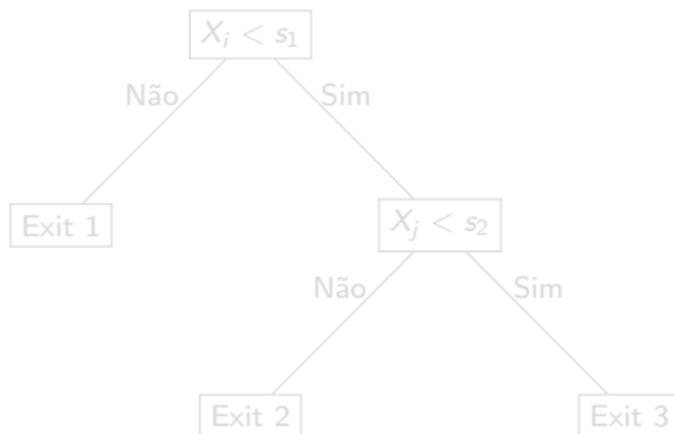


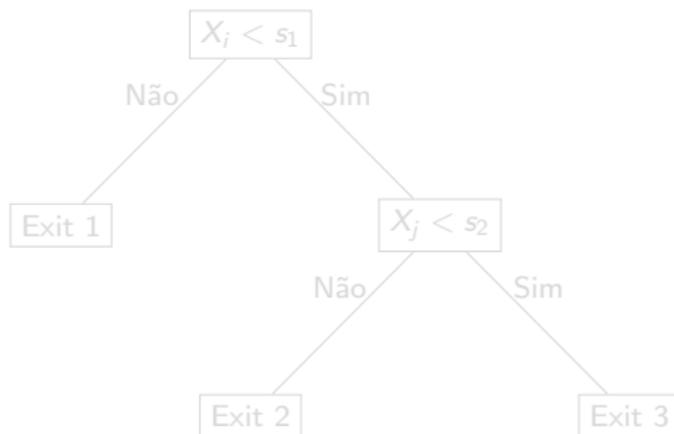
# Métodos baseados em árvores

Prof.: Eduardo Vargas Ferreira

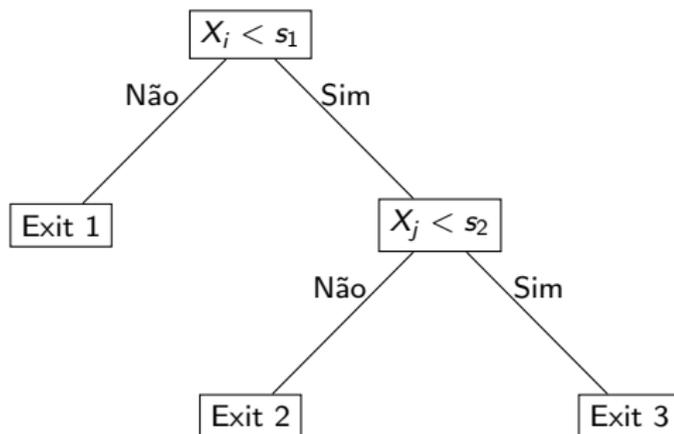
- Nesta seção vamos descrever os métodos baseados em **árvores** no contexto de regressão e classificação;
- Estes envolvem **estratificação** ou **segmentação** do espaço de predição em regiões simples;
- Como o conjunto de regras que regem as separação do espaço pode ser resumida em uma árvore, são conhecidas como **árvores de decisão**;



- Nesta seção vamos descrever os métodos baseados em **árvores** no contexto de regressão e classificação;
- Estes envolvem **estratificação** ou **segmentação** do espaço de predição em regiões simples;
- Como o conjunto de regras que regem as separação do espaço pode ser resumida em uma árvore, são conhecidas como **árvores de decisão**;



- Nesta seção vamos descrever os métodos baseados em **árvores** no contexto de regressão e classificação;
- Estes envolvem **estratificação** ou **segmentação** do espaço de predição em regiões simples;
- Como o conjunto de regras que regem as separação do espaço pode ser resumida em uma árvore, são conhecidas como **árvores de decisão**;



- ✓ Podem ser aplicado em problemas de regressão e classificação;
- ✓ Não precisa de variáveis dummy para lidar com preditores qualitativos;
- ✓ São simples e úteis para interpretação. Não temos equações (a árvore é o próprio modelo), o que torna atrativo especialmente para não estatísticos;
- ✗ São mais simples do que deveria ser, por este motivo não são competitivos com outras abordagens de aprendizado supervisionado em termos de predição;
- ✓ Por este motivo, discutiremos outros métodos que combinam várias árvores, como **bagging**, **random forests** e **boosting**;

**Observação:** ao combinar um grande número de árvores pode resultar em melhorias na predição, à custa da perda da interpretabilidade.

- ✓ Podem ser aplicado em problemas de regressão e classificação;
- ✓ Não precisa de variáveis dummy para lidar com preditores qualitativos;
- ✓ São simples e úteis para interpretação. Não temos equações (a árvore é o próprio modelo), o que torna atrativo especialmente para não estatísticos;
- ✗ São mais simples do que deveria ser, por este motivo não são competitivos com outras abordagens de aprendizado supervisionado em termos de predição;
- ✓ Por este motivo, discutiremos outros métodos que combinam várias árvores, como **bagging**, **random forests** e **boosting**;

**Observação:** ao combinar um grande número de árvores pode resultar em melhorias na predição, à custa da perda da interpretabilidade.

- ✓ Podem ser aplicado em problemas de regressão e classificação;
- ✓ Não precisa de variáveis dummy para lidar com preditores qualitativos;
- ✓ São simples e úteis para interpretação. Não temos equações (a árvore é o próprio modelo), o que torna atrativo especialmente para não estatísticos;

✗ São mais simples do que deveria ser, por este motivo não são competitivos com outras abordagens de aprendizado supervisionado em termos de predição;

- ✓ Por este motivo, discutiremos outros métodos que combinam várias árvores, como **bagging**, **random forests** e **boosting**;

**Observação:** ao combinar um grande número de árvores pode resultar em melhorias na predição, à custa da perda da interpretabilidade.

- ✓ Podem ser aplicado em problemas de regressão e classificação;
- ✓ Não precisa de variáveis dummy para lidar com preditores qualitativos;
- ✓ São simples e úteis para interpretação. Não temos equações (a árvore é o próprio modelo), o que torna atrativo especialmente para não estatísticos;
- ✗ São mais simples do que deveria ser, por este motivo não são competitivos com outras abordagens de aprendizado supervisionado em termos de predição;
- ✓ Por este motivo, discutiremos outros métodos que combinam várias árvores, como **bagging**, **random forests** e **boosting**;

**Observação:** ao combinar um grande número de árvores pode resultar em melhorias na predição, à custa da perda da interpretabilidade.

- ✓ Podem ser aplicado em problemas de regressão e classificação;
- ✓ Não precisa de variáveis dummy para lidar com preditores qualitativos;
- ✓ São simples e úteis para interpretação. Não temos equações (a árvore é o próprio modelo), o que torna atrativo especialmente para não estatísticos;
- ✗ São mais simples do que deveria ser, por este motivo não são competitivos com outras abordagens de aprendizado supervisionado em termos de predição;
- ✓ Por este motivo, discutiremos outros métodos que combinam várias árvores, como **bagging**, **random forests** e **boosting**;

Observação: ao combinar um grande número de árvores pode resultar em melhorias na predição, à custa da perda da interpretabilidade.

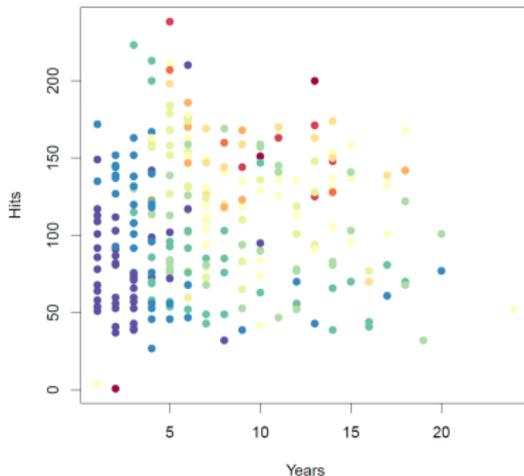
- ✓ Podem ser aplicado em problemas de regressão e classificação;
- ✓ Não precisa de variáveis dummy para lidar com preditores qualitativos;
- ✓ São simples e úteis para interpretação. Não temos equações (a árvore é o próprio modelo), o que torna atrativo especialmente para não estatísticos;
- ✗ São mais simples do que deveria ser, por este motivo não são competitivos com outras abordagens de aprendizado supervisionado em termos de predição;
- ✓ Por este motivo, discutiremos outros métodos que combinam várias árvores, como **bagging**, **random forests** e **boosting**;

**Observação:** ao combinar um grande número de árvores pode resultar em melhorias na predição, à custa da perda da interpretabilidade.

# Exemplo: Hitters data set - Baseball salary



- Queremos prever o salário dos jogadores (**Salary**) baseado no tempo em que está na *major leagues* (**Years**) e número de acertos no ano (**Hits**);
- O salário codificado como baixo é representado pelas cores azul e verde, e alto pelas cores amarelo e vermelho;
- Como podemos estratificar estes dados?



# Exemplo: Hitters data set - Baseball salary



- No topo temos todos os dados;
- $Years < 4.5$  representa a primeira partição;
- O comprimento de cada ramo representa o decréscimo na  $SQR_{res}$ ;
- Por isso, temos “braços” cada vez menores;
- Ao final chega-se em três caixas: salário baixo, médio e alto;



- Note que  $Hits$  foi importante para determinar o salário médio de jogadores com mais de 4.5 anos na *major leagues*;

# Exemplo: Hitters data set - Baseball salary



- No topo temos todos os dados;
- $Years < 4.5$  representa a primeira partição;
- O comprimento de cada ramo representa o decréscimo na  $SQR_{res}$ ;
- Por isso, temos “braços” cada vez menores;
- Ao final chega-se em três caixas: salário baixo, médio e alto;



- Note que  $Hits$  foi importante para determinar o salário médio de jogadores com mais de 4.5 anos na *major leagues*;

# Exemplo: Hitters data set - Baseball salary



- No topo temos todos os dados;
- $Years < 4.5$  representa a primeira partição;
- O comprimento de cada ramo representa o decréscimo na SQRes;
- Por isso, temos “braços” cada vez menores;
- Ao final chega-se em três caixas: salário baixo, médio e alto;
- Note que  $Hits$  foi importante para determinar o salário médio de jogadores com mais de 4.5 anos na *major leagues*;



# Exemplo: Hitters data set - Baseball salary



- No topo temos todos os dados;
- $Years < 4.5$  representa a primeira partição;
- O comprimento de cada ramo representa o decréscimo na SQRes;
- Por isso, temos “braços” cada vez menores;



- Ao final chega-se em três caixas: salário baixo, médio e alto;
- Note que  $Hits$  foi importante para determinar o salário médio de jogadores com mais de 4.5 anos na *major leagues*;

# Exemplo: Hitters data set - Baseball salary



- No topo temos todos os dados;
- $Years < 4.5$  representa a primeira partição;
- O comprimento de cada ramo representa o decréscimo na SQRes;
- Por isso, temos “braços” cada vez menores;
- Ao final chega-se em três caixas: salário baixo, médio e alto;



- Note que  $Hits$  foi importante para determinar o salário médio de jogadores com mais de 4.5 anos na *major leagues*;

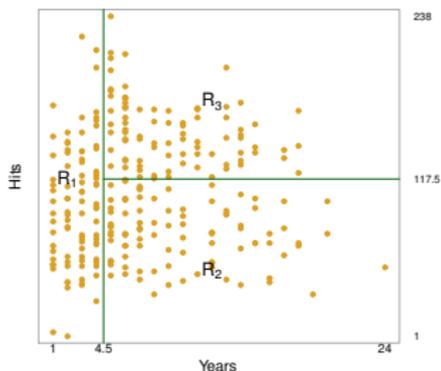
# Exemplo: *Hitters* data set - Baseball salary



- No topo temos todos os dados;
- $Years < 4.5$  representa a primeira partição;
- O comprimento de cada ramo representa o decréscimo na SQRes;
- Por isso, temos “braços” cada vez menores;
- Ao final chega-se em três caixas: salário baixo, médio e alto;



- Note que *Hits* foi importante para determinar o salário médio de jogadores com mais de 4.5 anos na *major leagues*;

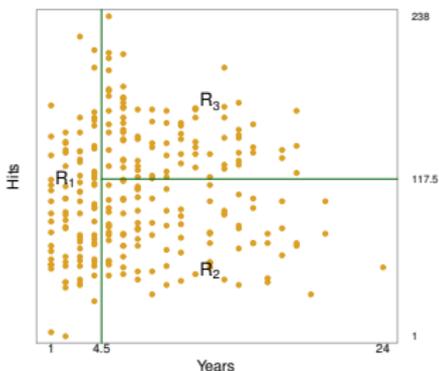


$$R_1 = \{X | \text{Years} < 4.5\}$$

$$R_2 = \{X | \text{Years} \geq 4.5, \text{Hits} < 117.5\}$$

$$R_3 = \{X | \text{Years} \geq 4.5, \text{Hits} \geq 117.5\}$$

- **Years** é o fator mais importante para determinar **Salary**;
- Dado que o jogador tem pouca experiência, o número de **Hits** no ano anterior não parece influenciar no salário;
- Mas, entre os jogadores que estão na *major leagues* por mais de 4.5 anos, o número de **Hits** afeta positivamente no salário;
- Certamente, esta abordagem é uma simplificação exagerada dos modelos de regressão. Todavia, é fácil de exibir, interpretar e explicar;

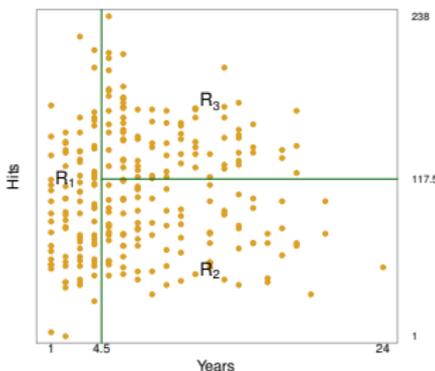


$$R_1 = \{X | \text{Years} < 4.5\}$$

$$R_2 = \{X | \text{Years} \geq 4.5, \text{Hits} < 117.5\}$$

$$R_3 = \{X | \text{Years} \geq 4.5, \text{Hits} \geq 117.5\}$$

- **Years** é o fator mais importante para determinar **Salary**;
- Dado que o jogador tem pouca experiência, o número de **Hits** no ano anterior não parece influenciar no salário;
- Mas, entre os jogadores que estão na *major leagues* por mais de 4.5 anos, o número de **Hits** afeta positivamente no salário;
- Certamente, esta abordagem é uma simplificação exagerada dos modelos de regressão. Todavia, é fácil de exibir, interpretar e explicar;

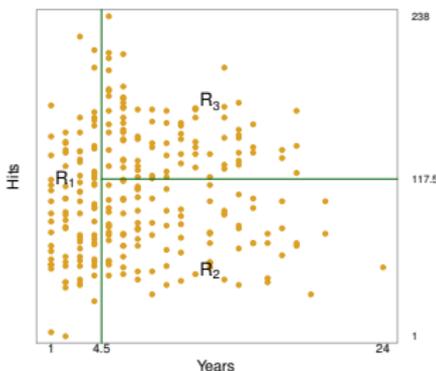


$$R_1 = \{X | \text{Years} < 4.5\}$$

$$R_2 = \{X | \text{Years} \geq 4.5, \text{Hits} < 117.5\}$$

$$R_3 = \{X | \text{Years} \geq 4.5, \text{Hits} \geq 117.5\}$$

- **Years** é o fator mais importante para determinar **Salary**;
- Dado que o jogador tem pouca experiência, o número de **Hits** no ano anterior não parece influenciar no salário;
- Mas, entre os jogadores que estão na *major leagues* por mais de 4.5 anos, o número de **Hits** afeta positivamente no salário;
- Certamente, esta abordagem é uma simplificação exagerada dos modelos de regressão. Todavia, é fácil de exibir, interpretar e explicar;

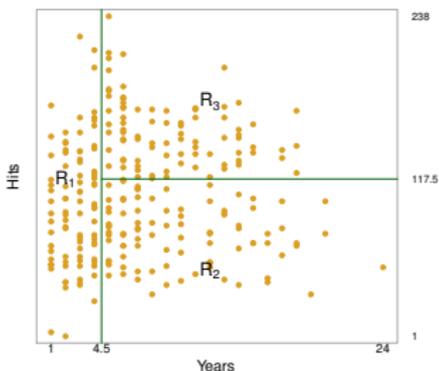


$$R_1 = \{X | \text{Years} < 4.5\}$$

$$R_2 = \{X | \text{Years} \geq 4.5, \text{Hits} < 117.5\}$$

$$R_3 = \{X | \text{Years} \geq 4.5, \text{Hits} \geq 117.5\}$$

- **Years** é o fator mais importante para determinar **Salary**;
- Dado que o jogador tem pouca experiência, o número de **Hits** no ano anterior não parece influenciar no salário;
- Mas, entre os jogadores que estão na *major leagues* por mais de 4.5 anos, o número de **Hits** afeta positivamente no salário;
- Certamente, esta abordagem é uma simplificação exagerada dos modelos de regressão. Todavia, é fácil de exibir, interpretar e explicar;



$$R_1 = \{X | \text{Years} < 4.5\}$$

$$R_2 = \{X | \text{Years} \geq 4.5, \text{Hits} < 117.5\}$$

$$R_3 = \{X | \text{Years} \geq 4.5, \text{Hits} \geq 117.5\}$$

- **Years** é o fator mais importante para determinar **Salary**;
- Dado que o jogador tem pouca experiência, o número de **Hits** no ano anterior não parece influenciar no salário;
- Mas, entre os jogadores que estão na *major leagues* por mais de 4.5 anos, o número de **Hits** afeta positivamente no salário;
- Certamente, esta abordagem é uma simplificação exagerada dos modelos de regressão. Todavia, é fácil de exibir, interpretar e explicar;

- A construção da árvore de decisão é composta por dois passos:
  - 1 Dividimos o espaço dos preditores  $X_1, X_2, \dots, X_p$  em  $J$  regiões distintas,  $R_1, R_2, \dots, R_J$ ;
  - 2 Para cada observação que caia na região  $R_j$  fazemos a predição, que é a resposta média para as observações de treino em  $R_j$ .
- P. ex., suponha que no Passo 1 obtemos duas regiões,  $R_1$  e  $R_2$ , e a resposta média da região 1 é 10, enquanto da região 2 é 20;
- Assim, dada uma observação  $X = x$ , se  $x \in R_1$  prevemos o valor como 10, caso contrário como 20;
- Mas, como construir as regiões  $R_1, \dots, R_J$ ?

- A construção da árvore de decisão é composta por dois passos:
  - 1 Dividimos o espaço dos preditores  $X_1, X_2, \dots, X_p$  em  $J$  regiões distintas,  $R_1, R_2, \dots, R_J$ ;
  - 2 Para cada observação que caia na região  $R_j$  fazemos a predição, que é a resposta média para as observações de treino em  $R_j$ .
- P. ex., suponha que no Passo 1 obtemos duas regiões,  $R_1$  e  $R_2$ , e a resposta média da região 1 é 10, enquanto da região 2 é 20;
- Assim, dada uma observação  $X = x$ , se  $x \in R_1$  prevemos o valor como 10, caso contrário como 20;
- Mas, como construir as regiões  $R_1, \dots, R_J$ ?

# Como o algoritmo funciona?



- A construção da árvore de decisão é composta por dois passos:
  - 1 Dividimos o espaço dos preditores  $X_1, X_2, \dots, X_p$  em  $J$  regiões distintas,  $R_1, R_2, \dots, R_J$ ;
  - 2 Para cada observação que caia na região  $R_j$  fazemos a predição, que é a resposta média para as observações de treino em  $R_j$ .
- P. ex., suponha que no Passo 1 obtemos duas regiões,  $R_1$  e  $R_2$ , e a resposta média da região 1 é 10, enquanto da região 2 é 20;
- Assim, dada uma observação  $X = x$ , se  $x \in R_1$  prevemos o valor como 10, caso contrário como 20;
- Mas, como construir as regiões  $R_1, \dots, R_J$ ?

- A construção da árvore de decisão é composta por dois passos:
  - 1 Dividimos o espaço dos preditores  $X_1, X_2, \dots, X_p$  em  $J$  regiões distintas,  $R_1, R_2, \dots, R_J$ ;
  - 2 Para cada observação que caia na região  $R_j$  fazemos a predição, que é a resposta média para as observações de treino em  $R_j$ .
- P. ex., suponha que no Passo 1 obtemos duas regiões,  $R_1$  e  $R_2$ , e a resposta média da região 1 é 10, enquanto da região 2 é 20;
- Assim, dada uma observação  $X = x$ , se  $x \in R_1$  prevemos o valor como 10, caso contrário como 20;
- Mas, como construir as regiões  $R_1, \dots, R_J$ ?

- A construção da árvore de decisão é composta por dois passos:
  - 1 Dividimos o espaço dos preditores  $X_1, X_2, \dots, X_p$  em  $J$  regiões distintas,  $R_1, R_2, \dots, R_J$ ;
  - 2 Para cada observação que caia na região  $R_j$  fazemos a predição, que é a resposta média para as observações de treino em  $R_j$ .
- P. ex., suponha que no Passo 1 obtemos duas regiões,  $R_1$  e  $R_2$ , e a resposta média da região 1 é 10, enquanto da região 2 é 20;
- Assim, dada uma observação  $X = x$ , se  $x \in R_1$  prevemos o valor como 10, caso contrário como 20;
- Mas, como construir as regiões  $R_1, \dots, R_J$ ?

- A construção da árvore de decisão é composta por dois passos:
  - 1 Dividimos o espaço dos preditores  $X_1, X_2, \dots, X_p$  em  $J$  regiões distintas,  $R_1, R_2, \dots, R_J$ ;
  - 2 Para cada observação que caia na região  $R_j$  fazemos a predição, que é a resposta média para as observações de treino em  $R_j$ .
- P. ex., suponha que no Passo 1 obtemos duas regiões,  $R_1$  e  $R_2$ , e a resposta média da região 1 é 10, enquanto da região 2 é 20;
- Assim, dada uma observação  $X = x$ , se  $x \in R_1$  prevemos o valor como 10, caso contrário como 20;
- Mas, como construir as regiões  $R_1, \dots, R_J$ ?

# Como o algoritmo funciona?

- Em teoria, as regiões podem ter qualquer forma;
- Todavia, escolhemos dividir o espaço dos preditores em retângulos (por simplicidade e facilidade de interpretação);
- O objetivo é encontrar os retângulos  $R_1, \dots, R_J$  que minimiza a *SQRes*:

$$\sum_{j=1}^J \sum_{i \in R_j} (y_i - \hat{y}_{R_j})^2,$$

em que  $\hat{y}_{R_j}$  é a resposta média das observações de treino dentro do  $j$ -ésimo retângulo.

- Infelizmente, é computacionalmente inviável considerar toda possível partição do espaço em  $J$  retângulos;
- Por esta razão, utilizamos a abordagem da **divisão binária recursiva** (ou *top-down approach*).

# Como o algoritmo funciona?



- Em teoria, as regiões podem ter qualquer forma;
- Todavia, escolhemos dividir o espaço dos preditores em retângulos (por simplicidade e facilidade de interpretação);
- O objetivo é encontrar os retângulos  $R_1, \dots, R_J$  que minimiza a *SQR*es:

$$\sum_{j=1}^J \sum_{i \in R_j} (y_i - \hat{y}_{R_j})^2,$$

em que  $\hat{y}_{R_j}$  é a resposta média das observações de treino dentro do  $j$ -ésimo retângulo.

- Infelizmente, é computacionalmente inviável considerar toda possível partição do espaço em  $J$  retângulos;
- Por esta razão, utilizamos a abordagem da **divisão binária recursiva** (ou *top-down approach*).

# Como o algoritmo funciona?

- Em teoria, as regiões podem ter qualquer forma;
- Todavia, escolhemos dividir o espaço dos preditores em retângulos (por simplicidade e facilidade de interpretação);
- O objetivo é encontrar os retângulos  $R_1, \dots, R_J$  que minimiza a *SQR*es:

$$\sum_{j=1}^J \sum_{i \in R_j} (y_i - \hat{y}_{R_j})^2,$$

em que  $\hat{y}_{R_j}$  é a resposta média das observações de treino dentro do  $j$ -ésimo retângulo.

- Infelizmente, é computacionalmente inviável considerar toda possível partição do espaço em  $J$  retângulos;
- Por esta razão, utilizamos a abordagem da **divisão binária recursiva** (ou *top-down approach*).

# Como o algoritmo funciona?

- Em teoria, as regiões podem ter qualquer forma;
- Todavia, escolhemos dividir o espaço dos preditores em retângulos (por simplicidade e facilidade de interpretação);
- O objetivo é encontrar os retângulos  $R_1, \dots, R_J$  que minimiza a *SQR*es:

$$\sum_{j=1}^J \sum_{i \in R_j} (y_i - \hat{y}_{R_j})^2,$$

em que  $\hat{y}_{R_j}$  é a resposta média das observações de treino dentro do  $j$ -ésimo retângulo.

- Infelizmente, é computacionalmente inviável considerar toda possível partição do espaço em  $J$  retângulos;
- Por esta razão, utilizamos a abordagem da **divisão binária recursiva** (ou *top-down approach*).

# Como o algoritmo funciona?

- Em teoria, as regiões podem ter qualquer forma;
- Todavia, escolhemos dividir o espaço dos preditores em retângulos (por simplicidade e facilidade de interpretação);
- O objetivo é encontrar os retângulos  $R_1, \dots, R_J$  que minimiza a *SQR*es:

$$\sum_{j=1}^J \sum_{i \in R_j} (y_i - \hat{y}_{R_j})^2,$$

em que  $\hat{y}_{R_j}$  é a resposta média das observações de treino dentro do  $j$ -ésimo retângulo.

- Infelizmente, é computacionalmente inviável considerar toda possível partição do espaço em  $J$  retângulos;
- Por esta razão, utilizamos a abordagem da **divisão binária recursiva** (ou *top-down approach*).

- Primeiro, para todos os preditores  $X_1, \dots, X_p$  e todos os possíveis valores do ponto de corte,  $s$ , calculamos a  $SQRes$ ;
- Em seguida, selecionamos  $X_j$  e o ponto de corte tal que a árvore resulte na menor  $SQRes$ . Ou seja, dada as regiões

$$R_1(j, s) = \{X | X_j < s\} \quad \text{e} \quad R_2(j, s) = \{X | X_j \geq s\},$$

procuramos o valor de  $j$  e  $s$  que minimize a equação

$$\sum_{i: x_j \in R_1(j, s)} (y_i - \hat{y}_{R_1})^2 + \sum_{i: x_j \in R_2(j, s)} (y_i - \hat{y}_{R_2})^2,$$

- Repetimos o processo agora com a partição dos dados;
- E paramos quando algum critério seja alcançado (p.ex., até que nenhuma região tenha mais de 5 observações).

- Primeiro, para todos os preditores  $X_1, \dots, X_p$  e todos os possíveis valores do ponto de corte,  $s$ , calculamos a  $SQRes$ ;
- Em seguida, selecionamos  $X_j$  e o ponto de corte tal que a árvore resulte na menor  $SQRes$ . Ou seja, dada as regiões

$$R_1(j, s) = \{X | X_j < s\} \quad \text{e} \quad R_2(j, s) = \{X | X_j \geq s\},$$

procuramos o valor de  $j$  e  $s$  que minimize a equação

$$\sum_{i: x_i \in R_1(j, s)} (y_i - \hat{y}_{R_1})^2 + \sum_{i: x_i \in R_2(j, s)} (y_i - \hat{y}_{R_2})^2,$$

- Repetimos o processo agora com a partição dos dados;
- E paramos quando algum critério seja alcançado (p.ex., até que nenhuma região tenha mais de 5 observações).

# Divisão binária recursiva

- Primeiro, para todos os preditores  $X_1, \dots, X_p$  e todos os possíveis valores do ponto de corte,  $s$ , calculamos a  $SQRes$ ;
- Em seguida, selecionamos  $X_j$  e o ponto de corte tal que a árvore resulte na menor  $SQRes$ . Ou seja, dada as regiões

$$R_1(j, s) = \{X | X_j < s\} \quad \text{e} \quad R_2(j, s) = \{X | X_j \geq s\},$$

procuramos o valor de  $j$  e  $s$  que minimize a equação

$$\sum_{i: x_i \in R_1(j, s)} (y_i - \hat{y}_{R_1})^2 + \sum_{i: x_i \in R_2(j, s)} (y_i - \hat{y}_{R_2})^2,$$

- Repetimos o processo agora com a partição dos dados;
- E paramos quando algum critério seja alcançado (p.ex., até que nenhuma região tenha mais de 5 observações).

# Divisão binária recursiva

- Primeiro, para todos os preditores  $X_1, \dots, X_p$  e todos os possíveis valores do ponto de corte,  $s$ , calculamos a  $SQR_{es}$ ;
- Em seguida, selecionamos  $X_j$  e o ponto de corte tal que a árvore resulte na menor  $SQR_{es}$ . Ou seja, dada as regiões

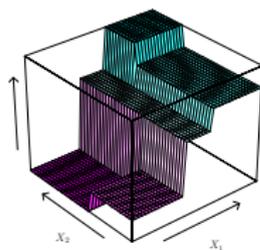
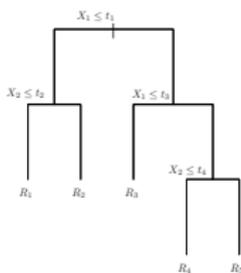
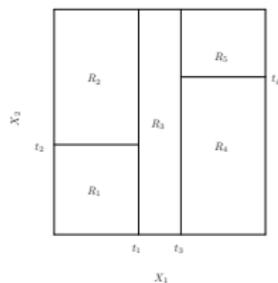
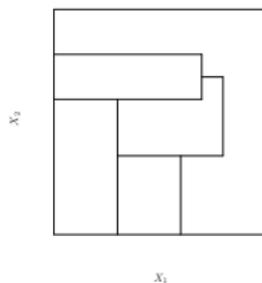
$$R_1(j, s) = \{X | X_j < s\} \quad \text{e} \quad R_2(j, s) = \{X | X_j \geq s\},$$

procuramos o valor de  $j$  e  $s$  que minimize a equação

$$\sum_{i: x_j \in R_1(j, s)} (y_i - \hat{y}_{R_1})^2 + \sum_{i: x_j \in R_2(j, s)} (y_i - \hat{y}_{R_2})^2,$$

- Repetimos o processo agora com a partição dos dados;
- E paramos quando algum critério seja alcançado (p.ex., até que nenhuma região tenha mais de 5 observações).

- Abaixo um exemplo com cinco regiões. Note que o gráfico superior esquerdo não resulta em uma divisão binária recursiva.



- Se o modelo se adaptar muito aos dados (**overfit**), o processo anterior pode produzir boas predições no treino, e um mau desempenho no teste;
- Sendo assim, árvores menores (com menos regiões), embora apresente maior viés, conduz à menor variabilidade e melhor interpretação;
- O processo de **poda da árvore** é semelhante ao Lasso, i.e., continuamos a penalizar o modelo pela sua complexidade;
- Se antes buscávamos  $\beta$ 's pequenos para evitar o *overfit*, agora penalizamos pelo número de regiões;
- A estratégia é a partir de uma grande árvore  $T_0$  podá-la até obter uma **subárvore ótima**.
- Poderíamos decidir sobre a melhor através da validação cruzada. Todavia, pela quantidade de possíveis subárvores, isto é muito custoso;
- Utilizamos para isto o **Cost complexity pruning**.

- Se o modelo se adaptar muito aos dados (**overfit**), o processo anterior pode produzir boas predições no treino, e um mau desempenho no teste;
- Sendo assim, árvores menores (com menos regiões), embora apresente maior viés, conduz à menor variabilidade e melhor interpretação;
- O processo de **poda da árvore** é semelhante ao Lasso, i.e., continuamos a penalizar o modelo pela sua complexidade;
- Se antes buscávamos  $\beta$ 's pequenos para evitar o *overfit*, agora penalizamos pelo número de regiões;
- A estratégia é a partir de uma grande árvore  $T_0$  podá-la até obter uma **subárvore ótima**.
- Poderíamos decidir sobre a melhor através da validação cruzada. Todavia, pela quantidade de possíveis subárvores, isto é muito custoso;
- Utilizamos para isto o **Cost complexity pruning**.

- Se o modelo se adaptar muito aos dados (**overfit**), o processo anterior pode produzir boas predições no treino, e um mau desempenho no teste;
- Sendo assim, árvores menores (com menos regiões), embora apresente maior viés, conduz à menor variabilidade e melhor interpretação;
- O processo de **poda da árvore** é semelhante ao Lasso, i.e., continuamos a penalizar o modelo pela sua complexidade;
- Se antes buscávamos  $\beta$ 's pequenos para evitar o *overfit*, agora penalizamos pelo número de regiões;
- A estratégia é a partir de uma grande árvore  $T_0$  podá-la até obter uma **subárvore ótima**.
- Poderíamos decidir sobre a melhor através da validação cruzada. Todavia, pela quantidade de possíveis subárvores, isto é muito custoso;
- Utilizamos para isto o **Cost complexity pruning**.

- Se o modelo se adaptar muito aos dados (**overfit**), o processo anterior pode produzir boas predições no treino, e um mau desempenho no teste;
- Sendo assim, árvores menores (com menos regiões), embora apresente maior viés, conduz à menor variabilidade e melhor interpretação;
- O processo de **poda da árvore** é semelhante ao Lasso, i.e., continuamos a penalizar o modelo pela sua complexidade;
- Se antes buscávamos  $\beta$ 's pequenos para evitar o *overfit*, agora penalizamos pelo número de regiões;
- A estratégia é a partir de uma grande árvore  $T_0$  podá-la até obter uma **subárvore ótima**.
- Poderíamos decidir sobre a melhor através da validação cruzada. Todavia, pela quantidade de possíveis subárvores, isto é muito custoso;
- Utilizamos para isto o **Cost complexity pruning**.

- Se o modelo se adaptar muito aos dados (**overfit**), o processo anterior pode produzir boas predições no treino, e um mau desempenho no teste;
- Sendo assim, árvores menores (com menos regiões), embora apresente maior viés, conduz à menor variabilidade e melhor interpretação;
- O processo de **poda da árvore** é semelhante ao Lasso, i.e., continuamos a penalizar o modelo pela sua complexidade;
- Se antes buscávamos  $\beta$ 's pequenos para evitar o *overfit*, agora penalizamos pelo número de regiões;
- A estratégia é a partir de uma grande árvore  $T_0$  podá-la até obter uma **subárvore ótima**.
- Poderíamos decidir sobre a melhor através da validação cruzada. Todavia, pela quantidade de possíveis subárvores, isto é muito custoso;
- Utilizamos para isto o **Cost complexity pruning**.

- Se o modelo se adaptar muito aos dados (**overfit**), o processo anterior pode produzir boas predições no treino, e um mau desempenho no teste;
- Sendo assim, árvores menores (com menos regiões), embora apresente maior viés, conduz à menor variabilidade e melhor interpretação;
- O processo de **poda da árvore** é semelhante ao Lasso, i.e., continuamos a penalizar o modelo pela sua complexidade;
- Se antes buscávamos  $\beta$ 's pequenos para evitar o *overfit*, agora penalizamos pelo número de regiões;
- A estratégia é a partir de uma grande árvore  $T_0$  podá-la até obter uma **subárvore ótima**.
- Poderíamos decidir sobre a melhor através da validação cruzada. Todavia, pela quantidade de possíveis subárvores, isto é muito custoso;
- Utilizamos para isto o **Cost complexity pruning**.

- Se o modelo se adaptar muito aos dados (**overfit**), o processo anterior pode produzir boas predições no treino, e um mau desempenho no teste;
- Sendo assim, árvores menores (com menos regiões), embora apresente maior viés, conduz à menor variabilidade e melhor interpretação;
- O processo de **poda da árvore** é semelhante ao Lasso, i.e., continuamos a penalizar o modelo pela sua complexidade;
- Se antes buscávamos  $\beta$ 's pequenos para evitar o *overfit*, agora penalizamos pelo número de regiões;
- A estratégia é a partir de uma grande árvore  $T_0$  podá-la até obter uma **subárvore ótima**.
- Poderíamos decidir sobre a melhor através da validação cruzada. Todavia, pela quantidade de possíveis subárvores, isto é muito custoso;
- Utilizamos para isto o **Cost complexity pruning**.

# Cost complexity pruning

- Considere uma sequência de árvores indexadas pelo parâmetro  $\alpha$ ;
- Para cada valor de  $\alpha$ , temos uma subárvore  $T \subset T_0$ , tal que

$$\sum_{m=1}^{|T|} \sum_{i: x_i \in R_m} (y_i - \hat{y}_{R_m})^2 + \alpha |T|$$

seja o menor possível.

- ★  $|T|$  indica o número de **terminal nodes** da árvore  $T$ ;
  - ★  $R_m$  é o retângulo correspondente ao  $m$ -ésimo *terminal node*;
  - ★  $\hat{y}_{R_m}$  é a média das observações dos dados de treino em  $R_m$ .
- Seleccionamos o valor ótimo  $\hat{\alpha}$  através de validação. Em seguida, obtemos a subárvore utilizando  $\hat{\alpha}$ ;
  - Quando  $\alpha = 0$ , a subárvore  $T$  é simplesmente  $T_0$  (a equação mede somente o erro de treinamento).

# Cost complexity pruning

- Considere uma sequência de árvores indexadas pelo parâmetro  $\alpha$ ;
- Para cada valor de  $\alpha$ , temos uma subárvore  $T \subset T_0$ , tal que

$$\sum_{m=1}^{|T|} \sum_{i: x_i \in R_m} (y_i - \hat{y}_{R_m})^2 + \alpha |T|$$

seja o menor possível.

- ★  $|T|$  indica o número de **terminal nodes** da árvore  $T$ ;
  - ★  $R_m$  é o retângulo correspondente ao  $m$ -ésimo *terminal node*;
  - ★  $\hat{y}_{R_m}$  é a média das observações dos dados de treino em  $R_m$ .
- Seleccionamos o valor ótimo  $\hat{\alpha}$  através de validação. Em seguida, obtemos a subárvore utilizando  $\hat{\alpha}$ ;
  - Quando  $\alpha = 0$ , a subárvore  $T$  é simplesmente  $T_0$  (a equação mede somente o erro de treinamento).

# Cost complexity pruning

- Considere uma sequência de árvores indexadas pelo parâmetro  $\alpha$ ;
- Para cada valor de  $\alpha$ , temos uma subárvore  $T \subset T_0$ , tal que

$$\sum_{m=1}^{|T|} \sum_{i: x_i \in R_m} (y_i - \hat{y}_{R_m})^2 + \alpha |T|$$

seja o menor possível.

- ★  $|T|$  indica o número de **terminal nodes** da árvore  $T$ ;
  - ★  $R_m$  é o retângulo correspondente ao  $m$ -ésimo *terminal node*;
  - ★  $\hat{y}_{R_m}$  é a média das observações dos dados de treino em  $R_m$ .
- Seleccionamos o valor ótimo  $\hat{\alpha}$  através de validação. Em seguida, obtemos a subárvore utilizando  $\hat{\alpha}$ ;
  - Quando  $\alpha = 0$ , a subárvore  $T$  é simplesmente  $T_0$  (a equação mede somente o erro de treinamento).

# Cost complexity pruning

- Considere uma sequência de árvores indexadas pelo parâmetro  $\alpha$ ;
- Para cada valor de  $\alpha$ , temos uma subárvore  $T \subset T_0$ , tal que

$$\sum_{m=1}^{|T|} \sum_{i: x_i \in R_m} (y_i - \hat{y}_{R_m})^2 + \alpha |T|$$

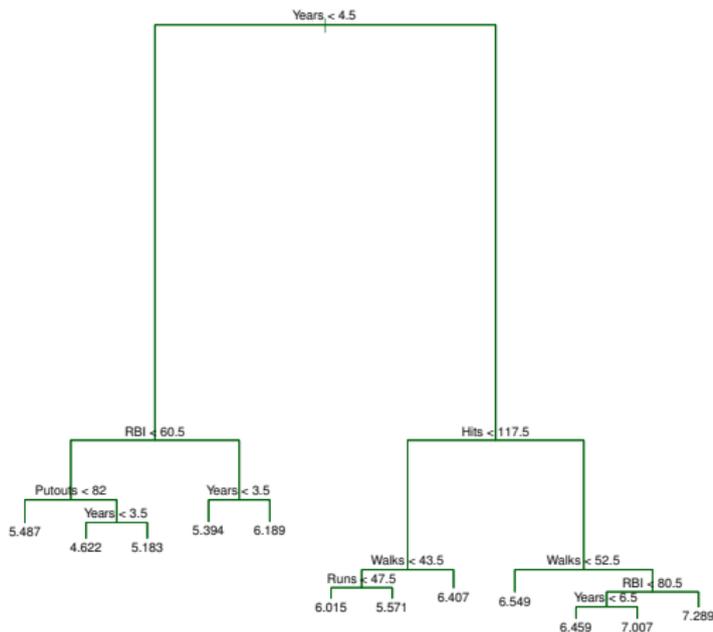
seja o menor possível.

- ★  $|T|$  indica o número de **terminal nodes** da árvore  $T$ ;
  - ★  $R_m$  é o retângulo correspondente ao  $m$ -ésimo *terminal node*;
  - ★  $\hat{y}_{R_m}$  é a média das observações dos dados de treino em  $R_m$ .
- Seleccionamos o valor ótimo  $\hat{\alpha}$  através de validação. Em seguida, obtemos a subárvore utilizando  $\hat{\alpha}$ ;
  - Quando  $\alpha = 0$ , a subárvore  $T$  é simplesmente  $T_0$  (a equação mede somente o erro de treinamento).

# Continuação do exemplo do Baseball



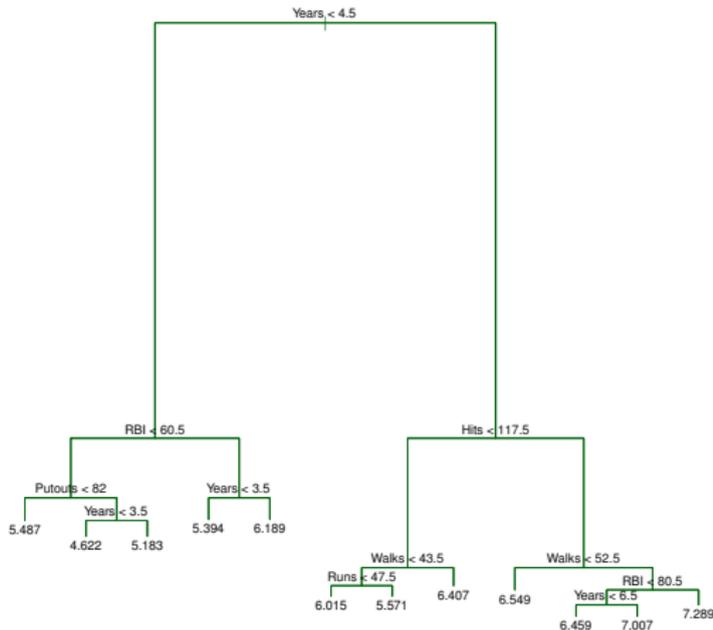
- Dividimos as 263 observações em treinamento (132) e teste (131);
- Construímos uma grande árvore nos dados de treino;
- A figura ao lado refere-se à árvore sem poda;
- Variando  $\alpha$  temos diferentes subárvores;
- E com a validação cruzada (6 – fold) encontramos  $\hat{\alpha}$ ;
- Escolhemos 6 – fold por ser múltiplo de 132;



# Continuação do exemplo do Baseball



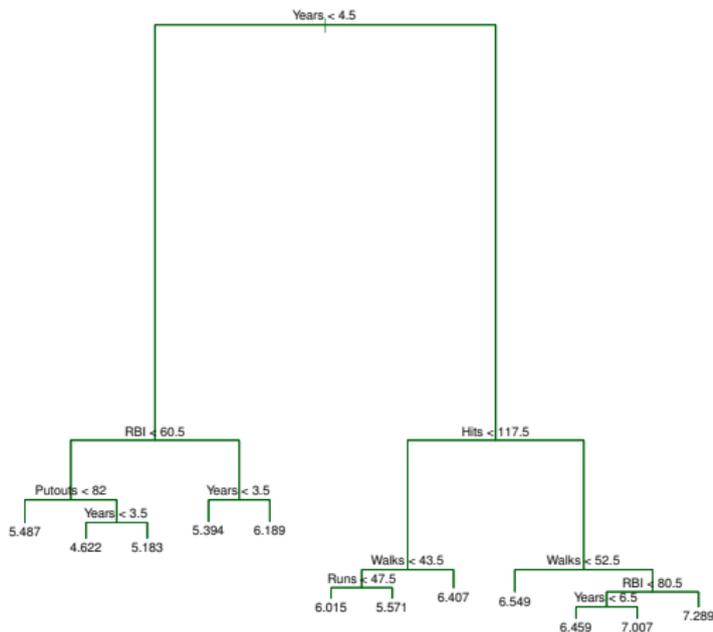
- Dividimos as 263 observações em treinamento (132) e teste (131);
- Construimos uma grande árvore nos dados de treino;
- A figura ao lado refere-se à árvore sem poda;
- Variando  $\alpha$  temos diferentes subárvores;
- E com a validação cruzada (6 – fold) encontramos  $\hat{\alpha}$ ;
- Escolhemos 6 – fold por ser múltiplo de 132;



# Continuação do exemplo do Baseball



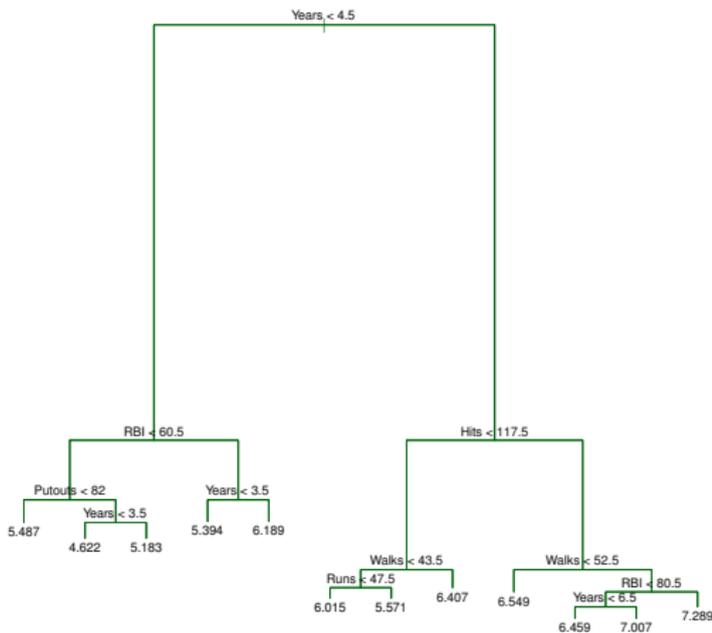
- Dividimos as 263 observações em treinamento (132) e teste (131);
- Construimos uma grande árvore nos dados de treino;
- A figura ao lado refere-se à árvore sem poda;
- Variando  $\alpha$  temos diferentes subárvores;
- E com a validação cruzada (6 – fold) encontramos  $\hat{\alpha}$ ;
- Escolhemos 6 – fold por ser múltiplo de 132;



# Continuação do exemplo do Baseball



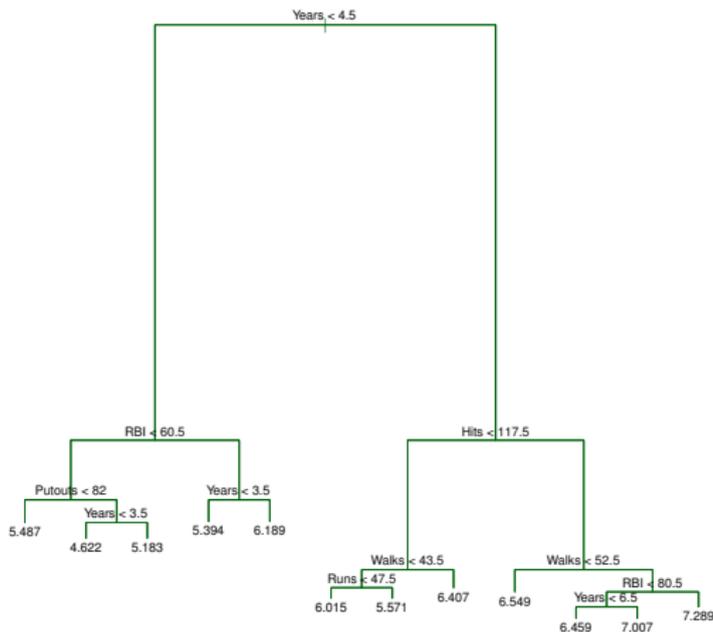
- Dividimos as 263 observações em treinamento (132) e teste (131);
- Construimos uma grande árvore nos dados de treino;
- A figura ao lado refere-se à árvore sem poda;
- Variando  $\alpha$  temos diferentes subárvores;
- E com a validação cruzada (6 – fold) encontramos  $\hat{\alpha}$ ;
- Escolhemos 6 – fold por ser múltiplo de 132;



# Continuação do exemplo do Baseball



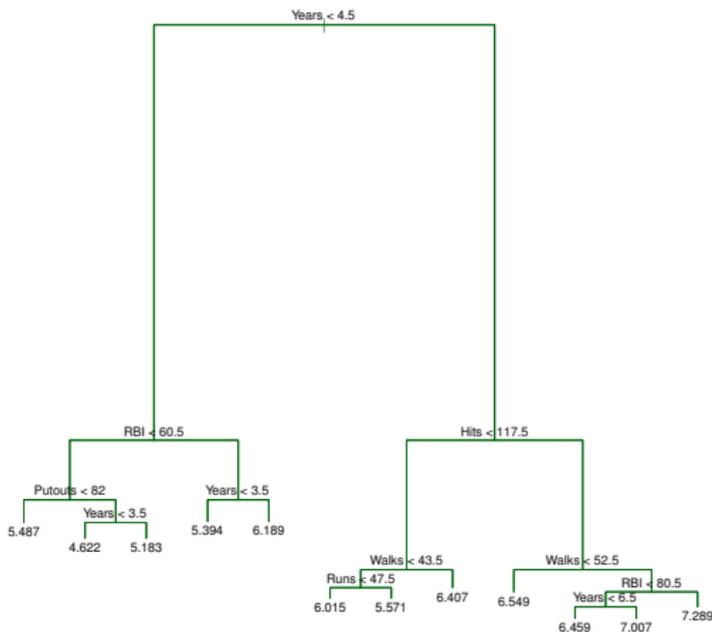
- Dividimos as 263 observações em treinamento (132) e teste (131);
- Construimos uma grande árvore nos dados de treino;
- A figura ao lado refere-se à árvore sem poda;
- Variando  $\alpha$  temos diferentes subárvores;
- E com a validação cruzada (6 – fold) encontramos  $\hat{\alpha}$ ;
- Escolhemos 6 – fold por ser múltiplo de 132;



# Continuação do exemplo do Baseball



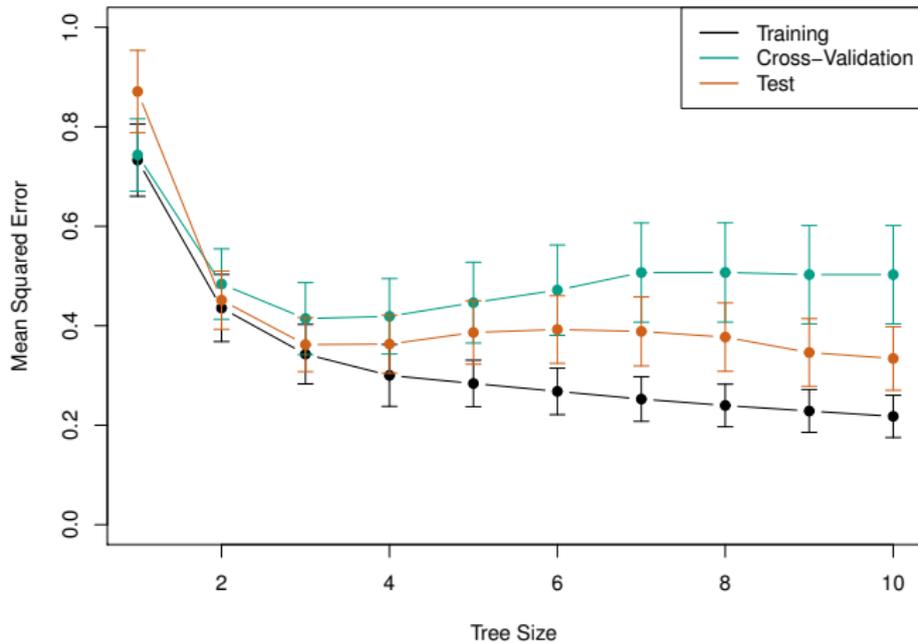
- Dividimos as 263 observações em treinamento (132) e teste (131);
- Construimos uma grande árvore nos dados de treino;
- A figura ao lado refere-se à árvore sem poda;
- Variando  $\alpha$  temos diferentes subárvores;
- E com a validação cruzada (6 – fold) encontramos  $\hat{\alpha}$ ;
- Escolhemos 6 – fold por ser múltiplo de 132;



# Continuação do exemplo do Baseball



- O erro mínimo na validação cruzada ocorre na árvore de tamanho 3.



- O processo é similar à árvore de regressão, exceto pela resposta que é qualitativa;
- Agora, tentamos prever a pertinência das observações nas classes;
- Tal como árvore de regressão, utilizamos divisões binárias para crescer nossa árvore;
- Mas, o critério não é mais a soma de quadrados dos resíduos e sim o **Gini index** que mede a variância total entre as classes

$$G = \sum_{k=1}^K \hat{p}_{mk}(1 - \hat{p}_{mk}).$$

- E o **cross-entropy**, dado por

$$D = - \sum_{k=1}^K \hat{p}_{mk} \log(\hat{p}_{mk}).$$

- Buscamos valores baixos destas quantidades;

- O processo é similar à árvore de regressão, exceto pela resposta que é qualitativa;
- Agora, tentamos prever a pertinência das observações nas classes;
- Tal como árvore de regressão, utilizamos divisões binárias para crescer nossa árvore;
- Mas, o critério não é mais a soma de quadrados dos resíduos e sim o **Gini index** que mede a variância total entre as classes

$$G = \sum_{k=1}^K \hat{p}_{mk}(1 - \hat{p}_{mk}).$$

- E o **cross-entropy**, dado por

$$D = - \sum_{k=1}^K \hat{p}_{mk} \log(\hat{p}_{mk}).$$

- Buscamos valores baixos destas quantidades;

- O processo é similar à árvore de regressão, exceto pela resposta que é qualitativa;
- Agora, tentamos prever a pertinência das observações nas classes;
- Tal como árvore de regressão, utilizamos divisões binárias para crescer nossa árvore;
- Mas, o critério não é mais a soma de quadrados dos resíduos e sim o **Gini index** que mede a variância total entre as classes

$$G = \sum_{k=1}^K \hat{p}_{mk}(1 - \hat{p}_{mk}).$$

- E o **cross-entropy**, dado por

$$D = - \sum_{k=1}^K \hat{p}_{mk} \log(\hat{p}_{mk}).$$

- Buscamos valores baixos destas quantidades;

- O processo é similar à árvore de regressão, exceto pela resposta que é qualitativa;
- Agora, tentamos prever a pertinência das observações nas classes;
- Tal como árvore de regressão, utilizamos divisões binárias para crescer nossa árvore;
- Mas, o critério não é mais a soma de quadrados dos resíduos e sim o **Gini index** que mede a variância total entre as classes

$$G = \sum_{k=1}^K \hat{p}_{mk}(1 - \hat{p}_{mk}).$$

- E o **cross-entropy**, dado por

$$D = - \sum_{k=1}^K \hat{p}_{mk} \log(\hat{p}_{mk}).$$

- Buscamos valores baixos destas quantidades;

- O processo é similar à árvore de regressão, exceto pela resposta que é qualitativa;
- Agora, tentamos prever a pertinência das observações nas classes;
- Tal como árvore de regressão, utilizamos divisões binárias para crescer nossa árvore;
- Mas, o critério não é mais a soma de quadrados dos resíduos e sim o **Gini index** que mede a variância total entre as classes

$$G = \sum_{k=1}^K \hat{p}_{mk}(1 - \hat{p}_{mk}).$$

- E o **cross-entropy**, dado por

$$D = - \sum_{k=1}^K \hat{p}_{mk} \log(\hat{p}_{mk}).$$

- Buscamos valores baixos destas quantidades;

- O processo é similar à árvore de regressão, exceto pela resposta que é qualitativa;
- Agora, tentamos prever a pertinência das observações nas classes;
- Tal como árvore de regressão, utilizamos divisões binárias para crescer nossa árvore;
- Mas, o critério não é mais a soma de quadrados dos resíduos e sim o **Gini index** que mede a variância total entre as classes

$$G = \sum_{k=1}^K \hat{p}_{mk}(1 - \hat{p}_{mk}).$$

- E o **cross-entropy**, dado por

$$D = - \sum_{k=1}^K \hat{p}_{mk} \log(\hat{p}_{mk}).$$

- Buscamos valores baixos destas quantidades;

## Exemplo: heart disease - HD



- Os dados contêm o diagnóstico de 303 pacientes com dores no peito:
  - ★ **Yes**: indica a presença de doença cardíaca;
  - ★ **No**: indica ausência de doença cardíaca;
- Os dados apresentam 13 preditores incluindo **Age**, **Sex**, **Chol** (medida de colesterol), e outras medidas de funções cardíacas e pulmonar;

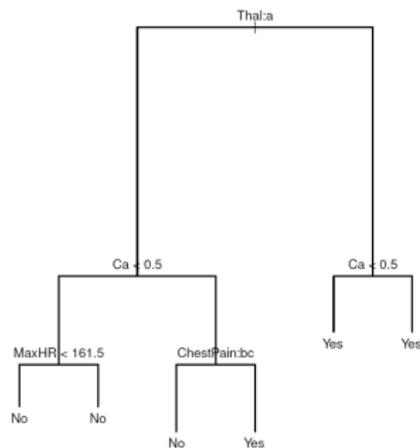
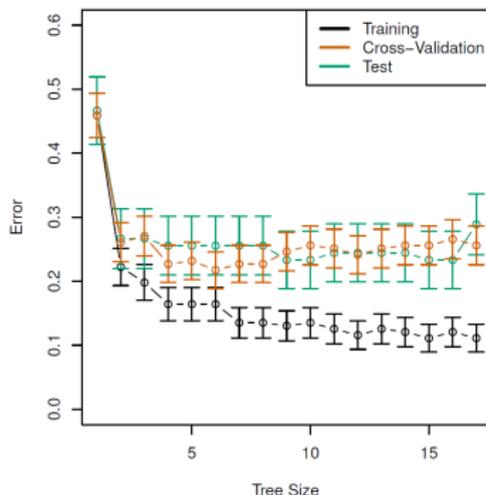
## Exemplo: heart disease - HD



- Os dados contêm o diagnóstico de 303 pacientes com dores no peito:
  - ★ **Yes**: indica a presença de doença cardíaca;
  - ★ **No**: indica ausência de doença cardíaca;
- Os dados apresentam 13 preditores incluindo **Age**, **Sex**, **Chol** (medida de colesterol), e outras medidas de funções cardíacas e pulmonar;



- Após validação cruzada chegamos na árvore com seis *terminal nodes*;

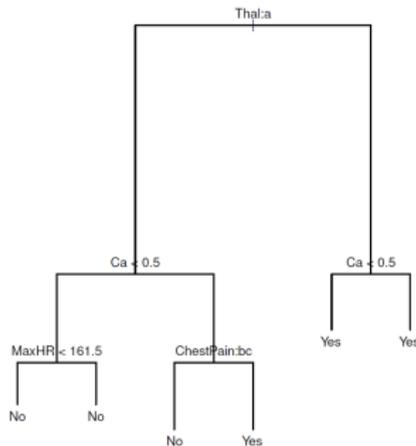
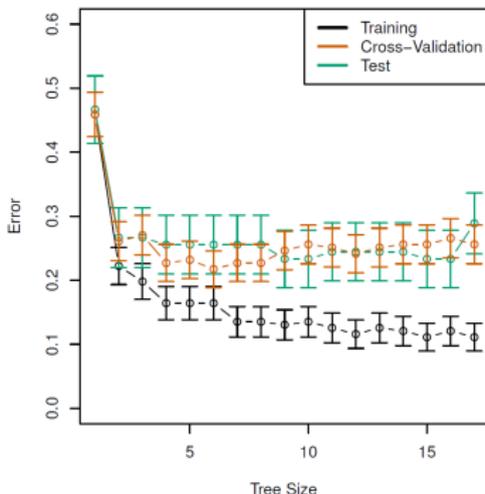


- Note que, em **MaxHR** temos duas respostas **No**. Isto se deve a um dos nós ser “puro” e o outro ser majoritariamente **No**.
- Por que “nó puro” é importante? Se tivermos uma observação no teste que pertença a este grupo, estaremos certo da resposta;

# Exemplo: heart disease - HD

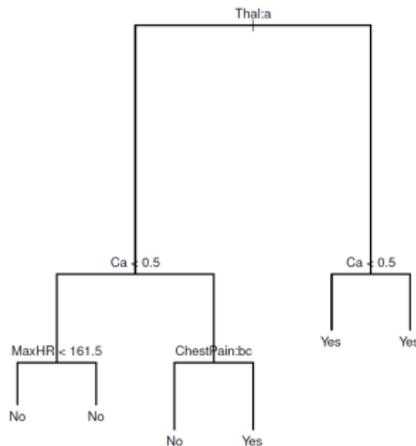
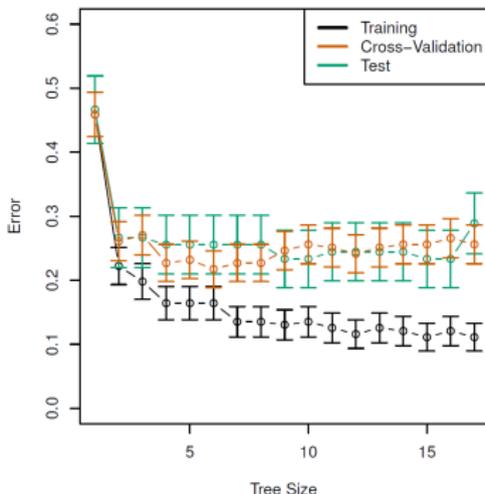


- Após validação cruzada chegamos na árvore com seis *terminal nodes*;



- Note que, em **MaxHR** temos duas respostas **No**. Isto se deve a um dos nós ser “puro” e o outro ser majoritariamente **No**.
- Por que “nó puro” é importante? Se tivermos uma observação no teste que pertença a este grupo, estaremos certo da resposta;

- Após validação cruzada chegamos na árvore com seis *terminal nodes*;



- Note que, em **MaxHR** temos duas respostas **No**. Isto se deve a um dos nós ser “puro” e o outro ser majoritariamente **No**.
- Por que “nó puro” é importante? Se tivermos uma observação no teste que pertença a este grupo, estaremos certo da resposta;

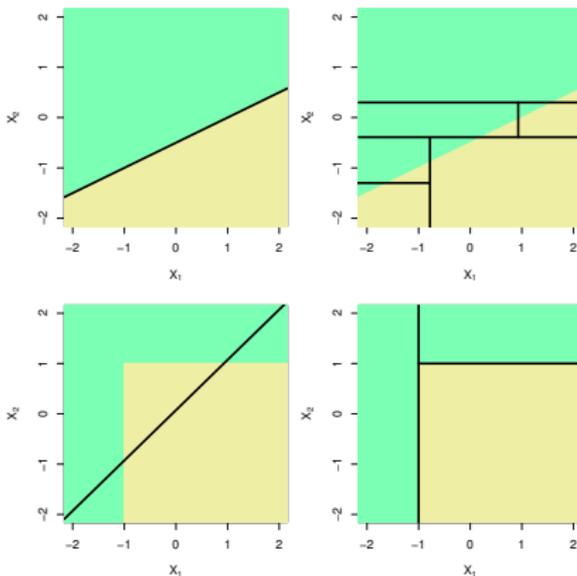
- Se a relação entre as características e resposta é bem aproximada por um modelo linear,  $f(X) = \beta_0 + \sum_{j=1}^p X_j \beta_j$  fará um bom trabalho;
- Se em vez disso, temos uma relação não linear e complexa métodos baseado em árvores se sairá melhor;
- No exemplo, as cores representam a verdadeira relação das respostas;

- Se a relação entre as características e resposta é bem aproximada por um modelo linear,  $f(X) = \beta_0 + \sum_{j=1}^p X_j \beta_j$  fará um bom trabalho;
- Se em vez disso, temos uma relação não linear e complexa métodos baseado em árvores se sairá melhor;
- No exemplo, as cores representam a verdadeira relação das respostas;

# Árvores versus modelos lineares



- Se a relação entre as características e resposta é bem aproximada por um modelo linear,  $f(X) = \beta_0 + \sum_{j=1}^p X_j \beta_j$  fará um bom trabalho;
- Se em vez disso, temos uma relação não linear e complexa métodos baseado em árvores se sairá melhor;
- No exemplo, as cores representam a verdadeira relação das respostas;



# Ensembles

- Como já vimos, o método de **bootstrap** é uma poderosa ideia para reamostragem;
- Ele é usado em muitas situações nas quais é difícil (ou mesmo impossível) calcular diretamente o desvio-padrão da quantidade de interesse;
- Agora, vamos estudar sua utilidade em um contexto completamente diferente: para aprimorar os métodos de árvores de decisão;
- Relembre que um conjunto de  $n$  observações independentes  $Z_1, \dots, Z_n$ , cada com variância  $\sigma^2$ , a variância de  $\bar{Z}$  é dada por  $\sigma^2/n$ ;
- I.e., tomar a média das observações reduz a variância. Evidentemente, isto não é prático, pois não temos acesso a múltiplos dados de treino;
- Mas, podemos gerar repetidas amostras de treino utilizando o bootstrap!

- Como já vimos, o método de **bootstrap** é uma poderosa ideia para reamostragem;
- Ele é usado em muitas situações nas quais é difícil (ou mesmo impossível) calcular diretamente o desvio-padrão da quantidade de interesse;
- Agora, vamos estudar sua utilidade em um contexto completamente diferente: para aprimorar os métodos de árvores de decisão;
- Relembre que um conjunto de  $n$  observações independentes  $Z_1, \dots, Z_n$ , cada com variância  $\sigma^2$ , a variância de  $\bar{Z}$  é dada por  $\sigma^2/n$ ;
- I.e., tomar a média das observações reduz a variância. Evidentemente, isto não é prático, pois não temos acesso a múltiplos dados de treino;
- Mas, podemos gerar repetidas amostras de treino utilizando o bootstrap!

- Como já vimos, o método de **bootstrap** é uma poderosa ideia para reamostragem;
- Ele é usado em muitas situações nas quais é difícil (ou mesmo impossível) calcular diretamente o desvio-padrão da quantidade de interesse;
- Agora, vamos estudar sua utilidade em um contexto completamente diferente: para aprimorar os métodos de árvores de decisão;
- Relembre que um conjunto de  $n$  observações independentes  $Z_1, \dots, Z_n$ , cada com variância  $\sigma^2$ , a variância de  $\bar{Z}$  é dada por  $\sigma^2/n$ ;
- I.e., tomar a média das observações reduz a variância. Evidentemente, isto não é prático, pois não temos acesso a múltiplos dados de treino;
- Mas, podemos gerar repetidas amostras de treino utilizando o bootstrap!

- Como já vimos, o método de **bootstrap** é uma poderosa ideia para reamostragem;
- Ele é usado em muitas situações nas quais é difícil (ou mesmo impossível) calcular diretamente o desvio-padrão da quantidade de interesse;
- Agora, vamos estudar sua utilidade em um contexto completamente diferente: para aprimorar os métodos de árvores de decisão;
- Relembre que um conjunto de  $n$  observações independentes  $Z_1, \dots, Z_n$ , cada com variância  $\sigma^2$ , a variância de  $\bar{Z}$  é dada por  $\sigma^2/n$ ;
- I.e., tomar a média das observações reduz a variância. Evidentemente, isto não é prático, pois não temos acesso a múltiplos dados de treino;
- Mas, podemos gerar repetidas amostras de treino utilizando o bootstrap!

- Como já vimos, o método de **bootstrap** é uma poderosa ideia para reamostragem;
- Ele é usado em muitas situações nas quais é difícil (ou mesmo impossível) calcular diretamente o desvio-padrão da quantidade de interesse;
- Agora, vamos estudar sua utilidade em um contexto completamente diferente: para aprimorar os métodos de árvores de decisão;
- Relembre que um conjunto de  $n$  observações independentes  $Z_1, \dots, Z_n$ , cada com variância  $\sigma^2$ , a variância de  $\bar{Z}$  é dada por  $\sigma^2/n$ ;
- I.e., tomar a média das observações reduz a variância. Evidentemente, isto não é prático, pois não temos acesso a múltiplos dados de treino;
- Mas, podemos gerar repetidas amostras de treino utilizando o bootstrap!

- Como já vimos, o método de **bootstrap** é uma poderosa ideia para reamostragem;
- Ele é usado em muitas situações nas quais é difícil (ou mesmo impossível) calcular diretamente o desvio-padrão da quantidade de interesse;
- Agora, vamos estudar sua utilidade em um contexto completamente diferente: para aprimorar os métodos de árvores de decisão;
- Relembre que um conjunto de  $n$  observações independentes  $Z_1, \dots, Z_n$ , cada com variância  $\sigma^2$ , a variância de  $\bar{Z}$  é dada por  $\sigma^2/n$ ;
- I.e., tomar a média das observações reduz a variância. Evidentemente, isto não é prático, pois não temos acesso a múltiplos dados de treino;
- Mas, podemos gerar repetidas amostras de treino utilizando o bootstrap!

- Nesta abordagem, geramos  $B$  diferentes dados (*bootstrapped*) de treino. Treinamos nosso modelo a fim de obter a predição no ponto  $x$ ,  $\hat{f}^{*b}(x)$ ;
- Em seguida, calculamos a média de todas as predições (chamamos de **bagging**):

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

- Esta abordagem se aplica à árvore de regressão;
- Para classificação, em cada dado de teste, registramos a classe predita pelas  $B$  árvores, e escolhemos pela maioria dos votos;
- Note que podar a árvore reduz a variância, **mas aumenta o viés**;
- Então, a ideia é não podá-la e aumentar o tamanho da amostra.

- Nesta abordagem, geramos  $B$  diferentes dados (*bootstrapped*) de treino. Treinamos nosso modelo a fim de obter a predição no ponto  $x$ ,  $\hat{f}^{*b}(x)$ ;
- Em seguida, calculamos a média de todas as predições (chamamos de **bagging**):

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

- Esta abordagem se aplica à árvore de regressão;
- Para classificação, em cada dado de teste, registramos a classe predita pelas  $B$  árvores, e escolhemos pela maioria dos votos;
- Note que podar a árvore reduz a variância, **mas aumenta o viés**;
- Então, a ideia é não podá-la e aumentar o tamanho da amostra.

- Nesta abordagem, geramos  $B$  diferentes dados (*bootstrapped*) de treino. Treinamos nosso modelo a fim de obter a predição no ponto  $x$ ,  $\hat{f}^{*b}(x)$ ;
- Em seguida, calculamos a média de todas as predições (chamamos de **bagging**):

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

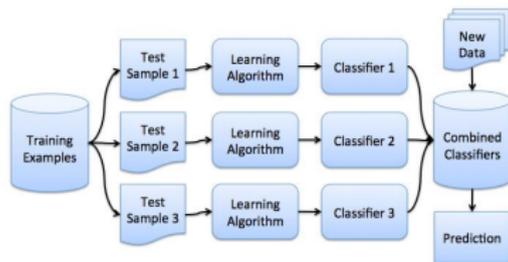
- Esta abordagem se aplica à árvore de regressão;
- Para classificação, em cada dado de teste, registramos a classe predita pelas  $B$  árvores, e escolhemos pela maioria dos votos;
- Note que podar a árvore reduz a variância, **mas aumenta o viés**;
- Então, a ideia é não podá-la e aumentar o tamanho da amostra.

- Nesta abordagem, geramos  $B$  diferentes dados (*bootstrapped*) de treino. Treinamos nosso modelo a fim de obter a predição no ponto  $x$ ,  $\hat{f}^{*b}(x)$ ;
- Em seguida, calculamos a média de todas as predições (chamamos de **bagging**):

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

- Esta abordagem se aplica à árvore de regressão;
- Para classificação, em cada dado de teste, registramos a classe predita pelas  $B$  árvores, e escolhemos pela maioria dos votos;

- Note que podar a árvore reduz a variância, **mas aumenta o viés**;
- Então, a ideia é não podá-la e aumentar o tamanho da amostra.

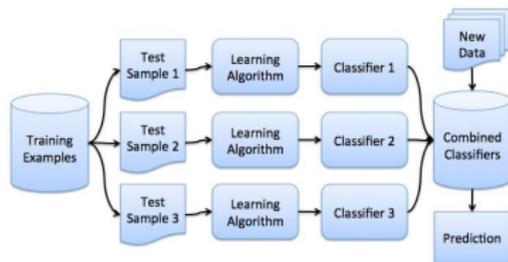


- Nesta abordagem, geramos  $B$  diferentes dados (*bootstrapped*) de treino. Treinamos nosso modelo a fim de obter a predição no ponto  $x$ ,  $\hat{f}^{*b}(x)$ ;
- Em seguida, calculamos a média de todas as predições (chamamos de **bagging**):

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

- Esta abordagem se aplica à árvore de regressão;
- Para classificação, em cada dado de teste, registramos a classe predita pelas  $B$  árvores, e escolhemos pela maioria dos votos;

- Note que podar a árvore reduz a variância, **mas aumenta o viés**;
- Então, a ideia é não podá-la e aumentar o tamanho da amostra.

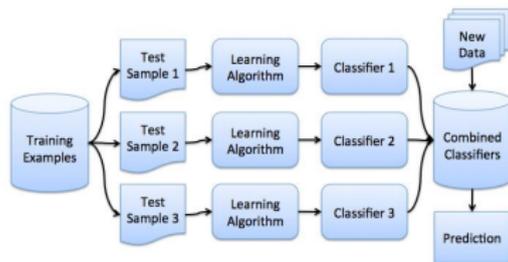


- Nesta abordagem, geramos  $B$  diferentes dados (*bootstrapped*) de treino. Treinamos nosso modelo a fim de obter a predição no ponto  $x$ ,  $\hat{f}^{*b}(x)$ ;
- Em seguida, calculamos a média de todas as predições (chamamos de **bagging**):

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

- Esta abordagem se aplica à árvore de regressão;
- Para classificação, em cada dado de teste, registramos a classe predita pelas  $B$  árvores, e escolhemos pela maioria dos votos;

- Note que podar a árvore reduz a variância, **mas aumenta o viés**;
- Então, a ideia é não podá-la e aumentar o tamanho da amostra.



- Utilizando o modelo *bagged*, podemos estimar o erro do teste de uma forma bastante simples;
- Sabemos que árvores são ajustadas para todos os subconjuntos *bootstrapped*. E cada uma utiliza cerca de  $2/3$  das observações;
- Sendo assim, temos  $1/3$  de observações (em média) que não participa do ajuste do  $b$ -ésimo modelo. Estas são as **observações out-of-bag (OOB)**;
- Podemos prever a  $i$ -ésima observação utilizando as árvores nas quais a observação é OOB. Isso resultará em torno de  $B/3$  previsões;
- Esta abordagem é essencialmente a validação cruzada leave-one-out quando  $B$  é grande.

- Utilizando o modelo *bagged*, podemos estimar o erro do teste de uma forma bastante simples;
- Sabemos que árvores são ajustadas para todos os subconjuntos *bootstrapped*. E cada uma utiliza cerca de  $2/3$  das observações;
- Sendo assim, temos  $1/3$  de observações (em média) que não participa do ajuste do  $b$ -ésimo modelo. Estas são as **observações out-of-bag (OOB)**;
- Podemos prever a  $i$ -ésima observação utilizando as árvores nas quais a observação é OOB. Isso resultará em torno de  $B/3$  previsões;
- Esta abordagem é essencialmente a validação cruzada leave-one-out quando  $B$  é grande.

- Utilizando o modelo *bagged*, podemos estimar o erro do teste de uma forma bastante simples;
- Sabemos que árvores são ajustadas para todos os subconjuntos *bootstrapped*. E cada uma utiliza cerca de  $2/3$  das observações;
- Sendo assim, temos  $1/3$  de observações (em média) que não participa do ajuste do  $b$ -ésimo modelo. Estas são as **observações out-of-bag (OOB)**;
- Podemos prever a  $i$ -ésima observação utilizando as árvores nas quais a observação é OOB. Isso resultará em torno de  $B/3$  previsões;
- Esta abordagem é essencialmente a validação cruzada leave-one-out quando  $B$  é grande.

- Utilizando o modelo *bagged*, podemos estimar o erro do teste de uma forma bastante simples;
- Sabemos que árvores são ajustadas para todos os subconjuntos *bootstrapped*. E cada uma utiliza cerca de  $2/3$  das observações;
- Sendo assim, temos  $1/3$  de observações (em média) que não participa do ajuste do  $b$ -ésimo modelo. Estas são as **observações out-of-bag (OOB)**;
- Podemos prever a  $i$ -ésima observação utilizando as árvores nas quais a observação é OOB. Isso resultará em torno de  $B/3$  previsões;
- Esta abordagem é essencialmente a validação cruzada leave-one-out quando  $B$  é grande.

- Utilizando o modelo *bagged*, podemos estimar o erro do teste de uma forma bastante simples;
- Sabemos que árvores são ajustadas para todos os subconjuntos *bootstrapped*. E cada uma utiliza cerca de  $2/3$  das observações;
- Sendo assim, temos  $1/3$  de observações (em média) que não participa do ajuste do  $b$ -ésimo modelo. Estas são as **observações out-of-bag (OOB)**;
- Podemos prever a  $i$ -ésima observação utilizando as árvores nas quais a observação é OOB. Isso resultará em torno de  $B/3$  previsões;
- Esta abordagem é essencialmente a validação cruzada leave-one-out quando  $B$  é grande.

- Como já vimos, as amostras *bootstrap* são muito correlacionadas, e o *bagging* herda esta deficiência (árvores correlacionadas);
- **Random forests** fornece uma melhora em relação a este fato:
  - ★ Como em *Bagging*, construímos as regras de decisão baseadas nas amostras *bootstrapped*;
  - ★ Entretanto, para cada **partição** da árvore, uma **seleção aleatória de  $m$  preditores** é escolhido de um total de  $p$ ;
  - ★ Na divisão é permitido utilizar somente um desse  $m$  preditores.
- Em outras palavras, em cada divisão da árvore, não é permitido para o algoritmo sequer considerar a maioria dos preditores;
- Tipicamente, utilizamos  $m \approx \sqrt{p}$ ;

- Como já vimos, as amostras *bootstrap* são muito correlacionadas, e o *bagging* herda esta deficiência (árvores correlacionadas);
- **Random forests** fornece uma melhora em relação a este fato:
  - ★ Como em *Bagging*, construímos as regras de decisão baseadas nas amostras *bootstrapped*;
  - ★ Entretanto, para cada **partição** da árvore, uma **seleção aleatória de  $m$  preditores** é escolhido de um total de  $p$ ;
  - ★ Na divisão é permitido utilizar somente um desse  $m$  preditores.
- Em outras palavras, em cada divisão da árvore, não é permitido para o algoritmo sequer considerar a maioria dos preditores;
- Tipicamente, utilizamos  $m \approx \sqrt{p}$ ;

- Como já vimos, as amostras *bootstrap* são muito correlacionadas, e o *bagging* herda esta deficiência (árvores correlacionadas);
- **Random forests** fornece uma melhora em relação a este fato:
  - ★ Como em *Bagging*, construímos as regras de decisão baseadas nas amostras *bootstrapped*;
  - ★ Entretanto, para cada **partição** da árvore, uma **seleção aleatória de  $m$  preditores** é escolhido de um total de  $p$ ;
  - ★ Na divisão é permitido utilizar somente um desse  $m$  preditores.
- Em outras palavras, em cada divisão da árvore, não é permitido para o algoritmo sequer considerar a maioria dos preditores;
- Tipicamente, utilizamos  $m \approx \sqrt{p}$ ;

- Como já vimos, as amostras *bootstrap* são muito correlacionadas, e o *bagging* herda esta deficiência (árvores correlacionadas);
- **Random forests** fornece uma melhora em relação a este fato:
  - ★ Como em *Bagging*, construímos as regras de decisão baseadas nas amostras *bootstrapped*;
  - ★ Entretanto, para cada **partição** da árvore, uma **seleção aleatória de  $m$  preditores** é escolhido de um total de  $p$ ;
  - ★ Na divisão é permitido utilizar somente um desse  $m$  preditores.
- Em outras palavras, em cada divisão da árvore, não é permitido para o algoritmo sequer considerar a maioria dos preditores;
- Tipicamente, utilizamos  $m \approx \sqrt{p}$ ;

- Como já vimos, as amostras *bootstrap* são muito correlacionadas, e o *bagging* herda esta deficiência (árvores correlacionadas);
- **Random forests** fornece uma melhora em relação a este fato:
  - ★ Como em *Bagging*, construímos as regras de decisão baseadas nas amostras *bootstrapped*;
  - ★ Entretanto, para cada **partição** da árvore, uma **seleção aleatória de  $m$  preditores** é escolhido de um total de  $p$ ;
  - ★ Na divisão é permitido utilizar somente um desse  $m$  preditores.
- Em outras palavras, em cada divisão da árvore, não é permitido para o algoritmo sequer considerar a maioria dos preditores;
- Tipicamente, utilizamos  $m \approx \sqrt{p}$ ;

- Como já vimos, as amostras *bootstrap* são muito correlacionadas, e o *bagging* herda esta deficiência (árvores correlacionadas);
- **Random forests** fornece uma melhora em relação a este fato:
  - ★ Como em *Bagging*, construímos as regras de decisão baseadas nas amostras *bootstrapped*;
  - ★ Entretanto, para cada **partição** da árvore, uma **seleção aleatória de  $m$  preditores** é escolhido de um total de  $p$ ;
  - ★ Na divisão é permitido utilizar somente um desse  $m$  preditores.
- Em outras palavras, em cada divisão da árvore, não é permitido para o algoritmo sequer considerar a maioria dos preditores;
- Tipicamente, utilizamos  $m \approx \sqrt{p}$ ;

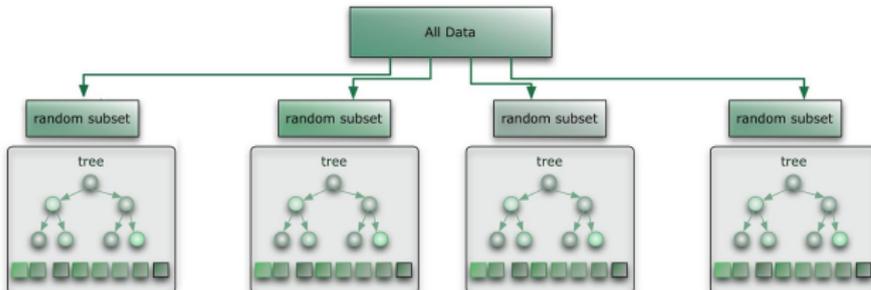
- Como já vimos, as amostras *bootstrap* são muito correlacionadas, e o *bagging* herda esta deficiência (árvores correlacionadas);
- **Random forests** fornece uma melhora em relação a este fato:
  - ★ Como em *Bagging*, construímos as regras de decisão baseadas nas amostras *bootstrapped*;
  - ★ Entretanto, para cada **partição** da árvore, uma **seleção aleatória de  $m$  preditores** é escolhido de um total de  $p$ ;
  - ★ Na divisão é permitido utilizar somente um desse  $m$  preditores.
- Em outras palavras, em cada divisão da árvore, não é permitido para o algoritmo sequer considerar a maioria dos preditores;
- Tipicamente, utilizamos  $m \approx \sqrt{p}$ ;

- Suponha que exista um preditor (ou um conjunto) muito forte nos dados de treinamento, juntamente com outros moderadamente fortes;
- Assim, na coleção de *bagged trees*, a maioria (ou todas) as árvores utilizarão os preditores fortes;
- Consequentemente, todas serão muito semelhantes entre si;
- *Random forests* força com que diferentes preditores sejam escolhidos (*decorrelating the trees*). Se  $m = p$ , estaremos no método *Bagging*;

- Suponha que exista um preditor (ou um conjunto) muito forte nos dados de treinamento, juntamente com outros moderadamente fortes;
- Assim, na coleção de *bagged trees*, a maioria (ou todas) as árvores utilizarão os preditores fortes;
- Consequentemente, todas serão muito semelhantes entre si;
- *Random forests* força com que diferentes preditores sejam escolhidos (*decorrelating the trees*). Se  $m = p$ , estaremos no método *Bagging*;

- Suponha que exista um preditor (ou um conjunto) muito forte nos dados de treinamento, juntamente com outros moderadamente fortes;
- Assim, na coleção de *bagged trees*, a maioria (ou todas) as árvores utilizarão os preditores fortes;
- Consequentemente, todas serão muito semelhantes entre si;
- *Random forests* força com que diferentes preditores sejam escolhidos (*decorrelating the trees*). Se  $m = p$ , estaremos no método *Bagging*;

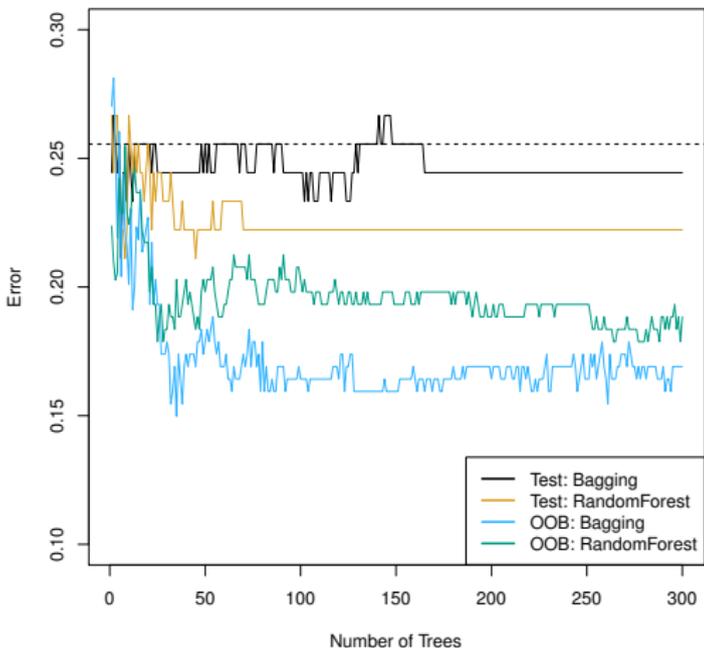
- Suponha que exista um preditor (ou um conjunto) muito forte nos dados de treinamento, juntamente com outros moderadamente fortes;
- Assim, na coleção de *bagged trees*, a maioria (ou todas) as árvores utilizarão os preditores fortes;
- Conseqüentemente, todas serão muito semelhantes entre si;
- *Random forests* força com que diferentes preditores sejam escolhidos (*decorrelating the trees*). Se  $m = p$ , estaremos no método *Bagging*;



# Exemplo 1: Heart data set



- Abaixo, o erro do teste como função de  $B$ . A linha tracejada representa o erro utilizando uma árvore somente;



## Exemplo 2: Gene expression data



- Os dados consistem na medida de expressão de 4.718 genes;
- Foram amostrados em tecidos de 349 pacientes;
- Cada paciente possui um marcador qualitativo (de 15 níveis):
  - ★ Normal;
  - ★ Ou 14 tipos de câncer;
- Utilizamos *Random forests* para prever o tipo de câncer baseado nos 500 genes de maior variabilidade nos dados de treino, variando  $m$ ;
- A taxa de erro considerando única árvore foi de 45,7%;

## Exemplo 2: Gene expression data



- Os dados consistem na medida de expressão de 4.718 genes;
- Foram amostrados em tecidos de 349 pacientes;
- Cada paciente possui um marcador qualitativo (de 15 níveis):
  - ★ Normal;
  - ★ Ou 14 tipos de câncer;
- Utilizamos *Random forests* para prever o tipo de câncer baseado nos 500 genes de maior variabilidade nos dados de treino, variando  $m$ ;
- A taxa de erro considerando única árvore foi de 45,7%;

## Exemplo 2: Gene expression data



- Os dados consistem na medida de expressão de 4.718 genes;
- Foram amostrados em tecidos de 349 pacientes;
- Cada paciente possui um marcador qualitativo (de 15 níveis):
  - ★ Normal;
  - ★ Ou 14 tipos de câncer;
- Utilizamos *Random forests* para prever o tipo de câncer baseado nos 500 genes de maior variabilidade nos dados de treino, variando  $m$ ;
- A taxa de erro considerando única árvore foi de 45,7%;

## Exemplo 2: Gene expression data

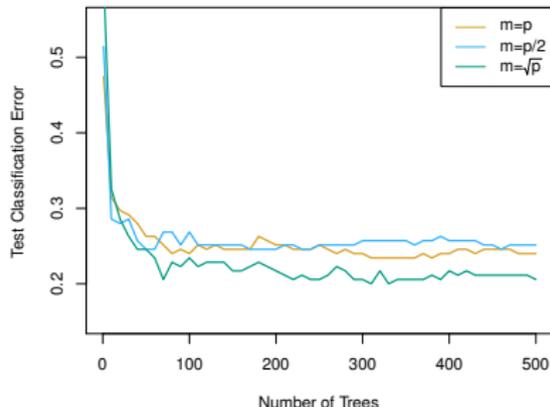


- Os dados consistem na medida de expressão de 4.718 genes;
- Foram amostrados em tecidos de 349 pacientes;
- Cada paciente possui um marcador qualitativo (de 15 níveis):

★ Normal;

★ Ou 14 tipos de câncer;

- Utilizamos *Random forests* para prever o tipo de câncer baseado nos 500 genes de maior variabilidade nos dados de treino, variando  $m$ ;
- A taxa de erro considerando única árvore foi de 45,7%;



- **Boosting** é uma abordagem bastante geral, e pode ser aplicada em vários métodos de aprendizagem estatística para regressão e classificação.;
- Vimos em aulas anteriores o *gradient boosting*, nesta seção vamos aplicar o método em árvores de decisão;
- Relembre que em *bagging*:
  - ★ Criamos múltiplas cópias dos dados de treino originais (utilizando *bootstrap*); Ajustamos diferentes árvores de decisão;
  - ★ Combinando todas chegamos em um modelo preditivo.
- I.e., cada árvore é construída independente das outras. *Boosting* funciona de modo similar, exceto pelo fato delas crescerem **sequencialmente**;
- A árvore seguinte se baseará nos erros da árvore anterior.

- **Boosting** é uma abordagem bastante geral, e pode ser aplicada em vários métodos de aprendizagem estatística para regressão e classificação.;
- Vimos em aulas anteriores o *gradient boosting*, nesta seção vamos aplicar o método em árvores de decisão;
- Relembre que em *bagging*:
  - ★ Criamos múltiplas cópias dos dados de treino originais (utilizando *bootstrap*); Ajustamos diferentes árvores de decisão;
  - ★ Combinando todas chegamos em um modelo preditivo.
- I.e., cada árvore é construída independente das outras. *Boosting* funciona de modo similar, exceto pelo fato delas crescerem **sequencialmente**;
- A árvore seguinte se baseará nos erros da árvore anterior.

- **Boosting** é uma abordagem bastante geral, e pode ser aplicada em vários métodos de aprendizagem estatística para regressão e classificação.;
- Vimos em aulas anteriores o *gradient boosting*, nesta seção vamos aplicar o método em árvores de decisão;
- Relembre que em *bagging*:
  - ★ Criamos múltiplas cópias dos dados de treino originais (utilizando *bootstrap*); Ajustamos diferentes árvores de decisão;
  - ★ Combinando todas chegamos em um modelo preditivo.
- I.e., cada árvore é construída independente das outras. *Boosting* funciona de modo similar, exceto pelo fato delas crescerem **sequencialmente**;
- A árvore seguinte se baseará nos erros da árvore anterior.

- **Boosting** é uma abordagem bastante geral, e pode ser aplicada em vários métodos de aprendizagem estatística para regressão e classificação.;
- Vimos em aulas anteriores o *gradient boosting*, nesta seção vamos aplicar o método em árvores de decisão;
- Relembre que em *bagging*:
  - ★ Criamos múltiplas cópias dos dados de treino originais (utilizando *bootstrap*); Ajustamos diferentes árvores de decisão;
  - ★ Combinando todas chegamos em um modelo preditivo.
- I.e., cada árvore é construída independente das outras. *Boosting* funciona de modo similar, exceto pelo fato delas crescerem **sequencialmente**;
- A árvore seguinte se baseará nos erros da árvore anterior.

- **Boosting** é uma abordagem bastante geral, e pode ser aplicada em vários métodos de aprendizagem estatística para regressão e classificação.;
- Vimos em aulas anteriores o *gradient boosting*, nesta seção vamos aplicar o método em árvores de decisão;
- Relembre que em *bagging*:
  - ★ Criamos múltiplas cópias dos dados de treino originais (utilizando *bootstrap*); Ajustamos diferentes árvores de decisão;
  - ★ Combinando todas chegamos em um modelo preditivo.
- I.e., cada árvore é construída independente das outras. *Boosting* funciona de modo similar, exceto pelo fato delas crescerem **sequencialmente**;
- A árvore seguinte se baseará nos erros da árvore anterior.

# Boosting para árvore de regressão

- Inicie com  $\hat{f}(x) = 0$  e  $r_i = y_i$ , para todo  $i$  dos dados de treino;
- Para  $b = 1, 2, \dots, B$ , repita:
  - ★ Ajuste a árvore  $\hat{f}^b$  com  $d$  divisões ( $d + 1$  *terminal nodes*) para os dados de treino  $(X, r)$ ;
  - ★ Atualize  $\hat{f}$  adicionando uma versão da nova árvore:

$$\hat{f}(x) \leftarrow \hat{f}(x) + \lambda \hat{f}^b(x).$$

- ★ Atualize os resíduos,
- O modelo de saída fica então,

$$r_i \leftarrow r_i - \lambda \hat{f}^b(x_i)$$

$$\hat{f}(x) = \sum_{b=1}^B \lambda \hat{f}^b(x);$$

- O pacote `gbm` (*gradient boosted models*) lida com uma variedade de problemas de regressão e classificação.

# Boosting para árvore de regressão

- Inicie com  $\hat{f}(x) = 0$  e  $r_i = y_i$ , para todo  $i$  dos dados de treino;
- Para  $b = 1, 2, \dots, B$ , repita:
  - ★ Ajuste a árvore  $\hat{f}^b$  com  $d$  divisões ( $d + 1$  *terminal nodes*) para os dados de treino  $(X, r)$ ;
  - ★ Atualize  $\hat{f}$  adicionando uma versão da nova árvore:

$$\hat{f}(x) \leftarrow \hat{f}(x) + \lambda \hat{f}^b(x).$$

- ★ Atualize os resíduos,
- O modelo de saída fica então,

$$r_i \leftarrow r_i - \lambda \hat{f}^b(x_i)$$

$$\hat{f}(x) = \sum_{b=1}^B \lambda \hat{f}^b(x);$$

- O pacote `gbm` (*gradient boosted models*) lida com uma variedade de problemas de regressão e classificação.

# Boosting para árvore de regressão

- Inicie com  $\hat{f}(x) = 0$  e  $r_i = y_i$ , para todo  $i$  dos dados de treino;
- Para  $b = 1, 2, \dots, B$ , repita:
  - ★ Ajuste a árvore  $\hat{f}^b$  com  $d$  divisões ( $d + 1$  *terminal nodes*) para os dados de treino  $(X, r)$ ;

- ★ Atualize  $\hat{f}$  adicionando uma versão da nova árvore:

$$\hat{f}(x) \leftarrow \hat{f}(x) + \lambda \hat{f}^b(x).$$

- ★ Atualize os resíduos,

$$r_i \leftarrow r_i - \lambda \hat{f}^b(x_i)$$

- O modelo de saída fica então,

$$\hat{f}(x) = \sum_{b=1}^B \lambda \hat{f}^b(x);$$

- O pacote `gbm` (*gradient boosted models*) lida com uma variedade de problemas de regressão e classificação.

# Boosting para árvore de regressão

- Inicie com  $\hat{f}(x) = 0$  e  $r_i = y_i$ , para todo  $i$  dos dados de treino;
- Para  $b = 1, 2, \dots, B$ , repita:
  - ★ Ajuste a árvore  $\hat{f}^b$  com  $d$  divisões ( $d + 1$  *terminal nodes*) para os dados de treino  $(X, r)$ ;
  - ★ Atualize  $\hat{f}$  adicionando uma versão da nova árvore:

$$\hat{f}(x) \leftarrow \hat{f}(x) + \lambda \hat{f}^b(x).$$

- ★ Atualize os resíduos,

$$r_i \leftarrow r_i - \lambda \hat{f}^b(x_i)$$

- O modelo de saída fica então,

$$\hat{f}(x) = \sum_{b=1}^B \lambda \hat{f}^b(x);$$

- O pacote `gbm` (*gradient boosted models*) lida com uma variedade de problemas de regressão e classificação.

# Boosting para árvore de regressão

- Inicie com  $\hat{f}(x) = 0$  e  $r_i = y_i$ , para todo  $i$  dos dados de treino;
- Para  $b = 1, 2, \dots, B$ , repita:
  - ★ Ajuste a árvore  $\hat{f}^b$  com  $d$  divisões ( $d + 1$  *terminal nodes*) para os dados de treino  $(X, r)$ ;
  - ★ Atualize  $\hat{f}$  adicionando uma versão da nova árvore:

$$\hat{f}(x) \leftarrow \hat{f}(x) + \lambda \hat{f}^b(x).$$

- ★ Atualize os resíduos,
- O modelo de saída fica então,

$$r_i \leftarrow r_i - \lambda \hat{f}^b(x_i)$$

$$\hat{f}(x) = \sum_{b=1}^B \lambda \hat{f}^b(x);$$

- O pacote `gbm` (*gradient boosted models*) lida com uma variedade de problemas de regressão e classificação.

# Boosting para árvore de regressão

- Inicie com  $\hat{f}(x) = 0$  e  $r_i = y_i$ , para todo  $i$  dos dados de treino;
- Para  $b = 1, 2, \dots, B$ , repita:
  - ★ Ajuste a árvore  $\hat{f}^b$  com  $d$  divisões ( $d + 1$  *terminal nodes*) para os dados de treino  $(X, r)$ ;
  - ★ Atualize  $\hat{f}$  adicionando uma versão da nova árvore:

$$\hat{f}(x) \leftarrow \hat{f}(x) + \lambda \hat{f}^b(x).$$

- ★ Atualize os resíduos,
- O modelo de saída fica então,

$$r_i \leftarrow r_i - \lambda \hat{f}^b(x_i)$$

$$\hat{f}(x) = \sum_{b=1}^B \lambda \hat{f}^b(x);$$

- O pacote `gbm` (*gradient boosted models*) lida com uma variedade de problemas de regressão e classificação.

# Boosting para árvore de regressão

- Inicie com  $\hat{f}(x) = 0$  e  $r_i = y_i$ , para todo  $i$  dos dados de treino;
- Para  $b = 1, 2, \dots, B$ , repita:
  - ★ Ajuste a árvore  $\hat{f}^b$  com  $d$  divisões ( $d + 1$  *terminal nodes*) para os dados de treino  $(X, r)$ ;
  - ★ Atualize  $\hat{f}$  adicionando uma versão da nova árvore:

$$\hat{f}(x) \leftarrow \hat{f}(x) + \lambda \hat{f}^b(x).$$

- ★ Atualize os resíduos,

$$r_i \leftarrow r_i - \lambda \hat{f}^b(x_i)$$

- O modelo de saída fica então,

$$\hat{f}(x) = \sum_{b=1}^B \lambda \hat{f}^b(x);$$

- O pacote `gbm` (*gradient boosted models*) lida com uma variedade de problemas de regressão e classificação.

- O parâmetro  $\lambda$  controla a taxa com que o algoritmo aprende (tipicamente são 0,01 ou 0,001).
- Quando muito pequenos exigem que o número de árvores,  $B$ , seja grande;
- Diferentemente de *bagging* e *random forests*, *boosting* pode *overfit* se  $B$  é muito grande. Utilizamos CV para selecionar esta quantidade;
- Muito embora *random forests* e *boosting* apresentem excelentes predições, seus resultados podem ser difíceis de se interpretar;
- A seguir, voltaremos ao *Gene expression data*, a fim de prever pacientes com **câncer** versus **normal**;
- Para os dois modelos *boosted* utilizamos  $\lambda = 0,01$ . E a taxa de erro para única árvore é de 24%;

- O parâmetro  $\lambda$  controla a taxa com que o algoritmo aprende (tipicamente são 0,01 ou 0,001).
- Quando muito pequenos exigem que o número de árvores,  $B$ , seja grande;
- Diferentemente de *bagging* e *random forests*, *boosting* pode *overfit* se  $B$  é muito grande. Utilizamos CV para selecionar esta quantidade;
- Muito embora *random forests* e *boosting* apresentem excelentes predições, seus resultados podem ser difíceis de se interpretar;
- A seguir, voltaremos ao *Gene expression data*, a fim de prever pacientes com **câncer** versus **normal**;
- Para os dois modelos *boosted* utilizamos  $\lambda = 0,01$ . E a taxa de erro para única árvore é de 24%;

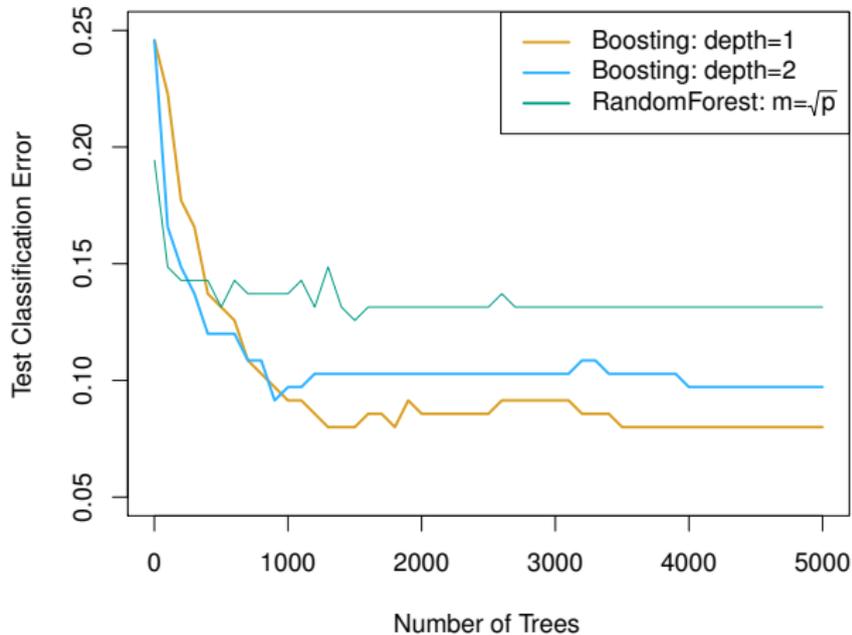
- O parâmetro  $\lambda$  controla a taxa com que o algoritmo aprende (tipicamente são 0,01 ou 0,001).
- Quando muito pequenos exigem que o número de árvores,  $B$ , seja grande;
- Diferentemente de *bagging* e *random forests*, *boosting* pode *overfit* se  $B$  é muito grande. Utilizamos CV para selecionar esta quantidade;
- Muito embora *random forests* e *boosting* apresentem excelentes previsões, seus resultados podem ser difíceis de se interpretar;
- A seguir, voltaremos ao *Gene expression data*, a fim de prever pacientes com **câncer** versus **normal**;
- Para os dois modelos *boosted* utilizamos  $\lambda = 0,01$ . E a taxa de erro para única árvore é de 24%;

- O parâmetro  $\lambda$  controla a taxa com que o algoritmo aprende (tipicamente são 0,01 ou 0,001).
- Quando muito pequenos exigem que o número de árvores,  $B$ , seja grande;
- Diferentemente de *bagging* e *random forests*, *boosting* pode *overfit* se  $B$  é muito grande. Utilizamos CV para selecionar esta quantidade;
- Muito embora *random forests* e *boosting* apresentem excelentes predições, seus resultados podem ser difíceis de se interpretar;
- A seguir, voltaremos ao *Gene expression data*, a fim de prever pacientes com **câncer** versus **normal**;
- Para os dois modelos *boosted* utilizamos  $\lambda = 0,01$ . E a taxa de erro para única árvore é de 24%;

- O parâmetro  $\lambda$  controla a taxa com que o algoritmo aprende (tipicamente são 0,01 ou 0,001).
- Quando muito pequenos exigem que o número de árvores,  $B$ , seja grande;
- Diferentemente de *bagging* e *random forests*, *boosting* pode *overfit* se  $B$  é muito grande. Utilizamos CV para selecionar esta quantidade;
- Muito embora *random forests* e *boosting* apresentem excelentes predições, seus resultados podem ser difíceis de se interpretar;
- A seguir, voltaremos ao *Gene expression data*, a fim de prever pacientes com **câncer** versus **normal**;
- Para os dois modelos *boosted* utilizamos  $\lambda = 0,01$ . E a taxa de erro para única árvore é de 24%;

- O parâmetro  $\lambda$  controla a taxa com que o algoritmo aprende (tipicamente são 0,01 ou 0,001).
- Quando muito pequenos exigem que o número de árvores,  $B$ , seja grande;
- Diferentemente de *bagging* e *random forests*, *boosting* pode *overfit* se  $B$  é muito grande. Utilizamos CV para selecionar esta quantidade;
- Muito embora *random forests* e *boosting* apresentem excelentes predições, seus resultados podem ser difíceis de se interpretar;
- A seguir, voltaremos ao *Gene expression data*, a fim de prever pacientes com **câncer** versus **normal**;
- Para os dois modelos *boosted* utilizamos  $\lambda = 0,01$ . E a taxa de erro para única árvore é de 24%;

# Exemplo: Gene expression data



- Não vamos entrar em detalhes sobre esta abordagem. O aluno interessado pode encontrar em **Elements of Statistical Learning, capítulo 10**.
- A ideia é ponderar os erros para que nas próximas árvores eles tenham mais importância. Em seguida, combinar os classificadores.

- Não vamos entrar em detalhes sobre esta abordagem. O aluno interessado pode encontrar em **Elements of Statistical Learning, capítulo 10**.
- A ideia é ponderar os erros para que nas próximas árvores eles tenham mais importância. Em seguida, combinar os classificadores.

