## Clase 5: Árboles de Decisión

Matías Leoni

**Aprendizaje Automático I** *Maestría en IA - Universidad de San Andrés* 

15 de Julio de 2025

• 1. Concepto y Estructura: ¿Qué son y cómo se organizan?

- 1. Concepto y Estructura: ¿Qué son y cómo se organizan?
- 2. Construcción y Criterios de División:
  - Regresión: Suma de Errores Cuadráticos (RSS).
  - Clasificación: Gini, Entropía y la Ganancia de Información.

- 1. Concepto y Estructura: ¿Qué son y cómo se organizan?
- 2. Construcción y Criterios de División:
  - Regresión: Suma de Errores Cuadráticos (RSS).
  - Clasificación: Gini, Entropía y la Ganancia de Información.
- 3. Poda de Árboles: La técnica clave contra el sobreajuste.

- 1. Concepto y Estructura: ¿Qué son y cómo se organizan?
- 2. Construcción y Criterios de División:
  - Regresión: Suma de Errores Cuadráticos (RSS).
  - Clasificación: Gini, Entropía y la Ganancia de Información.
- 3. Poda de Árboles: La técnica clave contra el sobreajuste.
- 4. Interpretación y Visualización: Extrayendo valor.

- 1. Concepto y Estructura: ¿Qué son y cómo se organizan?
- 2. Construcción y Criterios de División:
  - Regresión: Suma de Errores Cuadráticos (RSS).
  - Clasificación: Gini, Entropía y la Ganancia de Información.
- 3. Poda de Árboles: La técnica clave contra el sobreajuste.
- 4. Interpretación y Visualización: Extrayendo valor.
- 5. Ventajas y Desventajas: ¿Cuándo usarlos?

- 1. Concepto y Estructura: ¿Qué son y cómo se organizan?
- 2. Construcción y Criterios de División:
  - Regresión: Suma de Errores Cuadráticos (RSS).
  - Clasificación: Gini, Entropía y la Ganancia de Información.
- 3. Poda de Árboles: La técnica clave contra el sobreajuste.
- 4. Interpretación y Visualización: Extrayendo valor.
- 5. Ventajas y Desventajas: ¿Cuándo usarlos?
- Taller Práctico: Construcción con 'scikit-learn'.

- 1. Concepto y Estructura: ¿Qué son y cómo se organizan?
- 2. Construcción y Criterios de División:
  - Regresión: Suma de Errores Cuadráticos (RSS).
  - Clasificación: Gini, Entropía y la Ganancia de Información.
- 3. Poda de Árboles: La técnica clave contra el sobreajuste.
- 4. Interpretación y Visualización: Extrayendo valor.
- 5. Ventajas y Desventajas: ¿Cuándo usarlos?
- Taller Práctico: Construcción con 'scikit-learn'.

 Es un método de aprendizaje supervisado para clasificación y regresión.

- Es un método de aprendizaje supervisado para clasificación y regresión.
- Segmenta el espacio de los predictores en regiones simples y no superpuestas.

- Es un método de aprendizaje supervisado para clasificación y regresión.
- Segmenta el espacio de los predictores en regiones simples y no superpuestas.
- La predicción se basa en la media (regresión) o la clase más común (clasificación) de los datos en cada región.

- Es un método de aprendizaje supervisado para clasificación y regresión.
- Segmenta el espacio de los predictores en regiones simples y no superpuestas.
- La predicción se basa en la media (regresión) o la clase más común (clasificación) de los datos en cada región.
- Funciona haciendo una secuencia de preguntas simples sobre las características.

#### Laboratory Troubleshooting Flowchart



Figura: Un árbol de decisión puede verse como un simple diagrama de flujo.

 Nodo Raíz: El primer nodo, representa la muestra completa.

- Nodo Raíz: El primer nodo, representa la muestra completa.
- Nodos Internos: Puntos donde se divide el espacio predictor.

- Nodo Raíz: El primer nodo, representa la muestra completa.
- Nodos Internos: Puntos donde se divide el espacio predictor.
- Ramas: Conectan los nodos, representan las respuestas.

- Nodo Raíz: El primer nodo, representa la muestra completa.
- Nodos Internos: Puntos donde se divide el espacio predictor.
- Ramas: Conectan los nodos, representan las respuestas.
- Hojas: Nodos terminales, contienen la predicción final.

- Nodo Raíz: El primer nodo, representa la muestra completa.
- Nodos Internos: Puntos donde se divide el espacio predictor.
- Ramas: Conectan los nodos, representan las respuestas.
- Hojas: Nodos terminales, contienen la predicción final.

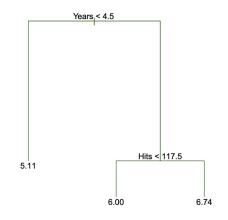


Figura: Ejemplo de un árbol de regresión. (Ref. ISLP, Fig 8.1)

• El proceso se llama **División Binaria Recursiva** (Recursive Binary Splitting).

- El proceso se llama División Binaria Recursiva (Recursive Binary Splitting).
- Es un enfoque top-down y greedy (voraz).

- El proceso se llama División Binaria Recursiva (Recursive Binary Splitting).
- Es un enfoque top-down y greedy (voraz).
  - **Top-down:** Comienza en el nodo raíz y divide el espacio sucesivamente.

- El proceso se llama División Binaria Recursiva (Recursive Binary Splitting).
- Es un enfoque top-down y greedy (voraz).
  - **Top-down:** Comienza en el nodo raíz y divide el espacio sucesivamente.
  - Greedy: En cada paso, elige la mejor división posible en ese momento, sin mirar hacia adelante.

- El proceso se llama División Binaria Recursiva (Recursive Binary Splitting).
- Es un enfoque top-down y greedy (voraz).
  - **Top-down:** Comienza en el nodo raíz y divide el espacio sucesivamente.
  - **Greedy:** En cada paso, elige la mejor división posible *en ese momento*, sin mirar hacia adelante.
- El algoritmo busca el predictor  $X_j$  y el punto de corte s que logren la mayor "mejora" según un criterio.

 Para regresión, el objetivo es minimizar la Suma de Errores Cuadráticos (RSS).

- Para regresión, el objetivo es minimizar la Suma de Errores Cuadráticos (RSS).
- Se elige la variable X<sub>m</sub> y el corte s que producen la mayor reducción en el RSS:

$$RSS = \sum_{m=1}^{M} \sum_{x_i \in R_m} (y_i - \hat{y}_{R_m})^2$$

donde  $\hat{y}_{R_m}$  es la media de la respuesta para las observaciones en la región j-ésima  $(R_j)$ .

- Para regresión, el objetivo es minimizar la Suma de Errores Cuadráticos (RSS).
- Se elige la variable X<sub>m</sub> y el corte s que producen la mayor reducción en el RSS:

$$RSS = \sum_{m=1}^{M} \sum_{x_i \in R_m} (y_i - \hat{y}_{R_m})^2$$

donde  $\hat{y}_{R_m}$  es la media de la respuesta para las observaciones en la región j-ésima  $(R_i)$ .

• Se repite hasta cumplir un criterio de detención.

- Para regresión, el objetivo es minimizar la Suma de Errores Cuadráticos (RSS).
- Se elige la variable X<sub>m</sub> y el corte s que producen la mayor reducción en el RSS:

$$RSS = \sum_{m=1}^{M} \sum_{x_i \in R_m} (y_i - \hat{y}_{R_m})^2$$

donde  $\hat{y}_{R_m}$  es la media de la respuesta para las observaciones en la región j-ésima  $(R_i)$ .

• Se repite hasta cumplir un criterio de detención.

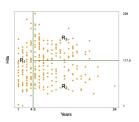


Figura: Partición del espacio de predictores. (Ref. ISLP, Fig 8.2)

• En clasificación, no se usa RSS. Buscamos maximizar la **pureza** de los nodos.

- En clasificación, no se usa RSS. Buscamos maximizar la pureza de los nodos.
- Un nodo es "puro" si contiene mayormente observaciones de una sola clase.

- En clasificación, no se usa RSS. Buscamos maximizar la pureza de los nodos.
- Un nodo es "puro" si contiene mayormente observaciones de una sola clase.
- Métricas comunes para evaluar la calidad de una división:
  - 1 Tasa de Error de Clasificación: Simple pero poco sensible para el crecimiento.
  - Indice de Gini: Medida de la probabilidad de clasificar incorrectamente un elemento.
  - Entropía: Medida del desorden, proveniente de la teoría de la información.

- En clasificación, no se usa RSS. Buscamos maximizar la pureza de los nodos.
- Un nodo es "puro" si contiene mayormente observaciones de una sola clase.
- Métricas comunes para evaluar la calidad de una división:
  - Tasa de Error de Clasificación: Simple pero poco sensible para el crecimiento.
  - 2 Índice de Gini: Medida de la probabilidad de clasificar incorrectamente un elemento.
  - Entropía: Medida del desorden, proveniente de la teoría de la información.
- Gini y Entropía son preferidos para construir el árbol.

## Fórmulas (para un nodo *m*):

• Índice de Gini:  $G = \sum_{k=1}^K \hat{p}_{mk} (1 - \hat{p}_{mk})$ 

- Índice de Gini:  $G = \sum_{k=1}^K \hat{p}_{mk} (1 \hat{p}_{mk})$
- Entropía:  $D = -\sum_{k=1}^K \hat{p}_{mk} \log_2(\hat{p}_{mk})$

- Índice de Gini:  $G = \sum_{k=1}^K \hat{p}_{mk} (1 \hat{p}_{mk})$
- Entropía:  $D = -\sum_{k=1}^{K} \hat{p}_{mk} \log_2(\hat{p}_{mk})$
- Error:  $E = 1 \max_k(\hat{p}_{mk})$

- Índice de Gini:  $G = \sum_{k=1}^K \hat{p}_{mk} (1 \hat{p}_{mk})$
- Entropía:  $D = -\sum_{k=1}^{K} \hat{p}_{mk} \log_2(\hat{p}_{mk})$
- Error:  $E = 1 \max_k(\hat{p}_{mk})$

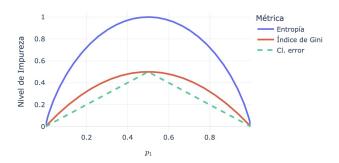


Figura: Comparación de métricas de impureza para un problema de dos clases.

## ¿Por qué estamos seguros de que una división ayuda?

• El objetivo en cada paso es encontrar la división que maximice la **Ganancia de Información**.

## ¿Por qué estamos seguros de que una división ayuda?

- El objetivo en cada paso es encontrar la división que maximice la Ganancia de Información.
- Se define como la reducción de la impureza (ej. entropía) del nodo padre gracias a la división:

$$Ganancia = D(padre) - \sum_{j \in hijos} w_j D(hijo_j)$$

• Donde  $w_j$  es la proporción de observaciones en el nodo hijo j.

## ¿Por qué estamos seguros de que una división ayuda?

- El objetivo en cada paso es encontrar la división que maximice la Ganancia de Información.
- Se define como la reducción de la impureza (ej. entropía) del nodo padre gracias a la división:

$$Ganancia = D(padre) - \sum_{j \in hijos} w_j D(hijo_j)$$

- Donde  $w_j$  es la proporción de observaciones en el nodo hijo j.
- **Pregunta clave:** ¿Existe una garantía matemática de que esta ganancia es siempre positiva o cero? ¿O podría una división, por azar, aumentar la entropía total?

## ¿Por qué estamos seguros de que una división ayuda?

- El objetivo en cada paso es encontrar la división que maximice la Ganancia de Información.
- Se define como la reducción de la impureza (ej. entropía) del nodo padre gracias a la división:

$$\mathsf{Ganancia} = D(\mathsf{padre}) - \sum_{j \in \mathsf{hijos}} w_j D(\mathsf{hijo}_j)$$

- Donde  $w_j$  es la proporción de observaciones en el nodo hijo j.
- **Pregunta clave:** ¿Existe una garantía matemática de que esta ganancia es siempre positiva o cero? ¿O podría una división, por azar, aumentar la entropía total?

#### Spoiler

La respuesta es sí, hay una garantía. Y reside en una propiedad fundamental de la función de entropía.

 La propiedad matemática que hace a la Entropía ideal es que es una función estrictamente cóncava.

- La propiedad matemática que hace a la Entropía ideal es que es una función estrictamente cóncava.
- Una función cóncava cumple la Desigualdad de Jensen, que para nuestro caso implica:

"La entropía de un promedio es mayor o igual al promedio de las entropías."

- La propiedad matemática que hace a la Entropía ideal es que es una función estrictamente cóncava.
- Una función cóncava cumple la Desigualdad de Jensen, que para nuestro caso implica:

"La entropía de un promedio es mayor o igual al promedio de las entropías."

 Como la distribución de clases del nodo padre es un promedio ponderado de las de sus hijos, se puede demostrar que:

$$D(\mathsf{padre}) \geq \sum_j w_j D(\mathsf{hijo}_j)$$

- La propiedad matemática que hace a la Entropía ideal es que es una función estrictamente cóncava.
- Una función cóncava cumple la Desigualdad de Jensen, que para nuestro caso implica:

"La entropía de un promedio es mayor o igual al promedio de las entropías."

 Como la distribución de clases del nodo padre es un promedio ponderado de las de sus hijos, se puede demostrar que:

$$D(\mathsf{padre}) \geq \sum_j w_j D(\mathsf{hijo}_j)$$

Esto garantiza que la Ganancia de Información siempre es ≥ 0.
 Cada división del algoritmo es un paso en la dirección correcta para reducir la impureza.

# Preguntas y Pausa

(15 minutos)

 Si un árbol crece sin restricciones, se vuelve demasiado complejo, memorizando el ruido de los datos de entrenamiento.

- Si un árbol crece sin restricciones, se vuelve demasiado complejo, memorizando el ruido de los datos de entrenamiento.
- Esto resulta en un excelente rendimiento en entrenamiento, pero muy pobre en datos nuevos (error de test).

- Si un árbol crece sin restricciones, se vuelve demasiado complejo, memorizando el ruido de los datos de entrenamiento.
- Esto resulta en un excelente rendimiento en entrenamiento, pero muy pobre en datos nuevos (error de test).
- Un árbol complejo tiene bajo sesgo (bias) pero alta varianza (variance).

- Si un árbol crece sin restricciones, se vuelve demasiado complejo, memorizando el ruido de los datos de entrenamiento.
- Esto resulta en un excelente rendimiento en entrenamiento, pero muy pobre en datos nuevos (error de test).
- Un árbol complejo tiene bajo sesgo (bias) pero alta varianza (variance).

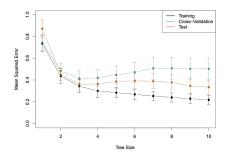


Figura: Curvas de error vs. complejidad del árbol. (Ref. ISLP, Fig 8.5)

• La estrategia no es detener el crecimiento prematuramente (sería "miope").

- La estrategia no es detener el crecimiento prematuramente (sería "miope").
- La mejor estrategia es:

- La estrategia no es detener el crecimiento prematuramente (sería "miope").
- La mejor estrategia es:
  - **①** Crecer un árbol muy grande y complejo  $(T_0)$ .

- La estrategia no es detener el crecimiento prematuramente (sería "miope").
- La mejor estrategia es:
  - **①** Crecer un árbol muy grande y complejo  $(T_0)$ .
  - Podar este árbol hacia atrás, generando una secuencia de subárboles más simples.

- La estrategia no es detener el crecimiento prematuramente (sería "miope").
- La mejor estrategia es:
  - **①** Crecer un árbol muy grande y complejo  $(T_0)$ .
  - Podar este árbol hacia atrás, generando una secuencia de subárboles más simples.
- Se elige el mejor subárbol usando validación cruzada para encontrar el que generaliza mejor.

• Introduce un parámetro de "tuning"  $\alpha \geq 0$ .

- Introduce un parámetro de "tuning"  $\alpha \geq 0$ .
- Para cada  $\alpha$ , se busca el subárbol T que minimiza:

$$\sum_{m=1}^{|T|} \sum_{i:x_i \in R_m} (y_i - \hat{y}_{R_m})^2 + \underbrace{\alpha |T|}_{\text{Penalización por complejidad}}$$
 Error de entrenamiento (RSS)

- Introduce un parámetro de "tuning"  $\alpha \geq 0$ .
- Para cada  $\alpha$ , se busca el subárbol T que minimiza:

$$\underbrace{\sum_{m=1}^{|T|} \sum_{i: x_i \in R_m} (y_i - \hat{y}_{R_m})^2}_{\text{Error de entrenamiento (RSS)}} + \underbrace{\alpha |T|}_{\text{Penalización por complejidad}}$$

 $\bullet$  A medida que  $\alpha$  aumenta, la penalización es mayor, forzando al árbol a ser más pequeño para minimizar el costo.

- Introduce un parámetro de "tuning"  $\alpha \geq 0$ .
- Para cada  $\alpha$ , se busca el subárbol T que minimiza:

$$\underbrace{\sum_{m=1}^{|T|} \sum_{i: x_i \in R_m} (y_i - \hat{y}_{R_m})^2}_{\text{Error de entrenamiento (RSS)}} + \underbrace{\alpha |T|}_{\text{Penalización por complejidad}}$$

- A medida que  $\alpha$  aumenta, la penalización es mayor, forzando al árbol a ser más pequeño para minimizar el costo.
- El valor óptimo de  $\alpha$  se determina con validación cruzada.

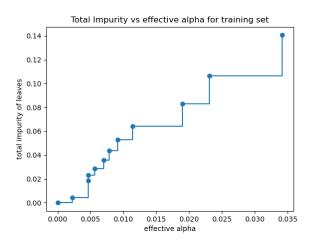


Figura: Impureza vs.  $\alpha$  efectivo (Ref. scikit-learn docs.)

• La interpretabilidad es una de las mayores fortalezas de los árboles.

- La interpretabilidad es una de las mayores fortalezas de los árboles.
- Visualización del Árbol: Permite seguir el camino de decisión para cualquier observación.

- La interpretabilidad es una de las mayores fortalezas de los árboles.
- Visualización del Árbol: Permite seguir el camino de decisión para cualquier observación.
- Importancia de Características: Cuantifica qué tan "útil" es cada predictor.
  - Se calcula la reducción total del RSS o Entropía atribuida a todas las divisiones hechas sobre esa característica.
  - Un valor alto indica que el predictor es importante.

- La interpretabilidad es una de las mayores fortalezas de los árboles.
- Visualización del Árbol: Permite seguir el camino de decisión para cualquier observación.
- Importancia de Características: Cuantifica qué tan "útil" es cada predictor.
  - Se calcula la reducción total del RSS o Entropía atribuida a todas las divisiones hechas sobre esa característica.
  - Un valor alto indica que el predictor es importante.

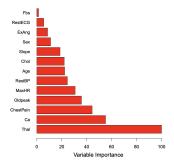


Figura: Gráfico de importancia de variables. (Ref. ISLP, Fig 8.9)

 Cada árbol corresponde a una partición del espacio de características en "cajas" rectangulares.

- Cada árbol corresponde a una partición del espacio de características en "cajas" rectangulares.
- Visualizar esta partición da una comprensión geométrica de las decisiones del modelo.

- Cada árbol corresponde a una partición del espacio de características en "cajas" rectangulares.
- Visualizar esta partición da una comprensión geométrica de las decisiones del modelo.
- Limitación: Las divisiones son siempre paralelas a los ejes; no capturan límites de decisión diagonales o curvos de forma natural.

- Cada árbol corresponde a una partición del espacio de características en "cajas" rectangulares.
- Visualizar esta partición da una comprensión geométrica de las decisiones del modelo.
- Limitación: Las divisiones son siempre paralelas a los ejes; no capturan límites de decisión diagonales o curvos de forma natural.

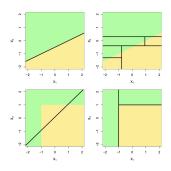


Figura: Particiones del espacio 2D con árboles y fronteras lineales.

• **Fáciles de interpretar y explicar:** Son muy intuitivos y se pueden visualizar gráficamente.

- **Fáciles de interpretar y explicar:** Son muy intuitivos y se pueden visualizar gráficamente.
- Manejan datos no numéricos: Pueden trabajar con variables categóricas de forma natural.

- **Fáciles de interpretar y explicar:** Son muy intuitivos y se pueden visualizar gráficamente.
- Manejan datos no numéricos: Pueden trabajar con variables categóricas de forma natural.
- No requieren escalado de características: El proceso de división no se ve afectado por la escala.

- **Fáciles de interpretar y explicar:** Son muy intuitivos y se pueden visualizar gráficamente.
- Manejan datos no numéricos: Pueden trabajar con variables categóricas de forma natural.
- No requieren escalado de características: El proceso de división no se ve afectado por la escala.
- Capturan interacciones y no linealidades de forma automática.

 Menor precisión predictiva: Por sí solos, no suelen ser tan precisos como métodos más avanzados.

- Menor precisión predictiva: Por sí solos, no suelen ser tan precisos como métodos más avanzados.
- Inestables y no robustos: Pequeños cambios en los datos pueden resultar en un árbol muy diferente (alta varianza).

- Menor precisión predictiva: Por sí solos, no suelen ser tan precisos como métodos más avanzados.
- **Inestables y no robustos:** Pequeños cambios en los datos pueden resultar en un árbol muy diferente (alta varianza).
- **Propensos al sobreajuste:** Requieren poda para evitar que se ajusten en exceso al ruido.

- Menor precisión predictiva: Por sí solos, no suelen ser tan precisos como métodos más avanzados.
- Inestables y no robustos: Pequeños cambios en los datos pueden resultar en un árbol muy diferente (alta varianza).
- **Propensos al sobreajuste:** Requieren poda para evitar que se ajusten en exceso al ruido.
- **Dificultad con límites lineales:** Necesitan muchas divisiones para aproximar un simple límite diagonal.

• Los árboles dividen el espacio de forma recursiva y voraz.

- Los árboles dividen el espacio de forma recursiva y voraz.
- Usan RSS (regresión) o Gini/Entropía (clasificación) como criterios.
  La entropía tiene la propiedad de \*\*concavidad\*\*, que garantiza la ganancia de información.

- Los árboles dividen el espacio de forma recursiva y voraz.
- Usan RSS (regresión) o Gini/Entropía (clasificación) como criterios.
  La entropía tiene la propiedad de \*\*concavidad\*\*, que garantiza la ganancia de información.
- El sobreajuste es un problema serio que se combate con la poda (pruning).

- Los árboles dividen el espacio de forma recursiva y voraz.
- Usan RSS (regresión) o Gini/Entropía (clasificación) como criterios.
  La entropía tiene la propiedad de \*\*concavidad\*\*, que garantiza la ganancia de información.
- El sobreajuste es un problema serio que se combate con la poda (pruning).
- Su gran ventaja es la interpretabilidad, su debilidad es la alta varianza.

- Los árboles dividen el espacio de forma recursiva y voraz.
- Usan RSS (regresión) o Gini/Entropía (clasificación) como criterios.
  La entropía tiene la propiedad de \*\*concavidad\*\*, que garantiza la ganancia de información.
- El sobreajuste es un problema serio que se combate con la poda (pruning).
- Su gran ventaja es la interpretabilidad, su debilidad es la alta varianza.

#### Adelanto de la Próxima Clase

La debilidad de los árboles (alta varianza) puede ser una fortaleza. Al promediar muchos árboles inestables (un *ensemble*), reducimos la varianza y mejoramos la precisión. ¡Esto da lugar a **Bagging** y **Random Forests**!

# ¡Manos al Código!

## Taller Práctico en Jupyter Notebook

- Cargar y explorar un dataset.
- Entrenar un árbol de decisión para clasificación.
- Visualizar el árbol y sus particiones.
- Aplicar poda por complejidad de costo.
- Interpretar la importancia de las características.