Machine Learning para Inteligencia Artificial

Regularización en Árboles de Decisión

Universidad ORT Uruguay

23 de Abril, 2025

Regularización

- Modificación a un algoritmo de aprendizaje que pretende reducir el error verdadero (en $\mathcal{D}$) pero no su error empírico (en T).

- Consiste en agregar términos de penalización a la función de costo para desalentar modelos complejos:

$$\begin{pmatrix} \text{Costo} \\ \text{nuevo} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \text{Costo} \\ \text{original} \end{pmatrix} + \alpha \times \begin{pmatrix} \text{Penalización} \\ \text{a la complejidad} \end{pmatrix}$$

- α es un parámetro que controla la importancia del término de regularización.

Regularización en árboles: Cost Complexity Pruning

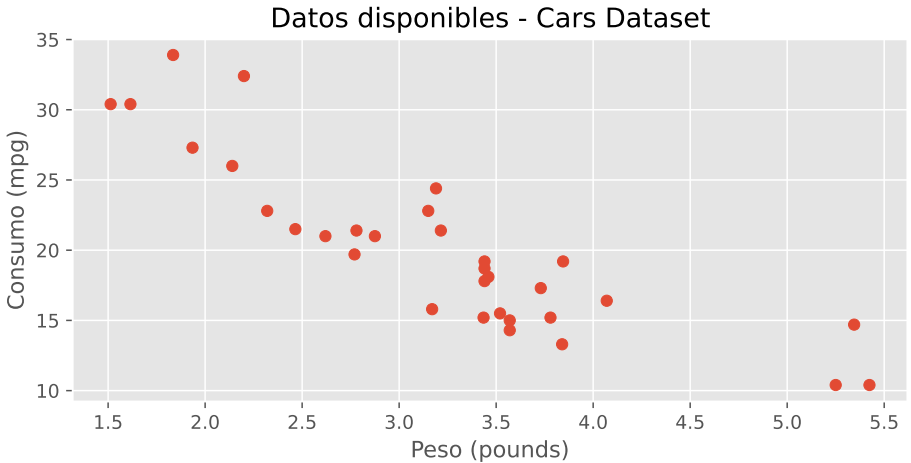
- En un Árbol de Regresión, la MSE se puede escribir:

$$\text{MSE}_T(h) = \sum_{H \in \text{hojas}(h)} \frac{|H|}{|T|} \cdot \text{Var}(y; H)$$

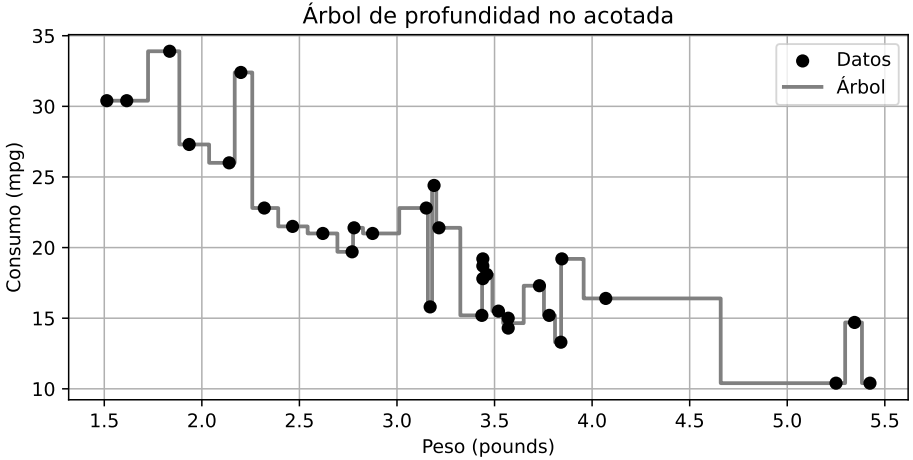
El nuevo costo regularizado es:

$$\boxed{\text{Cost}_T^{\alpha}(h) = \text{MSE}_T(h) + \alpha \cdot \left|\text{hojas}(h)\right|}$$

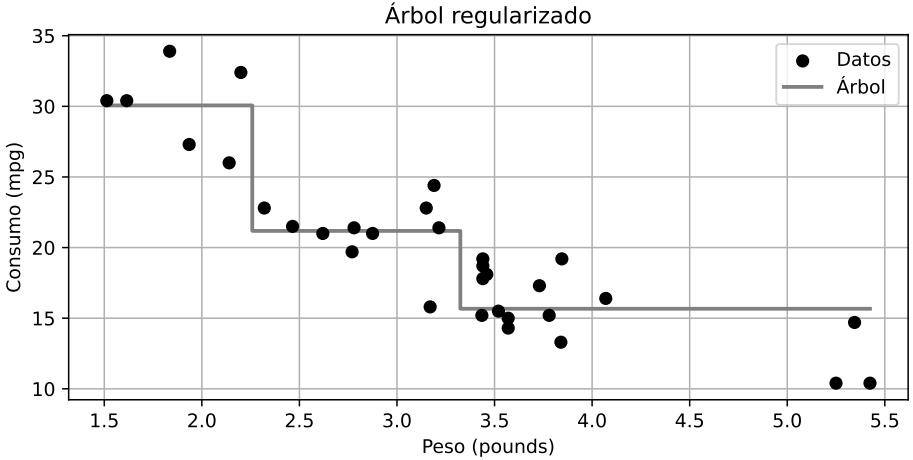
Ejemplo - Cars Dataset



Ejemplo - Árbol sin regularizar



Ejemplo - Árbol regularizado con el mejor α



Procedimiento para buscar el mejor α

- **Input**: A árbol completo
- **Output**: Lista de sub-árboles $[A_0, A_1, \ldots, A_k]$ y alphas $[\alpha_0, \ldots, \alpha_k]$

1. Inicializar $\text{Lista}_A = [A]$ y $\text{Lista}_\alpha = [0]$.
2. Mientras A tiene nodos internos repetir:
   - 2.1 Inicializar $\alpha_{\min} = \infty$, $n_{\min} = \text{None}$
   - 2.2 Para cada nodo interno $n \in A$ repetir:
     - 2.2.1 $A_n =$ sub-árbol con raíz en n; $M_n = \text{MSE}(n)$ como hoja; $M(A_n) = \text{MSE}(A_n)$
     - 2.2.2 Si $|A_n| > 1$: $\alpha_n = (M_n - M(A_n))/(|A_n| - 1)$.
       Si $\alpha_n < \alpha_{\min}$: $\alpha_{\min} = \alpha_n$; $n_{\min} = n$
   - 2.3 Actualizar A podando A_n a una hoja para $n = n_{\min}$.
   - 2.4 Agregar A a Lista_A y $\alpha_{\min}$ a Lista_α.

De esta lista se selecciona el mejor α con CV

¿Por qué funciona? (OPCIONAL!)

- Si $\alpha > \alpha_n$:

$$\begin{aligned} M(A_n) + \alpha|A_n| &= M(A_n) + \alpha_n|A_n| + (\alpha - \alpha_n)|A_n| \\ &> M_n + \alpha_n \cdot 1 + (\alpha - \alpha_n)|A_n| \\ &> M_n + \alpha_n \cdot 1 + (\alpha - \alpha_n) \\ &= M_n + \alpha \cdot 1. \end{aligned}$$

- Es decir

  (Costo penalizado de árbol podado) $<$ (Costo penalizado de árbol s/podar)

  para todo $\alpha > \alpha_n$.

Bibliografía

- An introduction to statistical learning with applications in Python. Capítulo 8.1.