# Árboles (CARTs), Bagging and Random Forests

## Big Data y Machine Learning para Economía Aplicada

Ignacio Sarmiento-Barbieri

Universidad de los Andes

# Motivación

- Queremos predecir:

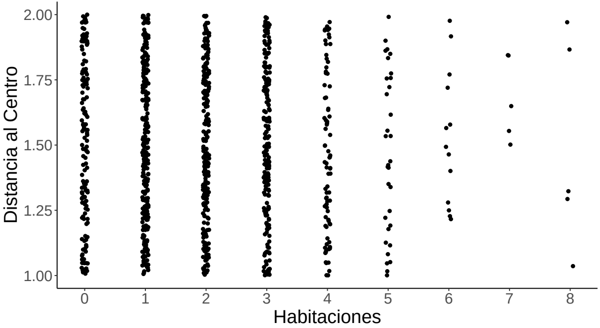
$$Price = f(structural\,attributes, amenities, ...) \quad (1)$$

  - Podemos aplicar linear regression,

$$Price = \beta_0 + \beta_1 Habitaciones + \beta_2 DCBD + u \quad (2)$$

- Aplicar OLS a este problema requiere tomar algunas decisiones.

# Motivación


Distancia al Centro
2.00
1.75
1.50
1.25
1.00
0
1
2
3
4
5
6
7
8
Habitaciones

# Agenda

1. Árboles
   - ¿Qué hacen?
   - ¿Cómo lo hacen?
   - Sobreajuste
2. Bagging
   - Random Forests
3. Boosting

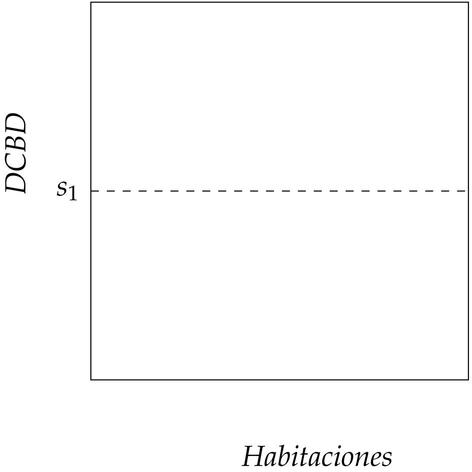
# Agenda

# ¿Qué hacen?

"Recursive binary splitting"

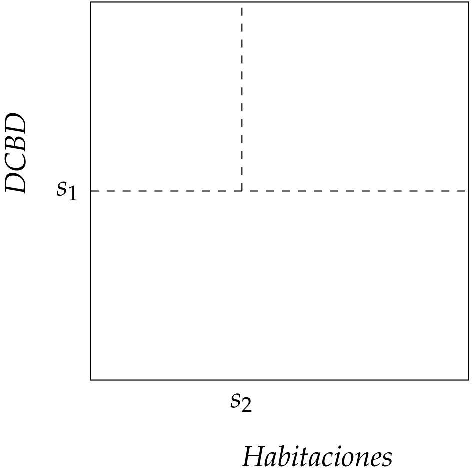
# ¿Qué hacen?

"Recursive binary splitting"

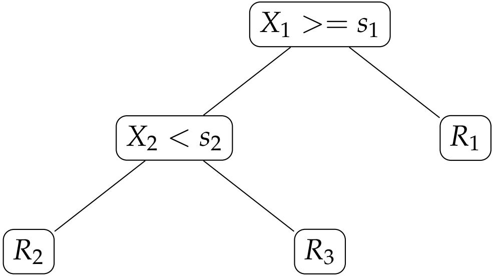


# ¿Qué hacen?

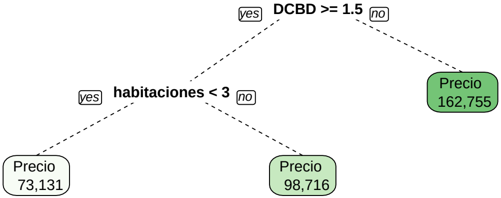
"Recursive binary splitting"

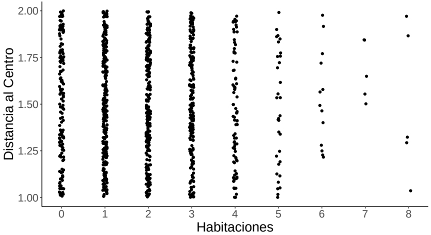


# ¿Qué hacen?



# ¿Qué hacen?


DCBD >= 1.5
yes
no
habitaciones < 3
yes
no
Precio 162,755
Precio 73,131
Precio 98,716


Distancia al Centro
2.00
1.75
1.50
1.25
1.00
0
1
2
3
4
5
6
7
8
Habitaciones

# Agenda

# ¿Cómo construimos un árbol de decisión?

- Datos: $y_{n\times 1}$ y $X_{n\times k}$
- Definiciones
  - $j$ es la variable que parte el espacio y $s$ es el punto de partición
  - Defina los siguientes semiplanos

$$R_1(j,s) = \{X|X_j \leq s\} \;\&\; R_2(j,s) = \{X|X_j > s\} \tag{3}$$

  - El problema: usando una "perdida cuadrática" buscar la variable de partición $X_j$ y el punto $s$ de forma tal que:

$$\min_{j,s}\left[\min_{y_{R_1}} \sum_{x_i \in R_1(j,s)} (y - y_{R_1})^2 + \min_{y_{R_2}} \sum_{x_i \in R_2(j,s)} (y - y_{R_2})^2\right] \tag{4}$$

# ¿Cómo construimos un árbol de decisión?

- Datos: $y_{n\times 1}$ y $X_{n\times k}$
- Definiciones
  - $j$ es la variable que parte el espacio y $s$ es el punto de partición
  - Defina los siguientes semiplanos

$$R_1(j,s) = \{X|X_j \leq s\} \ \& \ R_2(j,s) = \{X|X_j > s\} \tag{3}$$

  - El problema: usando una "perdida cuadrática" buscar la variable de partición $X_j$ y el punto $s$ de forma tal que:

$$\min_{j,s}\left[\min_{y_{R_1}} \sum_{x_i \in R_1(j,s)} (y - y_{R_1})^2 + \min_{y_{R_2}} \sum_{x_i \in R_2(j,s)} (y - y_{R_2})^2\right] \tag{4}$$

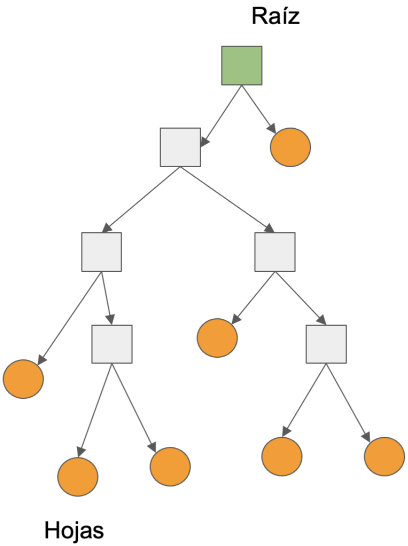
- ¿Cuál es la solución?

# ¿Cómo construimos un árbol de decisión?


photo from https://www.dailydot.com/parsec/batman-1966-labels-tumblr-twitter-vine/

# Agenda

# Sobreajuste



# Sobreajuste. Algunas soluciones

- Fijar la profundidad del árbol.
- Fijar la mínima cantidad de datos que están contenidos dentro de cada hoja.
- Pruning (poda).
  - Dejar crecer un árbol muy grande $T_0$
  - Luego cortarlo obteniendo sub-árbol (*subtree*)
  - Como cortarlo?

# Pruning (poda)

- No es posible calcular el error de predicción usando cross-validation para cada sub-árbol posible
- Solución: *Cost complexity pruning (cortar las ramas mas débiles)*
  - Indexamos los arboles con $T$.
  - Un sub-árbol $T \in T_0$ es un árbol que se obtuvo colapsando los nodos terminales de otro árbol (cortando ramas).
  - $[T]$ = número de nodos terminales del árbol $T$

# Pruning (poda)

- Cost complexity del árbol $T$

$$C_\alpha(T) = \sum_{m=1}^{[T]} n_m Q_m(T) + \alpha[T] \tag{5}$$

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

# Pruning (poda)

- Mecanismo de búsqueda para $T_\alpha$ ( pruning óptimo dado $\alpha$).

  *Resultado: para cada $\alpha$ hay un sub-árbol único $T_\alpha$ que minimiza $C\alpha$ $(T)$.*

  - Eliminar sucesivamente las ramas que producen un aumento mínimo en $\sum_{m=1}^{[T]} n_m Q_m(T)$
  - Se colapsa hasta el nodo inicial pero va a través de una sucesión de árboles
  - $T_\alpha$ pertenece a esta secuencia. (Breiman et al., 1984)

# Pruning (poda)

## Algoritmo Completo

1. Utilizamos particiones recursivas binarias para hacer crecer el árbol
2. Para un dado $\alpha$, aplicamos *cost complexity pruning* al árbol para obtener la secuencia de los subarboles como $\alpha$.
3. Utilizamos K-fold cross-validation para elegir $\alpha$.
4. Tenemos entonces una secuencia de subarboles para distintos valores de $\alpha$
5. Elegimos el $\alpha$ y el subárbol que tienen el menor error de predicción.

# Ejemplo

photo from https://www.dailydot.com/parsec/batman-1966-labels-tumblr-twitter-vine/

# Agenda

# Bagging

- Problema con CART: pocos robustos.
- Podemos mejorar mucho el rendimiento mediante la agregación
- Idea: la varianza del promedio es menor que la de una sola predicción.

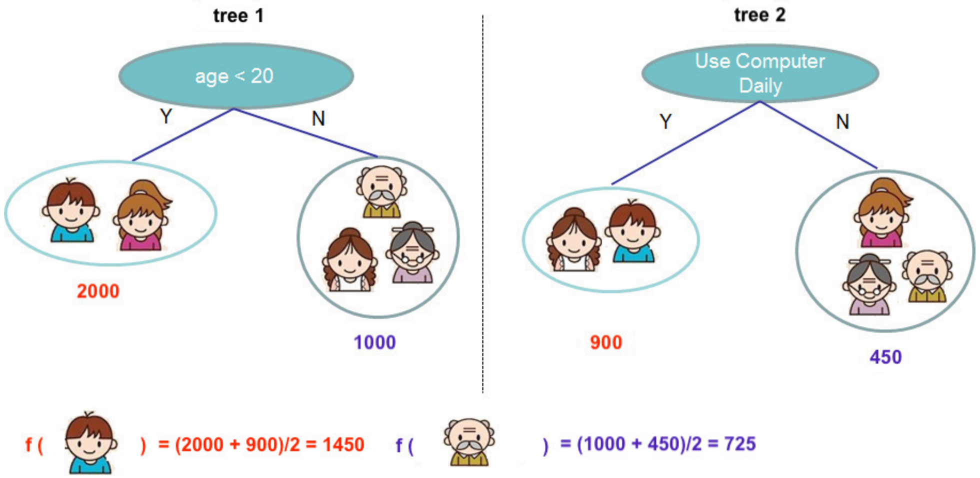
# Bagging

- Bagging:
  - Obtenga repetidamente muestras aleatorias $(X_i^b, Y_i^b)_{i=1}^N$ de la muestra observada (bootstrap).
  - Para cada muestra, ajuste un árbol de regresión $\hat{f}^b(x)$
  - Promedie las muestras de bootstrap

$$\hat{f}_{bag} = \frac{1}{B}\sum_{b=1}^{B}\hat{f}^b(x) \tag{6}$$

- Básicamente estamos suavizando las predicciones.

# Bagging



tree 1
age < 20
Y
N
2000
1000
tree 2
Use Computer Daily
Y
N
900
450
f ( ) = (2000 + 900)/2 = 1450
f ( ) = (1000 + 450)/2 = 725

# Agenda

# 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): reduce 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 $m = \sqrt{(}p)$

# Ejemplo


photo from https://www.dailydot.com/parsec/batman-1966-labels-tumblr-twitter-vine/

# Agenda

# Boosting: Motivation

- Problema con CART: varianza alta.
- Podemos mejorar mucho el rendimiento mediante la agregación
- El boosting toma esta idea pero lo ”encara” de una manera diferente $\rightarrow$ viene de la computación
- Va a usar arboles pequeños y a aprender de los errores

# Boosting Trees

- La idea es aprender de los errores lentamente.
- Ajustamos un árbol utilizando los errores del modelo.
- Cada uno de estos árboles puede ser bastante pequeño.
- Esto permite mejorar lentamente aprendiendo $f(.)$ en áreas donde no funciona bien.
- OJO: a diferencia de *bagging*, la construcción de cada árbol depende en gran medida de los árboles que ya han crecido.

# Boosting Trees: Algoritmo

1. Iniciamos fijando $\hat{f}(x) = 0$ y $r_i = y_i$ para todos los $i$ del training set
2. Para $m = 1, 2, ..., M$
   1. Ajustamos un árbol $\hat{f}^m$ con $d$ bifurcaciones ($d + 1$ hojas)
   2. Actualizamos $\hat{f}(x)$ con una versión "shrunken" del nuevo árbol
      $$\hat{f}(x) \leftarrow \hat{f}(x) + \lambda \hat{f}^m(x) \tag{7}$$
   3. Actualizamos los residuales
      $$r_i \leftarrow r_i - \lambda \hat{f}^m(x) \tag{8}$$
3. El modelo final es
   $$\hat{f}_{boost} = \sum_{m=1}^{M} \lambda \hat{f}^m(x) \tag{9}$$

# Boosting Trees: Iteraciones

- Los hiperparámetros a fijar son
  - $\lambda$ la tasa a la que aprende, los valores típicos son 0.01 o 0.001
  - El tamaño del árbol. Arboles pocos profundos funcionan bien.
  - El número de iteraciones (M) a usar?

# Boosting Trees: Iteraciones

- Cuantas iteraciones (M) usar?
  - Cada iteración generalmente reduce el error de ajuste, de modo que para M lo suficientemente grande este error puede hacerse arbitrariamente pequeño (sesgo se va a cero).
  - Sin embargo, ajustar demasiado bien los datos de entrenamiento puede llevar a overfit (sobreajuste)
  - Por lo tanto, hay un número óptimo $M^\star$ que minimiza el error fuera de muestra
  - Una forma conveniente de encontrar $M^\star$ con validación cruzada

# Example


photo from https://www.dailydot.com/parsec/batman-1966-labels-tumblr-twitter-vine/