Lecture 8: Machine Learning
Árboles y Bosques

Big Data and Machine Learning en el Mercado Inmobiliario
Educación Continua

Ignacio Sarmiento-Barbieri

Universidad de los Andes

October 28, 2022

Agenda

1 Recap: Regularización

2 Árboles

3 Bagging and Random Forests

4 Break

Recap: Regularization

- Para $\lambda \geq 0$ dado, consideremos el siguiente problema de optimización
- Lasso:

$$min_{\beta} E(\beta) = \sum_{i=1}^{n} (y_i - \beta_0 - x_{i1}\beta_1 - \cdots - x_{ip}\beta_p)^2 + \lambda \sum_{j=1}^{p} |\beta_j| \tag{1}$$

- Ridge:

$$min_{\beta} E(\beta) = \sum_{i=1}^{n} (y_i - \beta_0 - x_{i1}\beta_1 - \cdots - x_{ip}\beta_p)^2 + \lambda \sum_{j=1}^{p} (\beta_j)^2 \tag{2}$$

Recap: Regularization

- Elastic Net es un happy medium

$$min_{\beta}EL(\beta) = \sum_{i=1}^{n}(y_i - \beta_0 - \sum_{j=1}^{p} x_{ij}\beta_j)^2 + \alpha\lambda\sum_{j=1}^{p}|\beta_j| + (1-\alpha)\lambda\sum_{j=1}^{p}(\beta_j)^2 \quad (3)$$

- Si $\alpha = 1$ Lasso
- Si $\alpha = 0$ Rigdge
- Como elegir (α, λ)? $\rightarrow$ Crossvalidation Bidimensional

Más allá de la linealidad

- El objetivo es predecir Y dadas otras variables X. Ej: precio vivienda dadas las características

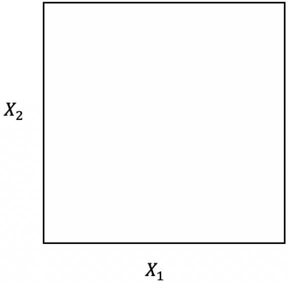
- Asumimos que el link entre Y and X esta dado por el modelo:

$$Y = f(X) + u \tag{4}$$

- Hasta ahora vimos modelos lineables o linealizables.
  - Regresión lineal, lasso, ridge, elastic net
- Árboles (CARTs)
  - Modelo flexible e interpretable para la relación entre Y y X.
  - Para que? No-linealidades, interacciones.

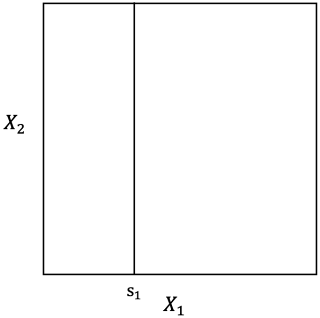
Árboles: que hacen?

1. Y es la variable a predecir, los insumos son X_1 y X_2
2. Partimos el espacio (X_1, X_2) en dos regiones, en base a una sola variable (particion horizontal o vertical).



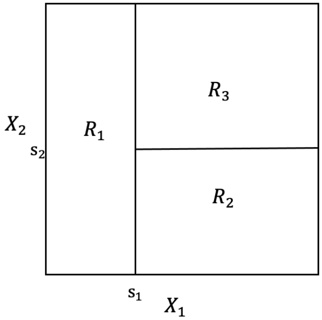
Árboles: que hacen?

1. Y es la variable a predecir, los insumos son X_1 y X_2
2. Partimos el espacio (X_1, X_2) en dos regiones, en base a una sola variable .
3. Dentro de cada región proponemos como predicción la media muestral de Y en cada región.
4. Punto: elegir la variable y el punto de partición de manera optima (mejor ajuste global).



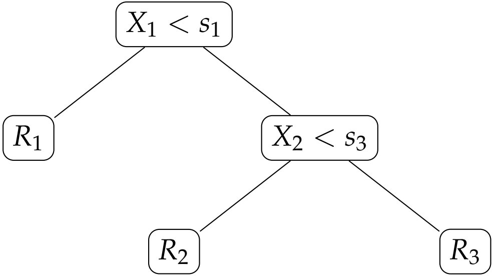
Árboles: que hacen?

1. Y es la variable a predecir, los insumos son X_1 y X_2
2. Partimos el espacio (X_1, X_2) en dos regiones, en base a una sola variable .
3. Dentro de cada región proponemos como predicción la media muestral de Y en cada región.
4. Punto: elegir la variable y el punto de partición de manera optima (mejor ajuste global).

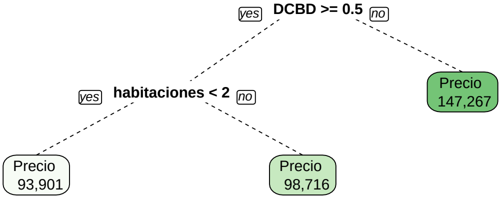


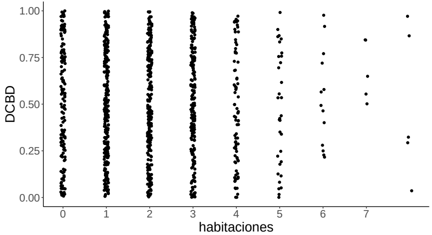
Árboles: que hacen?

1. Y es la variable a predecir, los insumos son X_1 y X_2
2. Partimos el espacio (X_1, X_2) en dos regiones, en base a una sola variable (partición horizontal o vertical).
3. Dentro de cada región proponemos como predicción la media muestral de Y en cada región.
4. Punto: elegir la variable y el punto de partición de manera optima (mejor ajuste global).
5. Continuamos partiendo



Árboles: que hacen?





Árboles: cómo lo hacen?

- Tenemos datos $y_{n\times 1}$ (precio) y $X_{n\times p}$ (características)
- Definiciones
  - j es la variable que parte el espacio y s es el punto de partición
  - Defina los siguientes semiplanos

$$R_1(j,s) = \{X|X_j \leq s\} \;\&\; R_2(j,s) = \{X|X_j > s\} \tag{5}$$

  - El problema se reduce a buscar la variable de partición X_j y el punto s de forma tal que

$$\min_{j,s}\left[\min_{c_1}\sum_{x_i\in R_1(j,s)}(y-c_1)^2 + \min_{c_2}\sum_{x_i\in R_2(j,s)}(y-c_2)^2\right] \tag{6}$$

Árboles: cómo lo hacen?

- Para cada variable y punto, la minimización interna es la media

$$\hat{c}_m = \frac{1}{n_m} \sum (y_i | x_i \in R_m) \tag{7}$$

- El proceso se repite para todas las regiones

Árboles: cómo lo hacen?

- Para cada variable y punto, la minimización interna es la media

$$\hat{c}_m = \frac{1}{n_m} \sum (y_i | x_i \in R_m) \tag{7}$$

- El proceso se repite para todas las regiones
- El árbol final tiene M regiones

$$\hat{f}(x) = \sum_{m=1}^{M} \hat{c}_m I(x \in R_m) \tag{8}$$

Árboles: cómo lo hacen?

- El árbol creció, como lo paramos?
- Si el árbol es muy grade, tenemos overfit
- Un árbol mas chico, puede tener menos regiones. Esto puede llevar a una varianza menor y mejor interpretación al costo de un poco sesgo.
- Solución: *Cost complexity pruning (cortar las ramas mas débiles)*

$$C_\lambda(T) = \sum_{m=1}^{[T]} n_m Q_m(T) + \lambda[T] \tag{9}$$

  - donde $Q_m(T) = \frac{1}{n_m}\sum_{x_i \in R_m}(y_i - \hat{c}_m)^2$ para los árboles de regresión
  - $Q_m(T)$ penaliza la heterogeneidad dentro de la regresión y el número de regiones
  - Objetivo: para un dado λ, encontrar el pruning óptimo que minimice $C_\lambda(T)$

Ventajas y Desventajas de los Árboles

- Pros:
  - Los árboles son muy fáciles de explicar a las personas (probablemente incluso más fáciles que la regresión lineal)
  - Los árboles se pueden trazar gráficamente y son fácilmente interpretados incluso por no expertos. Variables más importantes en la parte superior
  - Funcionan bien en problemas de clasificación y regresión.
- Cons:
  - Los árboles no son muy precisos o robustos (ensamblados, bosques aleatorios y boosting al rescate)
  - Si la estructura es lineal, CART no funciona bien

Bagging

- Problema con CART: varianza alta.
- Podemos mejorar mucho el rendimiento mediante la agregación
- Bagging:
  - Obtenga repetidamente muestras aleatorias $(X_i^b, Y_i^b)_{i=1}^N$ de la muestra observada.
  - Para cada muestra aleatoria, ajuste un árbol de regresión $\hat{f}^b(x)$
  - Promedie las muestras de bootstrap

$$\hat{f}_{bag} = \frac{1}{B}\sum_{b=1}^{B}\hat{f}^b(x) \tag{10}$$

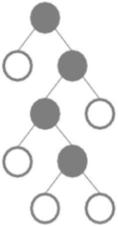
- Básicamente estamos suavizando las predicciones.
- Idea: la varianza del promedio es menor que la de una sola predicción.

Random Forests

- Problema con el bagging: si hay un predictor fuerte, diferentes árboles son muy similares entre sí. Si hay alta correlación, ¿está realmente reduciendo la varianza?
- Bosques (forests): reduzca la correlación entre los árboles en el boostrap.
- Si hay p predictores, en cada partición use solo $m < p$ predictores, elegidos al azar.
- Bagging es forests con $m = p$ (usando todo los predictores en cada partición).
- Tipicamente $m = \sqrt(p)$

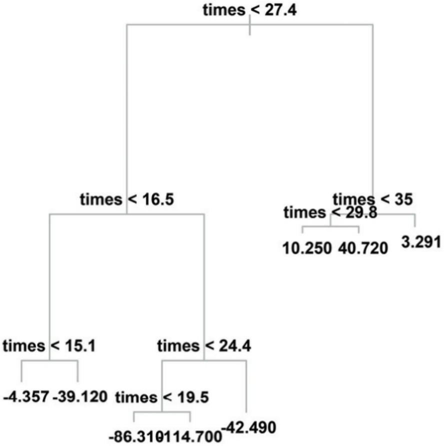
Random Forests

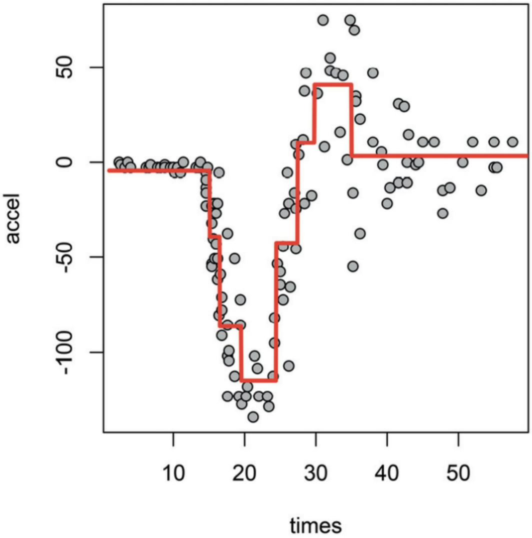
Trees:



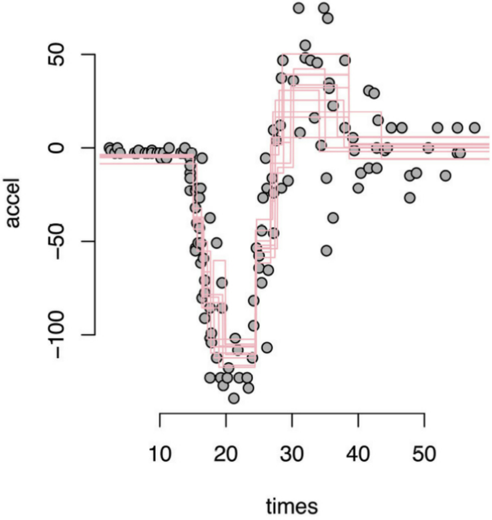
Random Forests:

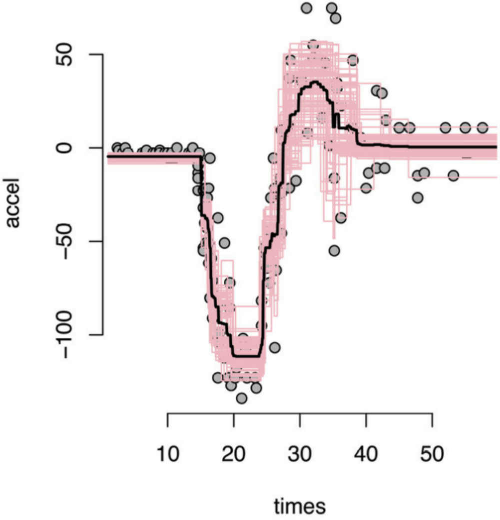
Random Forests



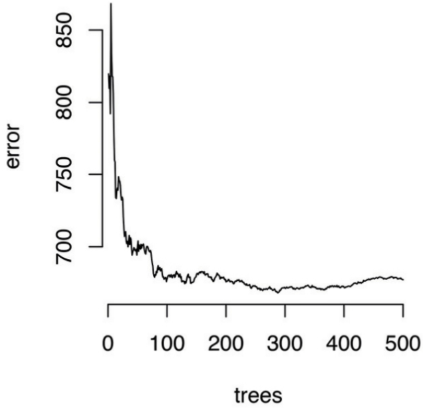


Random Forests





Random Forests



Break