Machine Learning 101

Bagging y Random Forest

Felipe Alonso Atienza

Data Scientist @BBVA

Motivación

- Combinar algoritmos, normalmente árboles, para mejorar sus prestaciones

- Proporcionan grandes prestaciones en problemas complejos

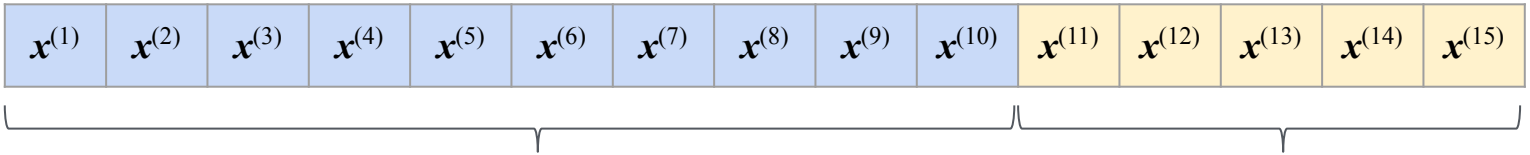
Índice

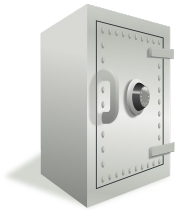
1. **Remuestreo Bootstrap**
2. Bagging
3. Random Forest
4. Importancia variables

Remuestreo Bootstrap

- Técnica estadística para cuantificar la incertidumbre de un estimador
  - En ML nos sirve para **medir las prestaciones de un algoritmo**

- Supongamos un problema de aprendizaje supervisado, donde disponemos de un conjunto de datos etiquetados $\{\boldsymbol{X}, y\}$, con $\mathrm{N} = 15$.

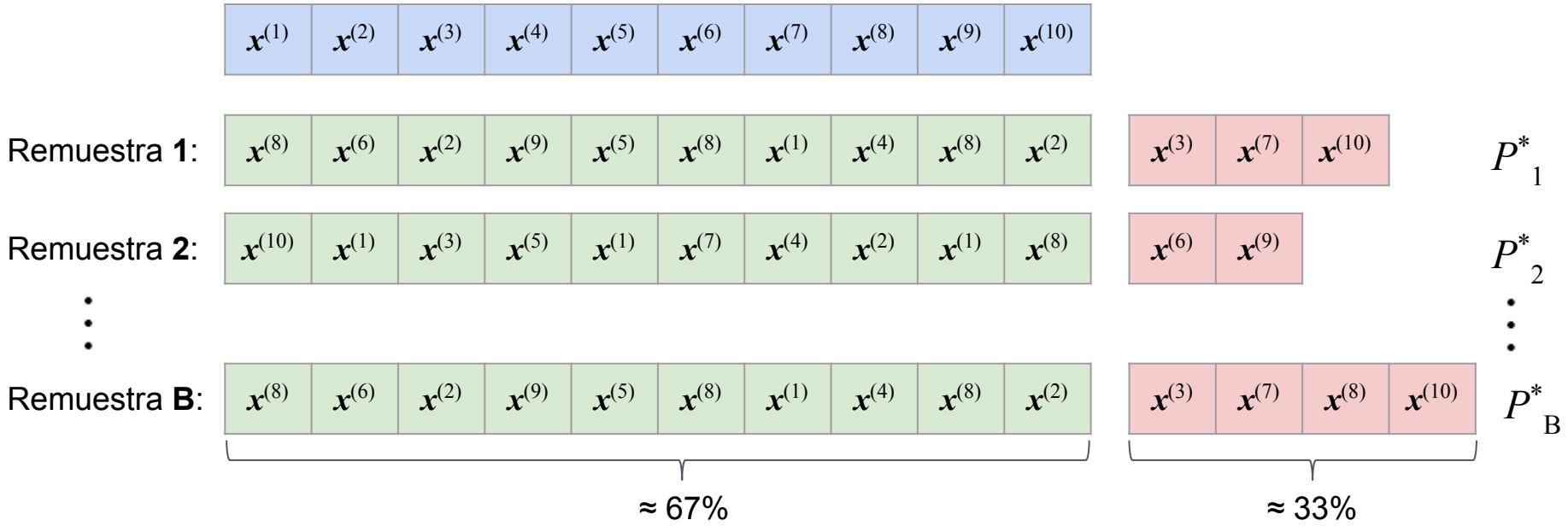




(*) numeración no es orden, los datos han sido ya aleatorizados

Remuestreo Bootstrap

- Bootstrap: remuestras con repetición



P^*_b: Prestaciones remuestra b

Out-of-bag performance estimation

- Out-of-bag, remuestra b: P_b^*
- Prestaciones totales

$$OOB = \frac{1}{B}\sum_{b=1}^{B} P_b^*$$

- Normalmente B = 200-500
- Al promediar reducimos la varianza del estimador (es similar cross-validation)

Índice

1. Remuestreo Bootstrap
2. **Bagging**
3. Random Forest
4. Importancia variables

Bagging: Bootstrap AGGregation

- Motivación: **reducir varianza** de los árboles de decisión (en función de la división los resultados pueden ser muy distintos)
- Utilizar *bootstrap* para **combinar árboles de decisión**:
  - Se construyen (entrenan) B árboles utilizando B remuestras

$x^{(8)}$	$x^{(6)}$	$x^{(2)}$	$x^{(9)}$	$x^{(5)}$	$x^{(8)}$	$x^{(1)}$	$x^{(4)}$	$x^{(8)}$	$x^{(2)}$

$x^{(8)}$	$x^{(6)}$	$x^{(2)}$	$x^{(9)}$	$x^{(5)}$	$x^{(8)}$	$x^{(1)}$	$x^{(4)}$	$x^{(8)}$	$x^{(2)}$

  - Se combina la salida para predecir una nueva muestra: $\mathbf{x}^{(new)}$

Bagging

- Se combina la salida para predecir una nueva muestra: $\mathbf{x}^{(new)}$
  - Regresión: $\hat{y} = \frac{1}{B}\sum_{b=1}^{B} f^*_{b,TREE}(\mathbf{x}^{(new)})$
  - Clasificación: *majority vote* $\hat{y} = \max_{k=1,\ldots,K}\left\{\sum_{b=1}^{B} f^*_{b,TREE}(\mathbf{x}^{(new)})\right\}$
- Se estiman las prestaciones mediante Out-Of-Bag

Bagging: pros and cons

- OK
  - mejoran las prestaciones sustancialmente

- KO
  - Si hay uno o varios predictores fuertes, puede que los B árboles generados sean bastante similares, por lo que no estamos reduciendo la varianza dado que los árboles están altamente correlacionados

Índice

1. Remuestreo Bootstrap
2. Bagging
3. **Random Forest**
4. Importancia variables

Random forest

- Motivación: **decorrelacionar** árboles remuestrados

- Utilizar *bootstrap* para **combinar árboles de decisión**:
  - Se construyen (entrenan) B árboles utilizando B remuestras
  - En la construcción de cada árbol, para cada *split* se fuerza a utilizar un subconjunto aleatorio de $m < d$ predictores

- Normalmente $m = \sqrt{d}$
- Si $m = d$, entonces es Bagging
- Si el número de predictores relevantes es pequeño, y alta dimensionalidad, peligro de *overfitting*

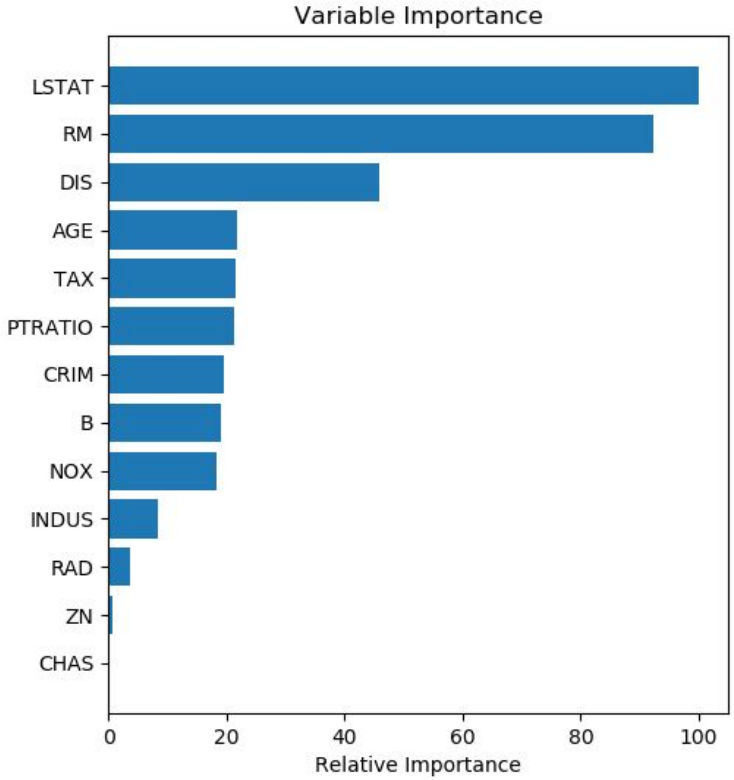
Índice

1. Remuestreo Bootstrap
2. Bagging
3. Random Forest
4. **Importancia variables**

Importancia de las variables

- Con la agregación de árboles se pierde interpretabilidad
- No obstante se puede extraer una **medida de la importancia** de cada variable
  - Cuánto mejoran las prestaciones en los *splits* asociados a dicha variable (*ESL, página 368*)
  - En otras palabras: para cada split de cada árbol construido, se mide la mejora en prestaciones debido a la variable por la que se particiona el árbol.
- Medida relativa: se escala entre 0-100
- Puede aplicarse a un árbol individual, pero no es concluyente
- Se puede utilizar como ranking en selección de características, ¡pero hay que hacerlo bien! (wrapper)

Importancia de las variables



Referencias

- Introduction to Statistical Learning
  - Capítulo 5, sección 2
  - Capítulo 8, sección 2

- The Elements of Statistical Learning
  - Capítulo 10, sección 13
  - Capítulo 15

Hora de practicar