



Machine Learning 101

Árboles de decisión



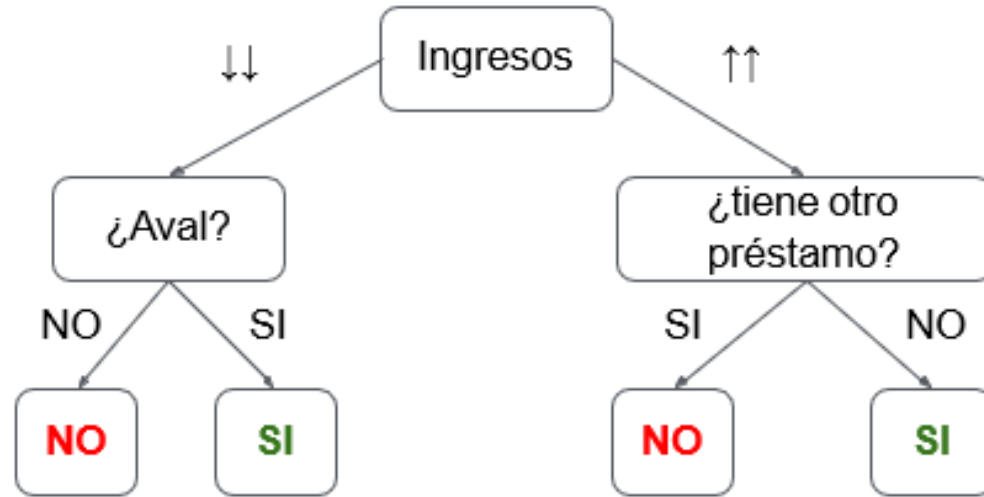
Índice

1. **Intuición**
2. Construcción del árbol
3. Conclusiones



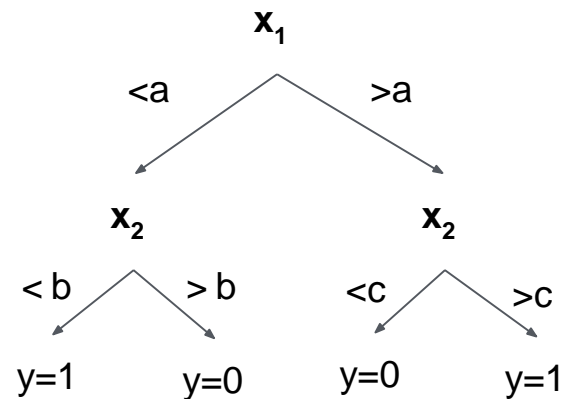
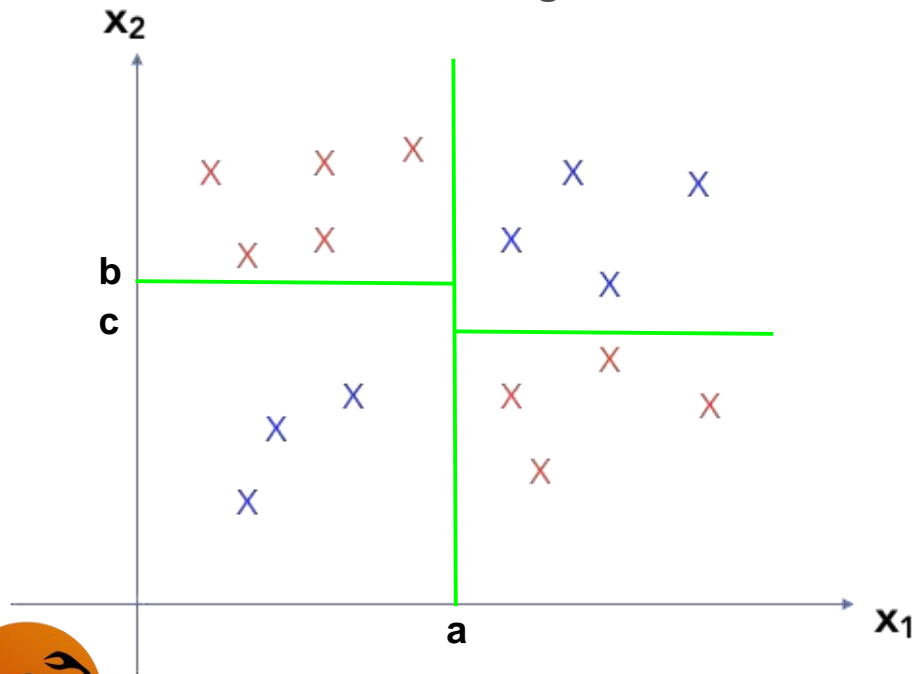
Intuición

- Supongamos el problema de clasificación: concesión de un préstamo

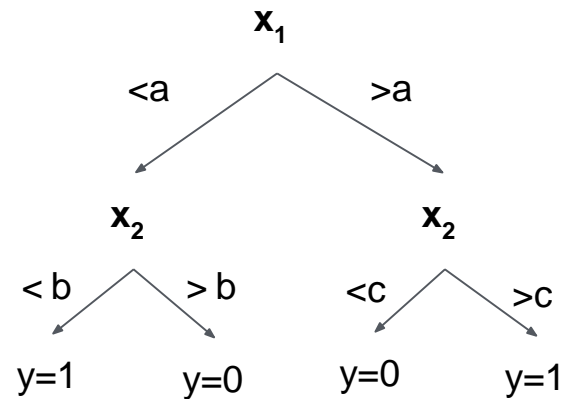
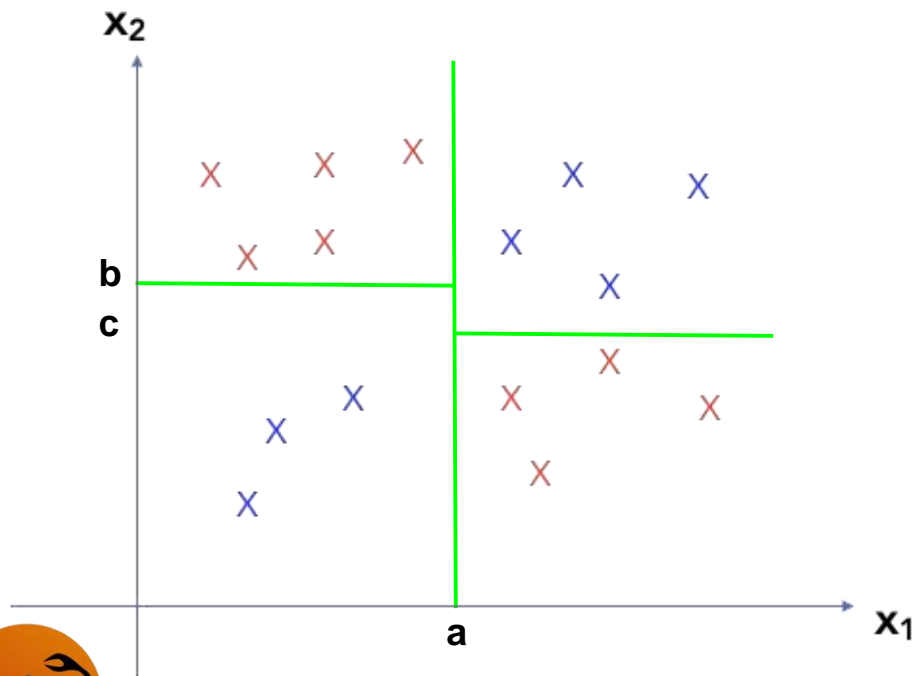


Intuición

- ¿Cómo trasladamos este proceso a datos? Segmentando el espacio de características en regiones sencillas



Nomenclatura



- Hojas: región $y=1$
- Nodos intermedios: x_2
- Ramas: $<a$



■ Predicción

- Una vez segmentado el espacio de características, para cada nueva observación que cae en alguna de las regiones se predice:
 - Clasificación: moda de etiquetas (majority vote)
 - Regresión: media de etiquetas
- NOTA: Existen distintos algoritmos para implementar árboles de decisión: [ID3](#), [C4.5](#), [CART](#)... scikit-learn utiliza CART, que solo permite decisiones binarias (cada nodo tiene dos ramas).





Índice

1. Intuición
2. **Construcción del árbol**
3. Conclusiones



■ Construcción del árbol

1. Empezamos con el árbol vacío
2. Seleccionamos la característica sobre la que particionar el espacio (*splitting*)
 - a. Regresión: minimizar error cuadrático medio (MSE)
 - b. Clasificación:
 - i. Mínimo error de clasificación
 - ii. Mínima impureza
 - iii. Máxima entropía
3. Para cada región resultante repetimos el proceso (recursive splitting), hasta que se cumpla un criterio de parada:
 - a. Todas las muestras con única variable target (y)
 - b. Complejidad:
 - i. Profundidad
 - ii. Número de muestras en hoja
 - iii. Mejora en el criterio de splitting

<https://scikit-learn.org/stable/modules/tree.html#tips-on-practical-use>



■ Métricas clasificación

Sea un problema de clasificación con K categorías. En el nodo m se define p_{km} como la proporción de observaciones de entrenamiento en dicho nodo para la clase k .

- Error de clasificación: $E(X_m) = 1 - \max\{p_{km}\}$
- Índice Gini: $G(X_m) = \sum p_{km}(1 - p_{km}) = 1 - \sum (p_{km})^2$
- Entropía: $D(X_m) = -\sum p_{km}(\log(p_{km}))$

Donde X_m son los datos de entrenamiento en el nodo m .



■ Ejemplo sencillo

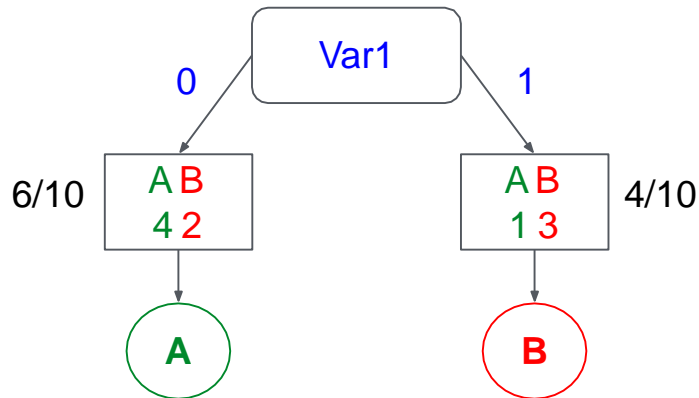
- ¿Por qué variable particionamos el árbol?
- Dos hipótesis:
 - $\text{Var1} == 1$
 - $\text{Var2} \geq 32$

Label	Var1	Var2
A	0	33
A	0	54
A	0	56
A	0	42
A	1	50
B	1	55
B	1	31
B	0	-4
B	1	77
B	0	49



<http://www.learnbymarketing.com/481/decision-tree-flavors-gini-info-gain/>

■ Ejemplo sencillo



$$G_{\text{LEFT}} = 1 - \left[\left(\frac{4}{6} \right)^2 + \left(\frac{2}{6} \right)^2 \right] = 0.444$$

$$G_{\text{RIGHT}} = 1 - \left[\left(\frac{1}{4} \right)^2 + \left(\frac{3}{4} \right)^2 \right] = 0.375$$

$$E_{\text{LEFT}} = 1 - \max\{4/6, 2/6\} = 2/6 = 1/3$$

$$E_{\text{RIGHT}} = 1 - \max\{1/4, 3/4\} = 1/4$$

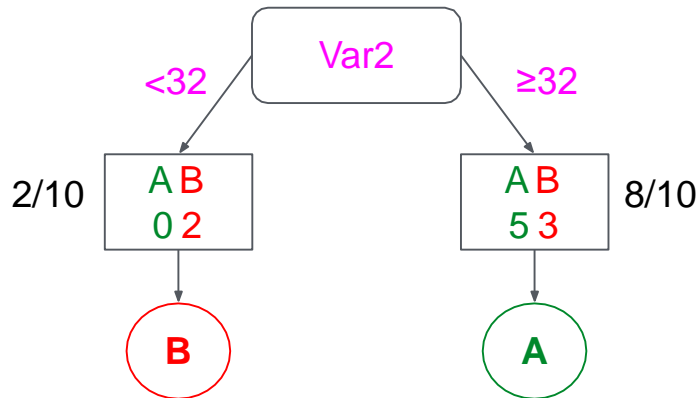
$$G_{\text{TOTAL}} = 6/10 \cdot 0.44 + 4/10 \cdot 0.375 = \mathbf{0.41667}$$

$$E_{\text{TOTAL}} = 6/10 \cdot 1/3 + 4/10 \cdot 1/4 = 3/10 = \mathbf{0.3}$$

Label	Var1	Var2
A	0	33
A	0	54
A	0	56
A	0	42
A	1	50
B	1	55
B	1	31
B	0	-4
B	1	77
B	0	49



Ejemplo sencillo



$$G_{\text{LEFT}} = 1 - \left[\left(\frac{0}{2} \right)^2 + \left(\frac{2}{2} \right)^2 \right] = 0$$

$$G_{\text{RIGHT}} = 1 - \left[\left(\frac{5}{8} \right)^2 + \left(\frac{3}{8} \right)^2 \right] = 0.469$$

$$E_{\text{LEFT}} = 1 - \max\{0/2, 2/2\} = 0$$

$$E_{\text{RIGHT}} = 1 - \max\{5/8, 3/8\} = 3/8$$

$$G_{\text{TOTAL}} = 2/10 \cdot 0 + 8/10 \cdot 0.469 = \mathbf{0.375}$$

$$E_{\text{TOTAL}} = 2/10 \cdot 0 + 8/10 \cdot 3/8 = 3/10 = \mathbf{0.3}$$

Label	Var1	Var2
A	0	33
A	0	54
A	0	56
A	0	42
A	1	50
B	1	55
B	1	31
B	0	-4
B	1	77
B	0	49



■ Ejemplo sencillo: resultado

- ¿Por qué variable particionamos el árbol?
- Dos hipótesis:
 - $\text{Var1} == 1$
 - $\text{Var2} \geq 32$
- De este modo continuaríamos construyendo el árbol hasta cumplir criterio de parada

Label	Var1	Var2
A	0	33
A	0	54
A	0	56
A	0	42
A	1	50
B	1	55
B	1	31
B	0	-4
B	1	77
B	0	49



<http://www.learnbymarketing.com/481/decision-tree-flavors-gini-info-gain/>

■ Gini vs Error clasificación

- Preferible Gini (medida de pureza, ejemplo anterior)
- Valores pequeños significan que un nodo contiene predominantemente muestras de una única clase
- Entropía es similar a Gini.





Índice

1. Intuición
2. Construcción del árbol
3. **Conclusiones**

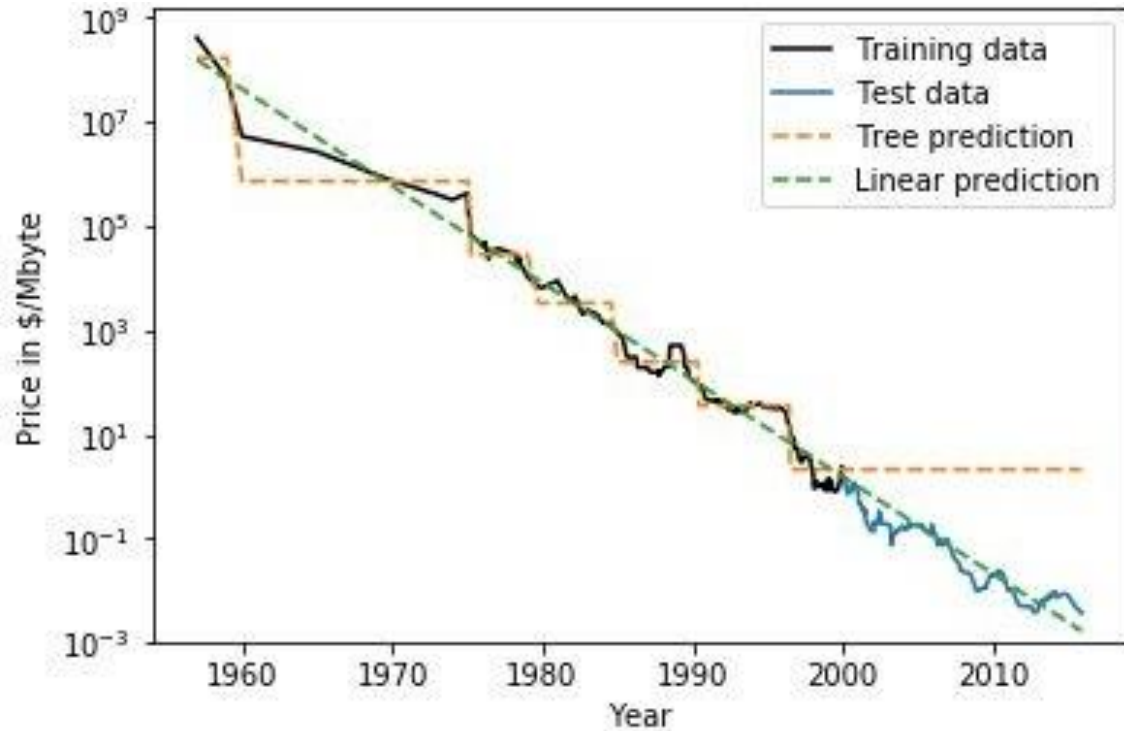


■ Conclusiones

- Sencillos e interpretables
- Clasificación binaria o multiclase
- Variables numéricas y categóricas
- No necesidad de normalización
- Estimación de la probabilidad
- Útiles cuando se utilizan en combinación
 - Random Forest
 - Boosted Trees
- Cuando hay muchas variables, riesgo de overfitting: control de la complejidad
- Prestaciones peores que las de otros algoritmos
- No miran al futuro



■ Sobre series temporales



■ Sobre estimación de la probabilidad

- Se calcula como % de la clase mayoritaria en una hoja: $P(y=k|x)$
- Si el árbol no se poda, $P(y=k|x) = 1!$
 - No hay métodos de poda en sklearn
 - Es necesario, por tanto, controlar la complejidad



■ Referencias

- Introduction to Statistical Learning
 - Capítulo 8
- Hands On Machine Learning.
 - Capítulo 6



Let's code!

