Árvores de Regressão : Consistem na partição do espaço das covariáveis em regiões retangulares e no ajuste de um modelo simples (como uma constante) em cada uma delas, grande variedade de algoritmos.

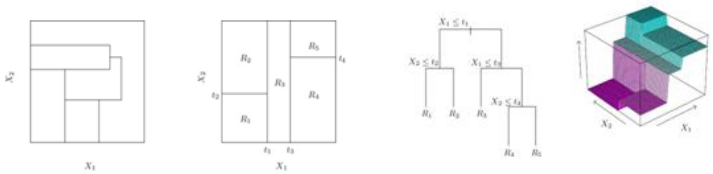
O termo árvore de regressão é aplicado ao caso de variável resposta numérica e o termo árvore de classificação para o caso de variável resposta categórica. Em ambos os casos, as covariáveis podem ser categóricas e/ou numéricas.

Dentre os principais atrativos de árvores de classificação e regressão, destacam-se:
Baseiam-se em um conjunto mínimo de pressupostos; ,,,Servem como alternativa a diversos métodos estatísticos de classificação e regressão; ,,,
Permitem lidar com dados de estrutura complexa (elevada dimensão, dados ausentes, interações de diferentes ordens entre as covariáveis); ,,,
Produzem resultados simples e de fácil interpretação.

Seja y a variável resposta e x = (x1, x2, ..., xp) o vetor de covariáveis. Considere uma amostra de n observações de y e x.
O método CART inicia com a partição da amostra original em duas, segundo alguma regra do tipo
xk ≤ c | xk > c, ,,, para alguma covariável xk numérica e c algum valor amostrado de xk , ou
xk ∈ A | xk ∈/ A, ,,, para uma variável xk categórica e A uma particular categoria (ou um subconjunto de categorias) de xk .

Uma vez efetuada a partição, temos o espaço das covariáveis dividido em duas regiões, R1 e R2.
A variável responsável pela partição e o ponto de corte são escolhidos de forma que proporcionem o melhor ajuste possível para y .
Na sequência, o processo de partição é repetido em R1 e em R2, novamente buscando a variável e respectivo ponto de corte que proporcionem melhor ajuste.

Neste passo, temos quatro regiões delimitadas no espaço das covariáveis: R3 e R4 (formadas a partir de R1); R5 e R6 (formadas a partir de R2).
O processo é repetido sucessivamente. No final, teremos M regiões delimitadas no espaço das covariáveis, que denotaremos por
R1, R2, ..., RM . O resultado da aplicação do método CART pode ser representado por um diagrama contendo as partições e os grupos constituídos (nós), que denominamos árvore.



Podemos ainda expressar o resultado da aplicação do algoritmo CART por meio de um modelo de regressão na forma:

$$\hat{y} = \hat{f}(\boldsymbol{x}) = \sum_{m=1}^{M} c_m I\{\boldsymbol{x} \in R_m\},$$

sendo c_m uma constante ajustada na região R_m, $i = 1, 2, ..., M$.

Seleção das Partições – 6 e 7 processo de poda.

- Para árvores de regressão, é usual considerar a soma de quadrados de resíduos como critério de minimização para a partição das amostras (nós):

$$SQR = \sum_{i=1}^{n} (y_i - \hat{f}(\boldsymbol{x}_i))^2. \quad (2)$$

- Neste caso, temos que a melhor escolha para c_m em

$$\hat{y} = \hat{f}(\boldsymbol{x}) = \sum_{m=1}^{M} c_m I\{\boldsymbol{x} \in R_m\}, \quad (3)$$

simplesmente a média dos y_i's em R_m:

$$\hat{c}_m = \frac{1}{n_m} \sum_{x_i \in R_m} y_i. \quad (4)$$

- Suponha a partição de um nó (O) em dois novos nós (L e R) segundo uma particular regra (variável e ponto de corte). A avaliação da partição se baseia na redução da soma de quadrados de resíduos:

$$\Delta SQR = SQR_O - (\frac{n_L}{n_O} SQR_L + \frac{n_R}{n_O} SQR_R), \quad (5)$$

sendo n_O, n_L e n_R os números de observações nos respectivos nós.

- A partição que produzir menor valor para ΔSQR deve ser executada.
- A regra de partição apresentada é aplicada sucessivamente aos nós originados até atingir algum critério de parada (número mínimo de observações por nó ou nos nós a serem partidos, número máximo de níveis na árvore...).

- Após obtida uma grande árvore, inicia-se o processo de poda, em que as partições são sucessivamente desfeitas até voltar à amostra original.
- O processo de poda baseia-se na seguinte função de custo-complexidade:

$$R_\alpha(T) = R(T) + \alpha|T|, \quad (6)$$

em que T representa uma árvore, $|T|$ o número de nós finais (complexidade) e $R(T)$ a soma de quadrados de resíduos da árvore:

$$R(T) = \sum_{m=1}^{M} \frac{n_m}{n} SQR_m. \quad (7)$$

O parâmetro α na função de custo-complexidade controla a complexidade do modelo.
Para diferentes valores de alfa tem-se diferentes árvores minimizando R alfa(T).
Tomando alfa = 0 tem-se como solução a maior árvore disponível (não podada), uma vez que não se penaliza sua complexidade.
Para alfa tendendo ao infinito tem-se penalização máxima para a complexidade e a solução é a não partição da amostra original.
Variando alfa a partir de zero tem-se uma sequência de árvores aninhadas, cada uma ótima para seu particular tamanho (número de nós finais).
É usual representar a função de custo-complexidade por meio de uma curva (versus alfa e ou |T |).

Seleção do modelo: Uma vez definida a sequência de árvores aninhadas, deve-se identificar, nessa sequência, a árvore ótima (correspondente à melhor escolha para α). Nesta etapa, é comum utilizar validação cruzada.
Seleção por *validação cruzada* é descrita na sequência:

Passo 1: Identificação de uma sequência de valores α1, α2, . . . , αk para α cada qual indicando uma das árvores na sequência aninhada como aquela que minimiza a função de custo-complexidade;
Passo 2: Dividir a base de dados em s grupos de tamanho (aproximado) s/n: G1, G2, ..., Gs ;
Passo 3: Ajustar o modelo à base completa (exceto pelas observações em Gj) e determinar T1, T2, ..., Tk ;
Passo 4: Calcular a predição para cada observação i em Gj sob cada modelo Tj , j = 1, 2, ..., k;

$$\sum_{i \in G_j} (y_i - \hat{f}_{(j)}(\boldsymbol{x}_i))^2,$$

Passo 5: Calcular a soma de quadrados dos erros de predição para o conjunto de observações em Gi :
em que f^(j)(.) denota a predição sob o modelo ajustado sem as observações em Gj .
Passo 6: Os passos 3, 4 e 5 são repetidos para cada um dos demais grupos Gj . Ao término, para cada árvore T1, T2, ..., Tk tem-se a respectiva soma de quadrados de predição obtida por validação cruzada:

$$SQVC = \sum_{j} \sum_{i \in G_j} (y_i - \hat{f}_{(j)}(\boldsymbol{x}_i))^2.$$

Pode-se então selecionar a árvore que produz menor valor de SQVC ou a menor árvore tal que seu SVQC não seja muito maior daquela que produz SQVC mínimo.
Na prática, usa-se a regra do erro padrão, em que se seleciona a menor árvore tal que seu SQVC não exceda o SQVC mínimo por mais de um erro padrão de SQVC (estimado também na validação cruzada).

Arvores de Classificação: se aplicam quando a variável resposta é categórica (binária ou politômica);
O algoritmo de árvores de classificação é semelhante ao de árvores de regressão, com algumas adaptações.

A diferença mais importante é a troca da soma de quadrados dos resíduos por alguma medida de heterogeneidade mais apropriada para dados categóricos.
Dentre as alternativas, temos os critérios de Gini e da informação, conforme apresentados na sequência.
Vamos considerar um problema de classificação em que a resposta tenha r categorias, denotadas por 1, 2, ..., r .

Considere uma amostra (ou um nó) e p1, p2, ..., pr as proporções com que cada categoria é observada.

A medida de informação (ou entropia) é definida por:

$$Inf = -2 \times \sum_{l=1}^{r} p_l \ln(p_l) \qquad (10)$$

A medida de Gini dada por:

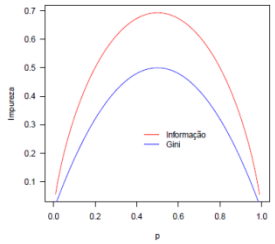
$$Gini = 1 - \sum_{l=1}^{r} p_l^2. \qquad (11)$$

Para o caso de duas categorias, em que as proporções de casos em cada uma delas são p e 1 p,
as medidas de Informação e de Gini ficam dadas por:

$$Inf = -p\ln(p) - (1-p)\ln(1-p) \qquad (12)$$

$$Gini = 1 - p^2 - (1-p)^2 = 2p(1-p). \qquad (13)$$

A Figura 1 apresenta o comportamento das medidas de informação e Gini para o caso de duas categorias.



Como pode ser observado na Figura 1, ambas as medidas são minimizadas quando os indivíduos da amostra pertencem a um mesmo grupo (pl ! 1, para algum l) e maximizadas quando as proporções são iguais nas diferentes categorias (p1 = p2 = ... = pr).
Suponha a partição de um nó (O) em dois novos nós (L e R) segundo uma particular regra (variável e ponto de corte). A avaliação da partição se baseia na redução da medida de impureza:

$$\Delta Imp = Imp_O - (\frac{n_L}{n_O} Imp_L + \frac{n_R}{n_O} Imp_R), \qquad (14)$$

em que Imp denota, genericamente, a medida de informação, de Gini ou qualquer outra medida de impureza.

Em árvores de classificação é comum classificar as observações em um nó m pela categoria mais frequente: $\hat{c}_m = \underset{l}{argmax}\, \hat{p}_{lm}, \quad (15)$
em que pˆlm representa a proporção de indivíduos da categoria l em m, l = 1, 2, ..., r .

Incorporando Perdas:
O ajuste da árvore de classificação segue os mesmos passos de uma árvore de regressão, com o ajuste de uma grande árvore, poda e seleção da árvore por validação cruzada.
Em problemas de classificação, pode ocorrer que o custo de classificação incorreta não seja o mesmo para todas as categorias da resposta.
Vamos admitir, novamente, um problema de classificação com r categorias (grupos).
Considere L (l , l j) o custo (perda) em classificar um indivíduo da categoria l na categoria l j. Obviamente, L (l , l) = 0.
Uma maneira de incorporar os custos de má-classificação baseia-se na minimização do critério de Gini generalizado, definido por:

$$Gini^* = \sum_{l} \sum_{l'} L(l, l') p_{l'} p_l. \qquad (16)$$

Para o caso de r = 2 grupos, o critério de Gini generalizado não se aplica, uma vez que o coeficiente associado a plj pl será o mesmo, L(l , l j) + L(l j, l): *Gini ∗ = L(1, 2)p1p2 + L(2, 1)p2p1 = [L(1, 2) + L(2, 1)]p1p2,* de forma que os custos simplesmente serão ignorados (tanto faz se L(1,2) > L(2,1) ou o contrário). Uma alternativa ao uso do crtitério de Gini generalizado, que funciona para r = 2, é incorporar pesos a priori.

Notas: O algoritmo tende a favorecer (proporcionar partições) covariáveis numéricas ou categóricas com grande número de categorias, uma vez que essas oferecem maior número de partições possíveis;
Na presença de dados missing, o algoritmo usa os chamados surrogate splits (ou partições substitutas), buscando, dentre as demais covariáveis, a partição com maior nível de concordância em relação àquela para a qual não se dispõe dos dados.
Árvores de classificação e regressão são altamente instáveis.
Pequenas mudanças nos dados podem gerar ajustes consideravelmente diferentes.