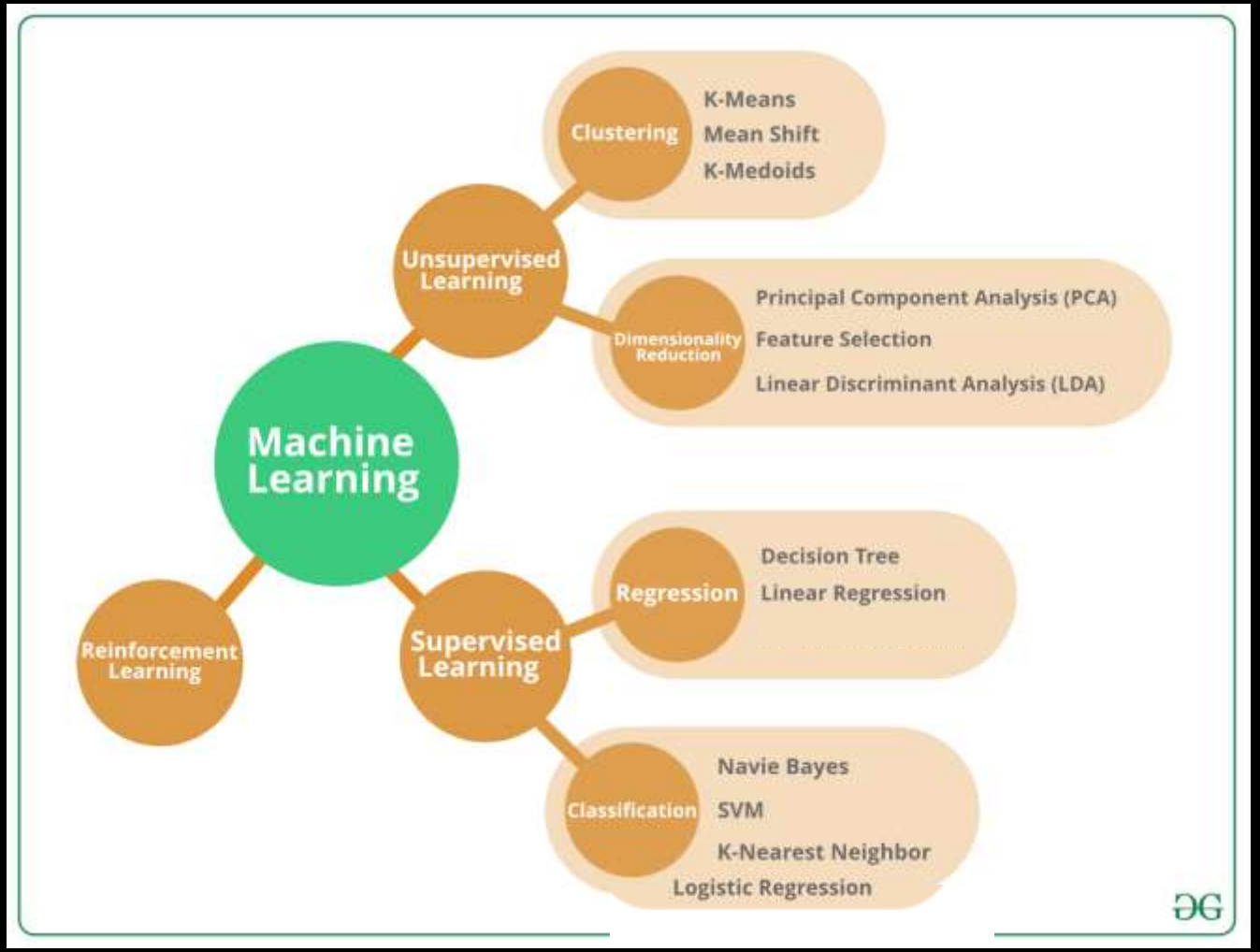
Machine Learning – Árboles de decisión

Algoritmos de machine learning

- Aprendizaje supervisado:
  - Regresión
  - Clasificación
- Aprendizaje no supervisado:
  - Clusterización
  - Reducción de dimensionalidad
- Aprendizaje por refuerzo



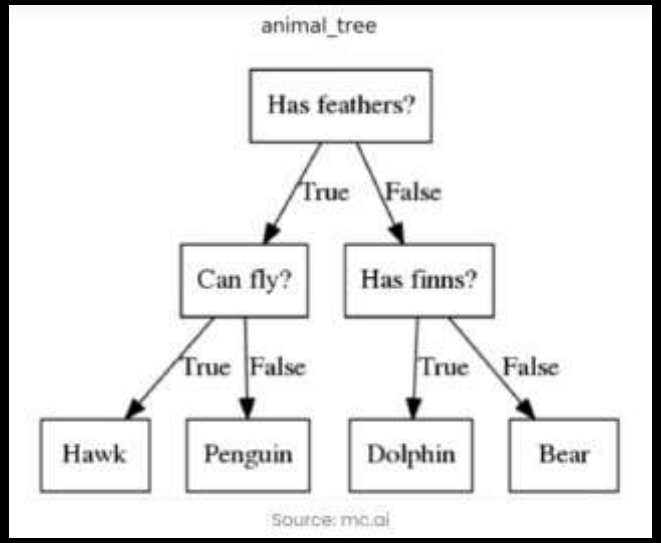
Definición

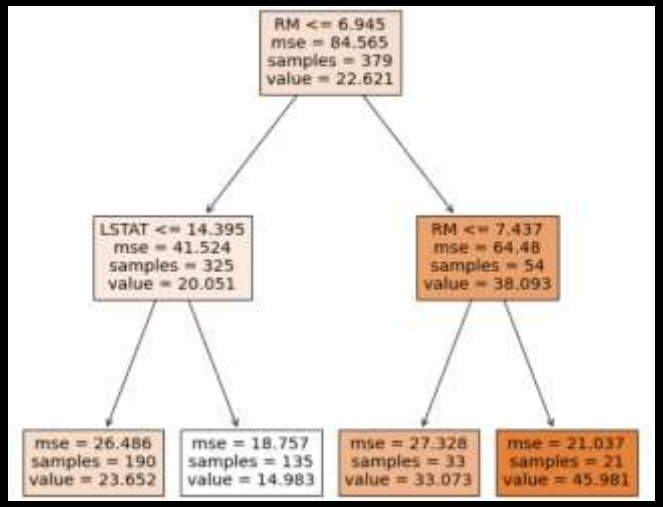
Definición

Algoritmo supervisado

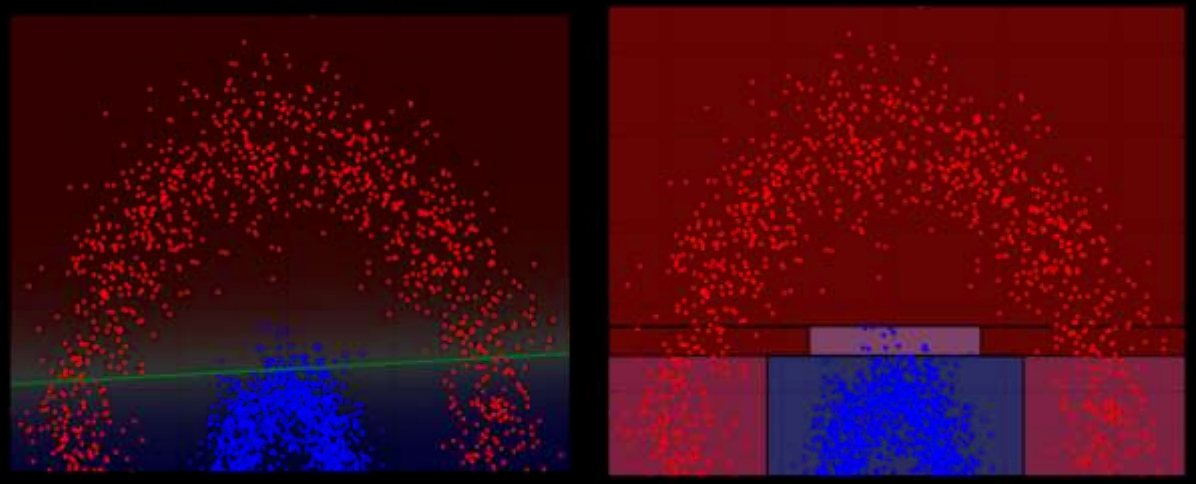
White box: Es un modelo intrínsecamente interpretable
(podemos comprender como realiza las predicciones a través de los propios parámetros que el modelo aporta).

Clasificación y Regresión





No lineal



Algunos términos importantes

CART algorithm
Algoritmo utilizado por Sklearn. Produce árboles binarios y se puede utilizar para regresión y para clasificación.

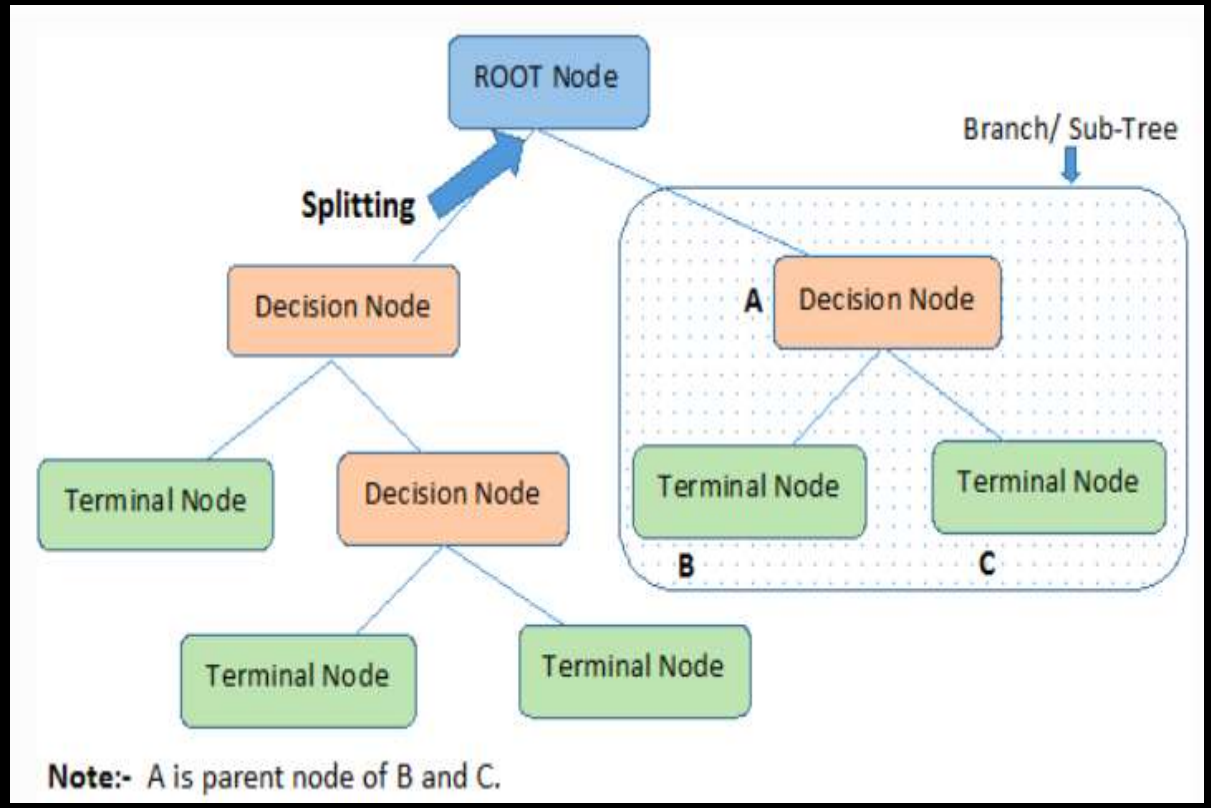
Root node
Representa toda la muestra, que luego se subdivide.

Decision node
Nodo que se divide a su vez en otros subnodos.

Terminal node o leaf node
Nodo que no se puede subdividir en otros subnodos.

Splitting
División de un nodo en dos ramas basada en condiciones if-else.

Profundidad del árbol (Depth)
Cuántos niveles tiene el árbol. En este ejemplo serían tres niveles.



¿Cómo creamos un árbol de decision?

Decision tree classifier

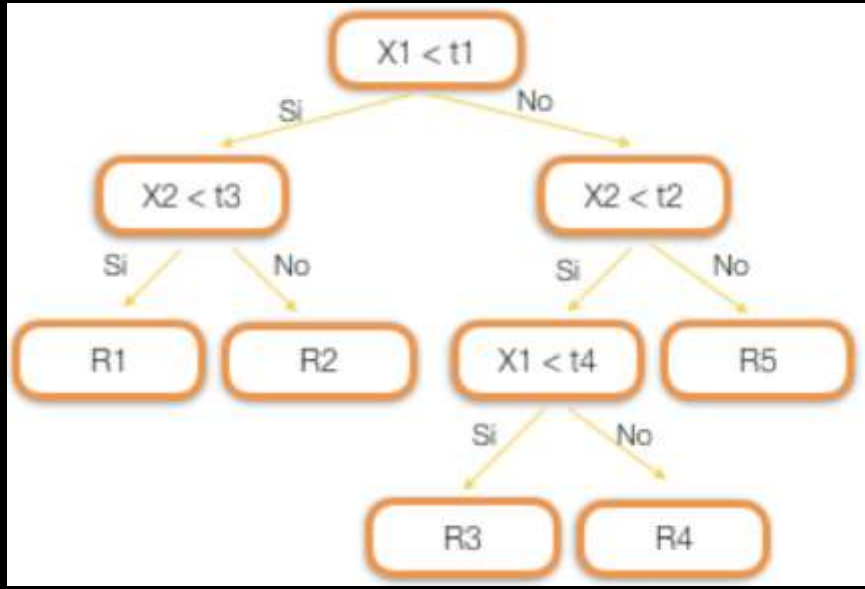
Funcionamiento

1. **Dividimos el espacio muestral con la variable más predictiva (la que mejor separa los datos)**

2. **Tras esta división, el árbol se vuelve a dividir en el siguiente nivel** con la variable que mejor separa los datos del nodo.

3. Y así, hasta que alcanzamos un criterio de parada:
    1. Están todos los elementos clasificados perfectamente (**WARNING**)
    2. No puede encontrar una división que reduzca la impureza del nodo.
    3. El árbol alcanza un tamaño predefinido.

4. La clase asignada al nodo es la **moda** de las clases de la instancias que caen en esa región. Esa será la predicción para nuevas instancias**.**



¿Cuál es la feature más predictiva? ¿Cómo elegimos los splits?

Mejores splits

El algoritmo CART divide cada nodo de la manera que **minimiza la suma ponderada de la impureza sus hijos**.

El algoritmo comienza dividiendo los datos de train en dos subconjuntos, utilizando una única variable k y un umbral tk (e.g., “petal length ≤ 2.45 cm”). Lo que busca el el par (k,tk) que produzca los subconjuntos más puros (ponderados por su tamaño).

Esta es la **función de coste** que el algoritmo trata de minimizar:

$$J(k, t_k) = \frac{m_{\text{left}}}{m} G_{\text{left}} + \frac{m_{\text{right}}}{m} G_{\text{right}}$$

$$\text{where} \begin{cases} G_{\text{left/right}} \text{ measures the impurity of the left/right subset,} \\ m_{\text{left/right}} \text{ is the number of instances in the left/right subset.} \end{cases}$$

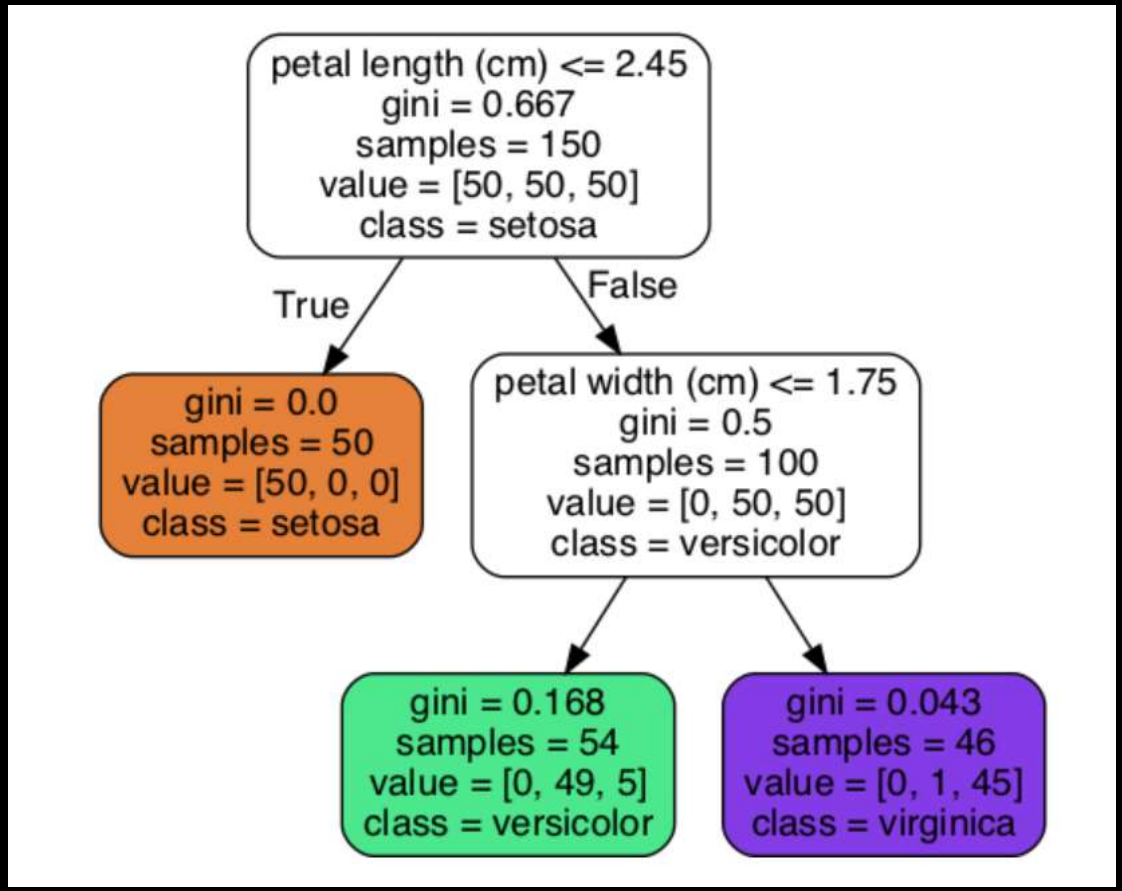
Una vez que el algoritmo CART ha dividido con éxito el conjunto de entrenamiento en dos, divide los subconjuntos usando la misma lógica, luego los sub-subconjuntos, y así sucesivamente, de forma recursiva, hasta que alcanza la profundidad máxima.

De forma predeterminada Sklearn utiliza la medida de impureza de **Gini**, pero es posible seleccionar la medida de impureza de **Entropía**, con el parámetro “criterion”.

Impurity	Task	Formula	Description
Gini impurity	Classification	$\sum_{i=1}^{C} f_i(1 - f_i)$	f_i is the frequency of label i at a node and C is the number of unique labels.
Entropy	Classification	$\sum_{i=1}^{C} -f_i \log(f_i)$	f_i is the frequency of label i at a node and C is the number of unique labels.

https://towardsdatascience.com/the-mathematics-of-decision-trees-random-forest-and-feature-importance-in-scikit-learn-and-spark-f2861df67e3

Ejemplo


petal length (cm) <= 2.45
gini = 0.667
samples = 150
value = [50, 50, 50]
class = setosa
True
False
gini = 0.0
samples = 50
value = [50, 0, 0]
class = setosa
petal width (cm) <= 1.75
gini = 0.5
samples = 100
value = [0, 50, 50]
class = versicolor
gini = 0.168
samples = 54
value = [0, 49, 5]
class = versicolor
gini = 0.043
samples = 46
value = [0, 1, 45]
class = virginica

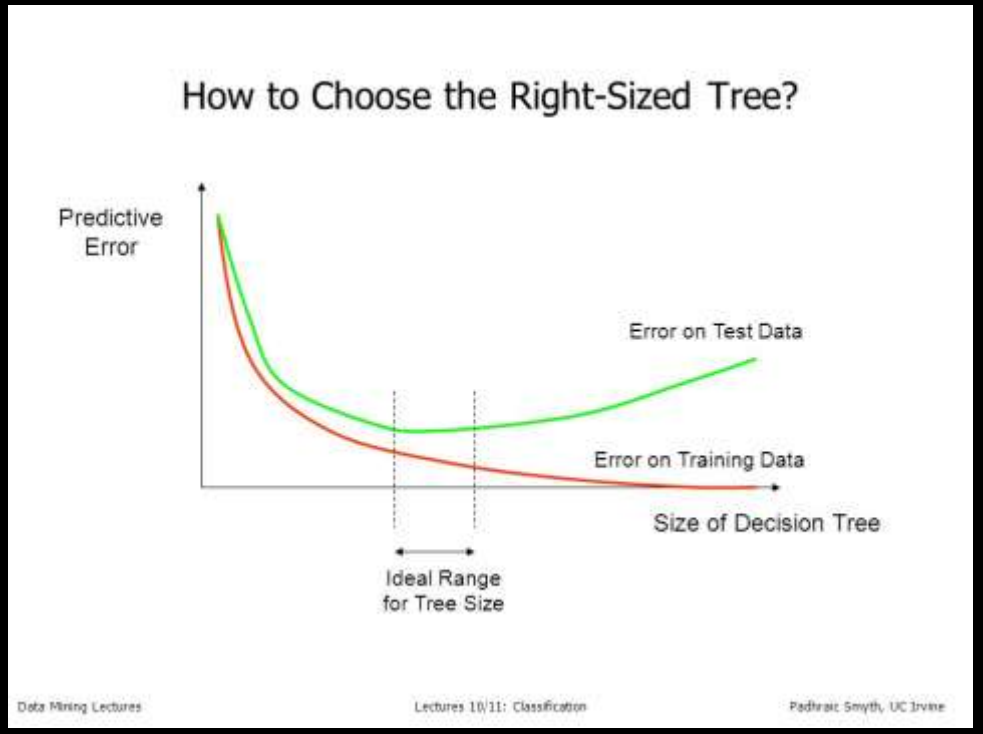
Profundidad del árbol

Riesgo de overfitting

Modelo no paramétrico : Los árboles de decisión hacen muy pocas suposiciones sobre los datos de entrenamiento, a diferencia de los modelos lineales, que asumen que los datos tienen una relación lineal, por ejemplo.

Por lo tanto, la estructura del modelo es libre para ajustarse todo lo posible a los datos de entrenamiento.

Si no se limita la dimensión del árbol, se producirá muy probablemente overfitting.

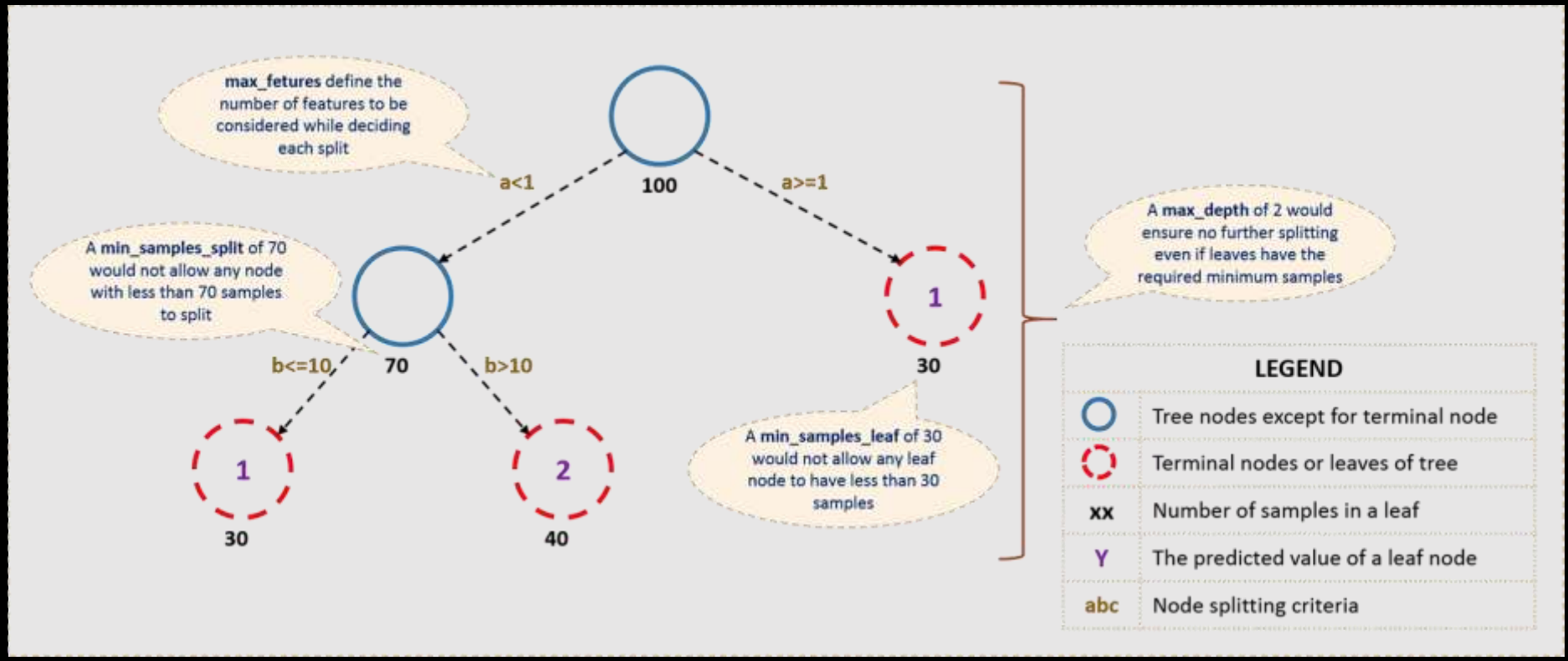


¿Cómo solucionamos el overfitting?
Prunning

Prunning

Sencilla técnica que consiste en “podar” el árbol. Lo único que tenemos que hacer es reducir la dimensión del árbol de decisión con un número menor de niveles de profundidad (hiperparámetro max_depth).

Se pueden establecer otras modalidades de limitación al tamaño del árbol para evitar el overfitting:



Decision Tree Regression

Árboles regresores

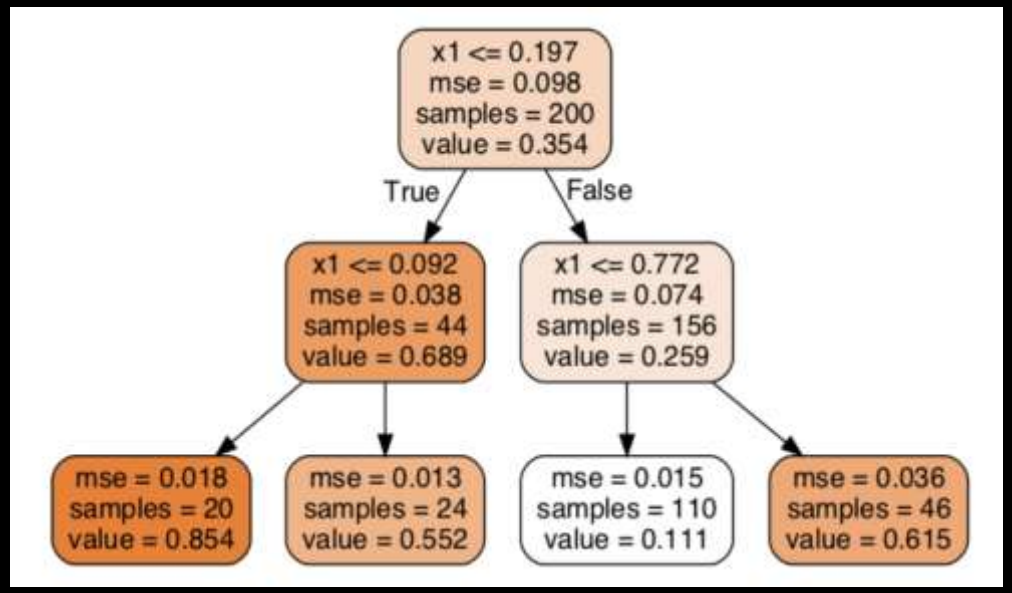
Se diferencian de los árboles de decisión en que, en lugar de predecir una clase en cada nodo, predicen un valor.

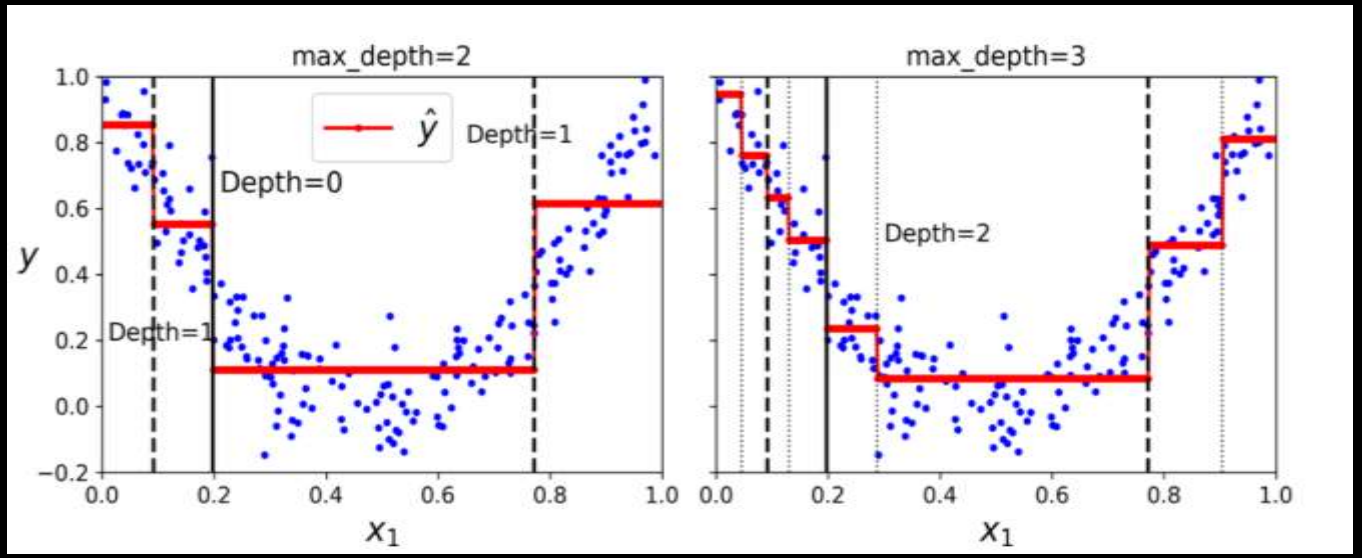
Esta predicción es el **valor objetivo promedio** de las instancias de entrenamiento asociadas con este nodo.

El algoritmo funciona casi de la misma manera, excepto que en lugar de intentar dividir el conjunto de entrenamiento de una manera que minimice la impureza, ahora intenta **minimizar** la **variación de los datos (MSE).**

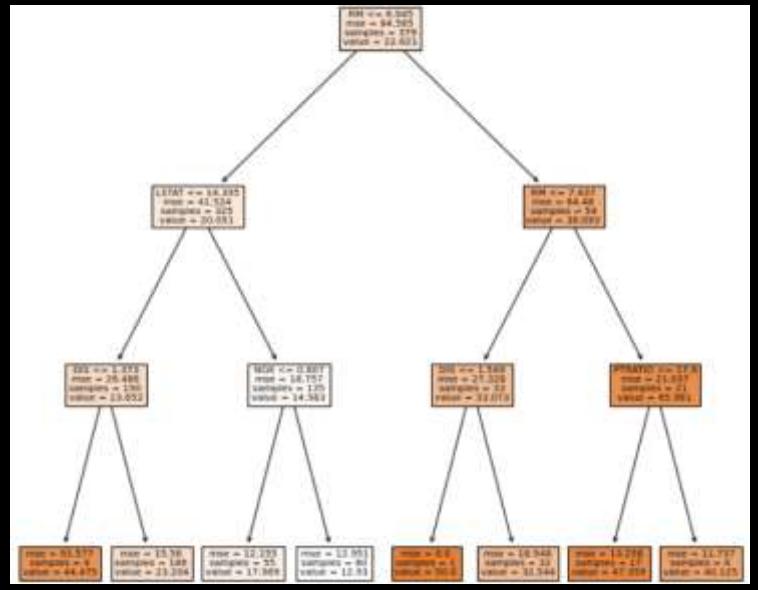
$$J\left(k, t_k\right) = \frac{m_{\text{left}}}{m}\text{MSE}_{\text{left}} + \frac{m_{\text{right}}}{m}\text{MSE}_{\text{right}} \quad \text{where} \begin{cases} \text{MSE}_{\text{node}} = \sum_{i \in \text{node}} \left(\hat{y}_{\text{node}} - y^{(i)}\right)^2 \\ \hat{y}_{\text{node}} = \dfrac{1}{m_{\text{node}}} \sum_{i \in \text{node}} y^{(i)} \end{cases}$$

Ejemplo


x1 <= 0.197
mse = 0.098
samples = 200
value = 0.354
True
False
x1 <= 0.092
mse = 0.038
samples = 44
value = 0.689
x1 <= 0.772
mse = 0.074
samples = 156
value = 0.259
mse = 0.018
samples = 20
value = 0.854
mse = 0.013
samples = 24
value = 0.552
mse = 0.015
samples = 110
value = 0.111
mse = 0.036
samples = 46
value = 0.615


max_depth=2
max_depth=3
$\hat{y}$
Depth=0
Depth=1
Depth=1
Depth=2
y
x_1
x_1

Feature importance



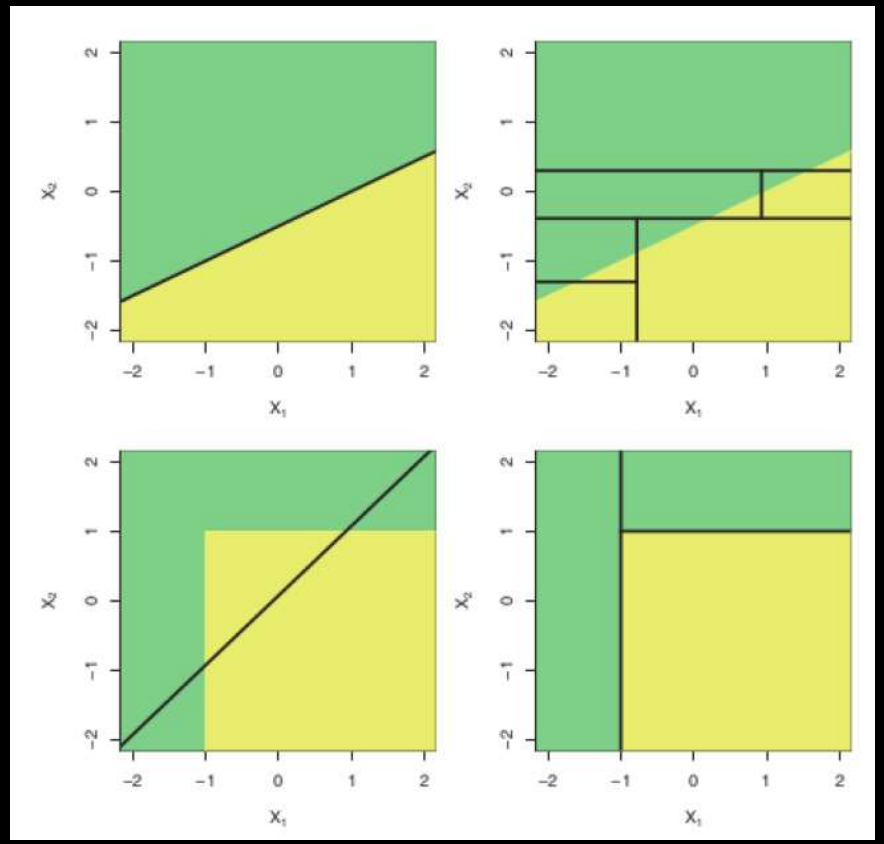
	Feature importance
RM	0.656763
LSTAT	0.226307
DIS	0.078884
NOX	0.031580
PTRATIO	0.006466
CRIM	0.000000
ZN	0.000000
INDUS	0.000000
CHAS	0.000000
AGE	0.000000
RAD	0.000000
TAX	0.000000
B	0.000000

- El árbol de decisión es un modelo intrínsecamente explicable a través del atributo features_importance_
- Este atributo devuelve, una vez entrenado el modelo, la importancia relativa (de 0 a 1) de cada variable de entrada a efectos de predecir el target. Cuanto más cerca de 1, mayor es la importancia de la variable a estos efectos.
- La importancia relativa de cada variable se calcula como como la disminución de la impureza del nodo de decisión ponderada por la probabilidad de alcanzar ese nodo.
- Este mismo enfoque, con algún ajuste, se puede utilizar con algoritmos que utilizan conjuntos de árboles de decisión, como el random forest y los algoritmos de gradient boosting.

¿Cuándo usar árboles de decisión?

Trees vs Linear Regression

La importancia del análisis exploratorio



Ventajas e Inconvenientes

Ventajas

- Computacionalmente son eficientes
- Requiere muy poco preprocesado (no hace falta estandarizar), solo tartar los missings.
- Son robustos frente a outliers.
- Resistentes a variables irrelevantes.
- Si son cortos, son muy sencillos de explicar e interpretables. Manejan un solo parametro (tree size).
- Se pueden visualizar y de forma muy intuitiva. Muestran el proceso de toma de decisiones
- Se puede usar con pocos o muchos datos de entrenamiento.

Inconvenientes

- No es muy preciso.
- **Inestabilidad.** Muy sensible a pequeñas variaciones en los datos de entrenamiento.
- Muy propenso al **overfitting** si no se controla el tamaño del árbol.
- Arboles grandes son difíciles de interpretar.
- Cada split depende del anterior, por lo que **los errores** cometidos se propagan.

A efectos prácticos…

- Algoritmo con una precisión muy mejorable por modelos más complejos como los ensembles o las redes neuronales.
- Sin embargo, es interesante conocerlo y saber interpretarlo por dos razones:
  - Es un buen modelo para resolver problemas de negocio, en la medida en que obtenga un buen resultado para el conjunto de datos analizados.
    - Su funcionamiento es relativamente sencillo de explicar.
    - Se puede visualizar de forma bastante intuitiva y nos muestra el proceso de toma de decisiones. Esto ayuda mucho a la comprensión de las predicciones por los usuarios de negocio (salvo que sea muy profundo).
    - Es un modelo intrínsecamente explicable a través del atributo *features_importance_*.
  - Es necesario para comprender algoritmos más complejos consistentes en la combinación de arboles de decisión, como el random forest, gradient boosting o XG boost.

¡Demo time!

http://www.r2d3.us/visual-intro-to-machine-learning-part-1/