que los unen. Los nodos externos –definido cada uno de ellos por una combinación concreta de valores de las variables explicativas- son las hojas del árbol, que agrupan elementos de un solo tipo (preferiblemente), o bien de varios tipos estableciendo una distribución de probabilidad sobre ellos, buscando siempre la mayor homogeneidad posible dentro de cada hoja, en la que debe haber en general un tipo claramente predominante.

Se utiliza el método de partición recursiva, que comienza buscando todos los valores distintos de cada predictor o variable explicativa, para encontrar la variable y el valor de corte que dividan los datos en dos partes de modo que se minimice la suma de cuadrados de los residuos, es decir la partición que permite explicar una mayor proporción de la variabilidad total de los datos. A continuación se hace lo mismo con cada uno de los dos grupos, buscando dentro de ellos la variable y punto de corte que permiten dividirlos a su vez en dos partes, y así sucesivamente hasta que ya no es posible la partición porque las clases obtenidas tienen un número inferior a un valor umbral prefijado.

Random Forest ajusta un número elevado de árboles, en lugar de uno solo, y toma como resultado la clase más frecuente, la decisión de la mayoría del bosque, en el conjunto de predicciones de todos los árboles individuales.

La función que utilizaremos con R para este método es randomForest, del paquete del mismo nombre, que es necesario instalar (la primera vez) y cargar en la sesión de R en la que va a ser utilizada. La sintaxis básica es:

randomForest(formula, data)

La fórmula expresa la variable de clasificación en función de los predictores, y el argumento opcional data sirve para indicar a que conjunto de datos pertenecen las variables que aparecen en ella. Se puede sustituir la fórmula por un conjunto de datos, en cuyo caso funciona como método de clasificación no supervisada, buscando en los datos una clasificación natural (como k–medias o EM). El número de árboles que forman el bosque es 500 por defecto, número considerado adecuado para la mayoría de las aplicaciones, aunque puede ser cambiado con el argumento opcional ntree.

En cada división del árbol elige las variables más adecuadas –buscando el mejor resultado- y su punto de corte, utilizando para ello un número de variables candidatas igual a la raíz cuadrada de m, el número de predictores.

Utilizaremos para el ejemplo los datos del archivo vinos.RData, con una muestra de 54 vinos monovarietales en los que se ha determinado la concentración de 6 ácidos orgánicos, con dos clases definidas por la variedad de uva utilizada en su elaboración.

```
setwd("C:/CURSO DM")

load("vinos.RData")     #  lee el conjunto "vinos"
library(randomForest)    #  carga el paquete randomForest
```

Dividimos el conjunto de datos en dos partes: una muestra de entrenamiento con los 40 primeros, con la que se construirá el modelo, y los 14 casos restantes que utilizaremos como muestra de validación o prueba:

```
entrenamiento <- vinos[1:40, ]
prueba <- vinos[41:54, ]
```

{Podríamos elegir aleatoriamente ambas submuestras:

```
set.seed(12345)
muestra <- sample(1:nrow(vinos), 40)      #  40 números de fila o caso elegidos al azar
entrenamiento <- vinos[muestra, ]
prueba <- vinos[-muestra, ]       }
```

A continuación construiremos el modelo con la función randomForest:

```
set.seed(12345)
modelo <- randomForest(var~ gal+tar+mal+shi+cit+suc, data=entrenamiento)
modelo
```

```
randomForest(formula = var ~ gal + tar + mal + shi + cit + suc,
    data = entrenamiento)

               Type of random forest: classification
                     Number of trees: 500
No. of variables tried at each split: 2

        OOB estimate of  error rate: 5%
Confusion matrix:
   A  G class.error
A 28  0           0
G  2 10           0.1666667
```

La orden set.seed previa sirve para que los resultados (los 500 árboles aleatorios) sean los mismos al repetir la ejecución.

Como se puede observar en la matriz de confusión –con los 40 casos de entrenamiento- predice correctamente el 95% de los casos (38 de los 40, tasa de error 5%).

Podemos ver la clase (variedad de uva) asignada a cada caso de la muestra de entrenamiento con el elemento de resultado modelo$predicted:

```
> modelo$predicted
 1  2  3  4  5  6  7  8  9 10 11 12 13 14 15 16 17 18 19 20
 G  A  G  G  G  G  G  G  A  A  A  A  A  A  A  A  A  A  A  A
21 22 23 24 25 26 27 28 29 30 31 32 33 34 35 36 37 38 39 40
 A  A  A  A  A  A  A  A  A  A  A  A  A  G  G  A  A  A  A  G
Levels: A G
```

La decisión de asignación se toma por mayoría, considerando la asignación –el voto- de los 500 árboles. La proporción de "votos" obtenida por las dos clases en cada uno de los casos del conjunto de datos, que es un indicador de la fiabilidad de la asignación, se puede ver con el elemento de resultado modelo$votes:

```
> round(modelo$votes, 3)

        A     G
1   0.250 0.750
2   0.777 0.223
3   0.198 0.802
4   0.239 0.761
.....................
```

El método calcula una medida de la importancia de cada variable explicativa en el proceso de clasificación, basada en el índice de Gini, que mide el grado de pureza o de homogeneidad de los nodos del árbol: un nodo es puro cuando solo tiene elementos de la misma clase; el nodo es más puro cuanto más pequeño es el valor del índice. La medida de importancia consiste en la reducción del índice de Gini debida a esa variable, por lo que las variables más importantes son las que consiguen reducción mayor. Se puede ver con el elemento de resultado modelo$importance:

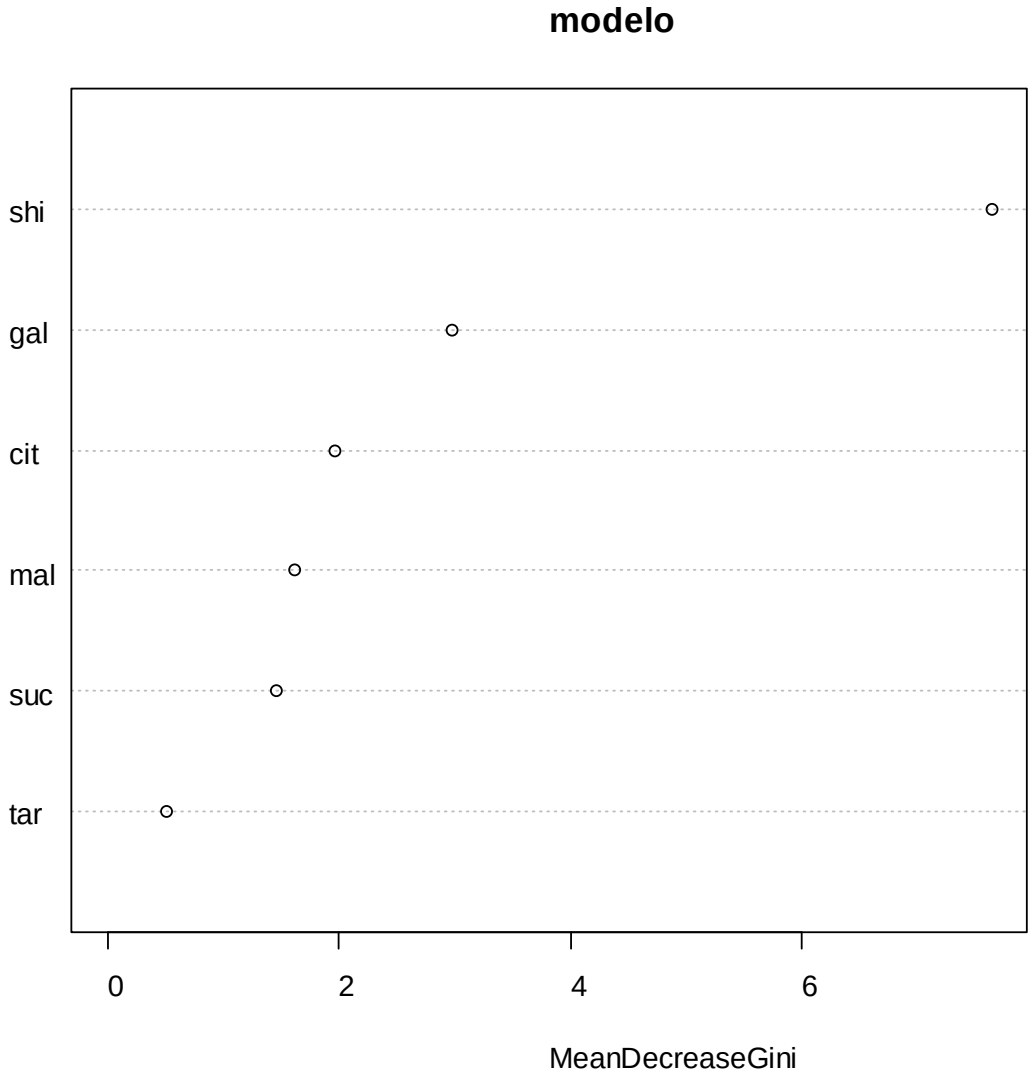
```
> modelo$importance

            MeanDecreaseGini
gal            2.9783823
tar            0.5116602
mal            1.6204204
shi            7.6412178
cit            1.9623099
suc            1.4545094
```

Las variables más importantes en la identificación de la variedad de uva son los ácidos shiquímico (7,641) y galacturónico (2,978).

Un gráfico realizado con la función varImpPlot, que presenta estos valores ordenados, ayuda a valorar la distinta importancia de las variables explicativas:

varImpPlot(modelo)



Veamos ahora la identificación de la variedad de uva para los casos que hemos mantenido al margen del modelo, con el fin de ser utilizados como validación, en el conjunto "prueba":

```
predicciones <- predict(modelo, prueba)
t <- with(prueba, table(predicciones, var))    # Matriz de confusión
t ;  100 * sum(diag(t)) / sum(t)
```

```
             var
predicciones A G
           A 7 0
           G 0 7
[1] 100
```

El acierto es total con la muestra de validación y por lo tanto podemos esperar que el modelo clasifique de forma razonablemente correcta las muestras nuevas, sin problema de sobreajuste. Esto nos permite mejorarlo utilizando toda la muestra para el entrenamiento:

```
# con toda la muestra

set.seed(12345)
modelo <- randomForest(var~ ., data=vinos)
predicciones <- predict(modelo, vinos)    #  con toda la muestra
t <- with(vinos, table(predicciones, var))    # Matriz de confusión
t  ;  100 * sum(diag(t)) / sum(t)
```

```
var
predicciones  A  G
           A 35  0
           G  0 19
[1] 100%
```

El porcentaje de éxito ahora es del 100%, todos los vinos son identificados correctamente.

Si queremos identificar la variedad de uva –desconocida- de casos nuevos solo tenemos que añadir esos casos al conjunto de datos, con var = NA, y aplicar la función predict como anteriormente: el objeto predicciones indicará la clase asignada a todos los casos, incluidos los nuevos.