Árboles de decisión

M4 - DCSSyHD

¿Qué son los árboles de decisión?

- Modelos de aprendizaje supervisado para la
  - regresión de variables numéricas
  - clasificación de variables categóricas
- Premisa básica: **dividir el espacio de predictores en segmentos más simples**
- Son fáciles de interpretar y simples, pero esto último también hace que tengan baja capacidad predictiva

Árbol de decisión intuitivo

Vamos a construir “a mano” el árbol de decisión para poder saber si podemos jugar o no al golf.

El set de entrenamiento es el de la tabla de la derecha.

Pronóstico	Temperatura	Humedad	Viento	Jugar
Soleado	Alta	Alta	Débil	No
Soleado	Alta	Alta	Fuerte	No
Nublado	Alta	Alta	Débil	Si
LLuvia	Media	Alta	Débil	Si
LLuvia	Baja	Normal	Débil	Si
LLuvia	Baja	Normal	Fuerte	No
Nublado	Baja	Normal	Fuerte	Si
Soleado	Media	Alta	Débil	No
Soleado	Baja	Normal	Débil	Si
LLuvia	Media	Normal	Débil	Si
Soleado	Media	Normal	Fuerte	Si
Nublado	Media	Alta	Fuerte	Si
Nublado	Alta	Normal	Débil	Si
LLuvia	Media	Alta	Fuerte	No

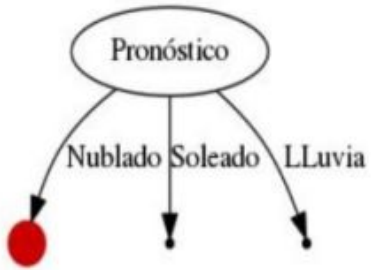
Árbol de decisión intuitivo

El modelo parte desde un nodo hoja inicial.

En primer lugar, deberíamos verificar si todos los registros pertenecen a la misma clase, ya que en ese caso deberíamos construir un nodo hoja con esa clase como etiqueta. Como no es el caso, particionamos por la variable Pronóstico.

Por cada partición creamos una arista (split) y un nodo hijo (internal node)

Ahora, **aplicamos recursivamente** el algoritmo. En primer lugar analizamos la **partición** correspondiente a **Pronóstico == “Nublado”**



Pronóstico	Temperatura	Humedad	Viento	Jugar
Nublado	Alta	Alta	Débil	Si
Nublado	Baja	Normal	Fuerte	Si
Nublado	Media	Alta	Fuerte	Si
Nublado	Alta	Normal	Débil	Si

Al analizar a qué clase de la variable que queremos predecir pertenecen los registros, vemos que **todos corresponden a “Sí”.** Por lo tanto, **este será un nodo terminal con la etiqueta “Sí”.**

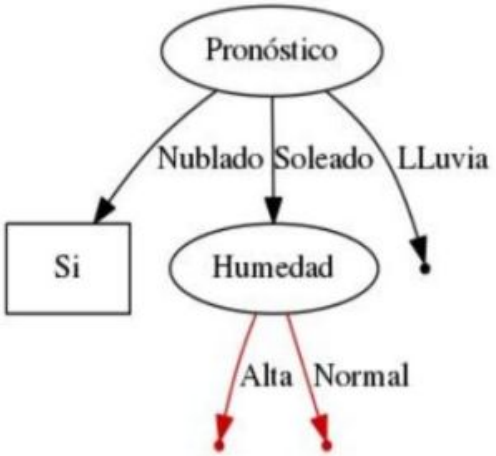
¿Qué pasa en la partición de **Pronóstico == “Soleado”**?

Pronóstico	Temperatura	Humedad	Viento	Jugar
Soleado	Alta	Alta	Débil	No
Soleado	Alta	Alta	Fuerte	No
Soleado	Media	Alta	Débil	No
Soleado	Baja	Normal	Débil	Si
Soleado	Media	Normal	Fuerte	Si

Los registros pertenecen a **distintas clases**, por lo que vamos a tener que hacer una **nueva partición**

¿Por qué variable lo hacemos (Temperatura, Humedad o Viento)?

Si vemos los datos, nos conviene **abrir el nodo por Humedad**. Ya que si fuese por Viento o Temperatura, deberíamos hacer una partición más.



Pronóstico	Temperatura	Humedad	Viento	Jugar
Soleado	Alta	Alta	Débil	No
Soleado	Alta	Alta	Fuerte	No
Soleado	Media	Alta	Débil	No
Soleado	Baja	Normal	Débil	Si
Soleado	Media	Normal	Fuerte	Si

Para la **sub-partición Humedad == “Alta”, tenemos que todos los casos dan “No”.**

Pronóstico	Temperatura	Humedad	Viento	Jugar
Soleado	Alta	Alta	Débil	No
Soleado	Alta	Alta	Fuerte	No
Soleado	Media	Alta	Débil	No

De manera que será un nodo terminal con la etiqueta “No”.

Para la **sub-partición Humedad == “Normal”, todos los casos dan “Sí”.**

Pronóstico	Temperatura	Humedad	Viento	Jugar
Soleado	Baja	Normal	Débil	Si
Soleado	Media	Normal	Fuerte	Si

Ahora solo resta analizar la partición correspondiente al **Pronóstico == “Lluvia”**

Pronóstico	Temperatura	Humedad	Viento	Jugar
LLuvia	Media	Alta	Débil	Si
LLuvia	Baja	Normal	Débil	Si
LLuvia	Baja	Normal	Fuerte	No
LLuvia	Media	Normal	Débil	Si
LLuvia	Media	Alta	Fuerte	No

De nuevo, como los registros pertenecen a **distintas clases**, vamos a tener que hacer una **nueva partición**

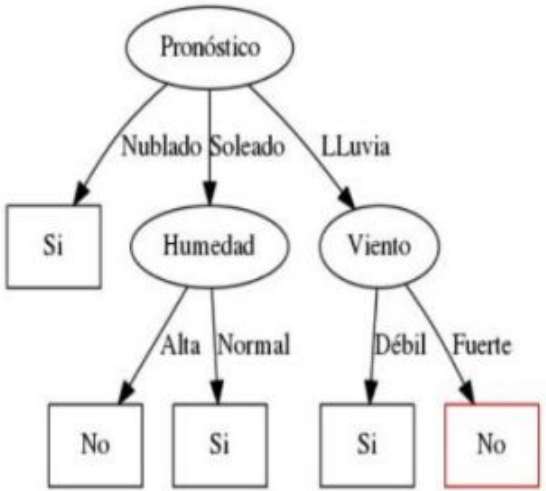
¿Por qué variable lo hacemos (Temperatura, Humedad o Viento)?

Siguiendo la lógica que veníamos trabajando, nos conviene usar como criterio de partición la variable **“Viento”**

Pronóstico	Temperatura	Humedad	Viento	Jugar
LLuvia	Media	Alta	Débil	Si
LLuvia	Baja	Normal	Débil	Si
LLuvia	Baja	Normal	Fuerte	No
LLuvia	Media	Normal	Débil	Si
LLuvia	Media	Alta	Fuerte	No

Hacemos las sub-particiones y definimos los dos nodos terminales según:

- Si el viento es débil → Sí
- Si el viento es fuerte → No



En base a lo aprendido en clases anteriores, **¿qué tipo de árbol de decisión era este?**

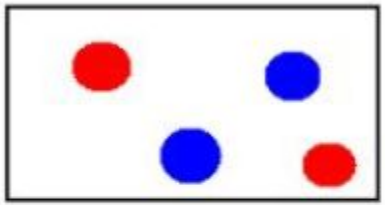
¿Un árbol de **regresión** o de **clasificación**?

Árboles de clasificación

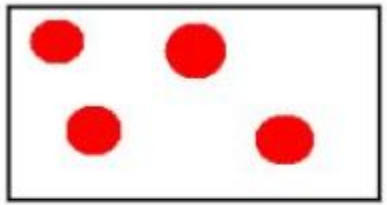
- Se predice que cada observación pertenezca a la clase que tiene la moda en las observaciones del set de entrenamiento.
- El problema fundamental aquí es: **¿Cómo elegir entre las particiones candidatas?**
  - Tenemos splits binarios
  - Splits pluricotómicos
  - Variables cuantitativas
  - Variables cualitativas
  - …

Ganancia / Pérdida de impureza

- **¿Cómo se elige entre particiones candidatas?**
  - Medidas de impureza del nodo → queremos que el nodo que separó la clasificación tenga impureza mínima



Impureza Máxima



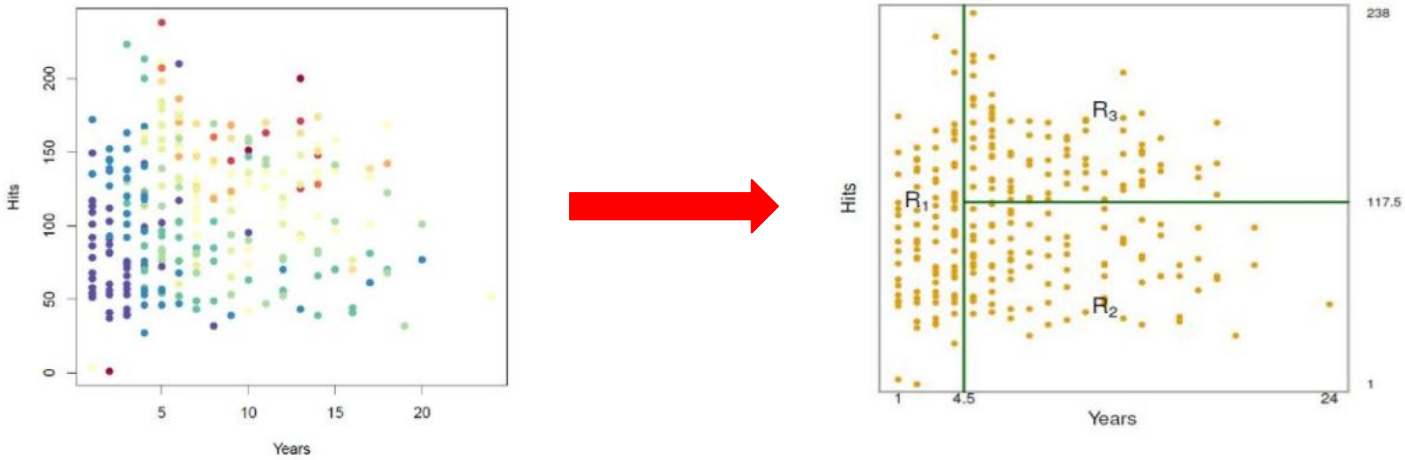
Impureza Mínima

Ganancia / Pérdida de impureza

- **¿Cómo se elige entre particiones candidatas?**
  - Medidas de impureza del nodo → lo medimos con **funciones de pérdida**
    - **Classification error rate** → fracción de las observaciones del set de entrenamiento que no pertenecen a la clase con más ocurrencias
    - **Índice de Gini / Pureza de los nodos**→ un valor bajo indica que el nodo contiene de manera predominante observaciones de una única clase
    - **Entropía** → un valor bajo indica que el nodo contiene de manera predominante observaciones de una única clase

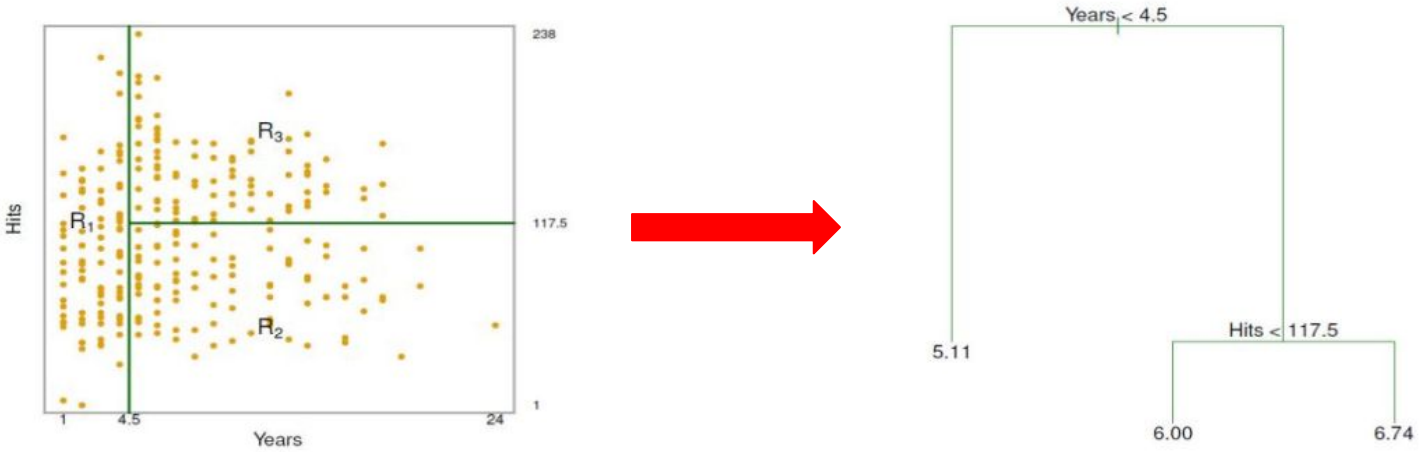
Árboles de regresión

- Funcionan de manera parecida a los árboles de clasificación
- *Peeero* acá no trabajamos con moda, si no con media y lo que hacemos es partir espacio predictor (es decir, los posibles valores de x) en una cantidad determinada de regiones (R1, R2, R3 (...))



Árboles de regresión

- Para cada observación que cae en Rj, hacemos la misma predicción, lo que quiere decir que hacemos la media de valores predichos para las observaciones del training set en Rj



¿Cómo se construyen las regiones?

- En teoría las regiones R1,...,RJ podrían tener cualquier forma.
- Elegimos dividir el espacio de predictores en rectángulos o cajas en varias dimensiones por simplicidad y facilidad de interpretación del modelo predictivo resultante. El objetivo es encontrar cajas R1,...,RJ que minimizan la suma de residuos al cuadrado (RSS) dada por

$$\sum_{j=1}^{J} \sum_{i \in R_j} (y_i - \hat{y}_{R_j})^2,$$

¿Cómo se construyen las regiones?

- Problema: no es factible computacionalmente considerar todas las posibles particiones del espacio de atributos en J cajas.
- Enfoque de arriba hacia abajo “greedy” que es conocido como recursive binary splitting.
- **Recursive binary splitting** comienza en la parte de arriba del árbol (donde todas las observaciones pertenecen a una sola región) y sucesivamente particiona el espacio de predictores.
- **Greedy** porque en cada paso de la construcción del árbol se busca la mejor división en ese punto en particular (**óptimo local**) en lugar de mirar hacia adelante y elegir una división que llevaría a un mejor árbol en un paso futuro.

Overfit

- En general, un árbol de decisión muy complejo que optimice las métricas puede terminar en sobreajuste (por ejemplo: una división con un solo resultado por registro).
  - Restringir el algoritmo a únicamente divisiones binarias (CART).
  - Utilizar un criterio de división que penalice explícitamente el número de resultados

Overfit

- Divisiones que penalicen explícitamente el número de resultados
  - **Prepoda:** establecer un umbral mínimo en la ganancia, y detenerse cuando ninguna división logra una ganancia por encima de este umbral. Esto evita el sobreajuste, pero es difícil de calibrar en la práctica
  - **Post-poda:** construir el árbol completo, y luego realizar una poda. Examinamos los nodos desde abajo hacia arriba y simplificamos las ramas del árbol (de acuerdo con algunos criterios).
    - Los subárboles complicados pueden ser reemplazados con un solo nodo o con un subárbol más simple (secundario).

¿Cómo se elige el nivel de complejidad?

- Tenemos que ver las diferencias entre las métricas de train y test con **cross-validation**
  - Cantidad de particiones
  - De nodos terminales
  - Umbral para la métrica de impureza
- Vamos a ver esto en la parte práctica, con R y tidymodels

¿Cuáles son los pros y contras de los árboles?

Pros

- Son muy interpretables y fáciles de explicar
- Podemos manejar variables cualitativas sin tener que hacer variables dummy (0/1)

Contras

- No tienen muy buena capacidad predictiva
- Son poco robustos. Esto quiere decir que un cambio muy pequeño en los datos de entrenamiento, puede cambiar radicalmente el modelo final