MAE 5905: Introdução à Ciência de Dados

Pedro A. Morettin

Instituto de Matemática e Estatística
Universidade de São Paulo
pam@ime.usp.br
http://www.ime.usp.br/∼ pam

Aula 11

15 de junho de 2021

Sumário

Preliminares I

- Modelos baseados em árvores foram desenvolvidos por Leo Breiman e associados e são bastante utilizados tanto para classificação quanto para previsão.
- Esses modelos são baseados numa segmentação do espaço gerado pelas variáveis explicativas (preditoras) em algumas regiões em que ou a moda (no caso de variáveis respostas categorizadas) ou a média (no caso de variáveis contínuas) é utilizada como predição.
- A definição dessas regiões é baseada em alguma medida de erro de previsão (ou de classificação). Em geral, as árvores são construídas a partir de um conjunto de observações de treinamento e testadas em um conjunto de observações de teste
- Os modelos de árvores de decisão são conceitualmente e computacionalmente simples e bastante populares em função de sua interpretabilidade, apesar de serem menos precisos que outros modelos mais complexos.

Preliminares II

- Generalizações dos modelos originais, conhecidos como florestas aleatórias (*random forests*) costumam apresentar grande precisão, mesmo quando comparados com modelos lineares, porém pecam pela dificuldade de interpretação. A referência básica para esse tópico é Breiman et al. (1984). O texto de Hastie and Tibshirani (1990) também contém resultados sobre esse tópico.
- Para predizer o valor de uma variável resposta Y (no caso de variáveis contínuas) ou classificar as observações em uma de suas categorias (no caso de variáveis categorizadas) a partir de um conjunto de variáveis preditoras $X_1, \ldots, X_p$, o algoritmo usado na construção de árvores de decisão consiste essencialmente na determinação das regiões (retângulos mutuamente exclusivos) em que o espaço das variáveis preditoras é particionado. A metodologia desenvolvida em Breiman et al. (1994), e designada CART (de *Classification And Regression Trees*) é baseada na seguinte estratégia:
  (a) Considere uma partição do espaço das variáveis preditoras (conjuntos dos possíveis valores de $X_1, \ldots, X_p$) em M regiões, $R_1, \ldots, R_M$.

Preliminares III

(b) Para cada observação pertencente a R_j, o previsor (ou categoria) de Y (que designaremos $\widehat{Y}_{R_j}$) será a moda (no caso discreto), a média (no caso contínuo) ou a porcentagem (no caso categorizado) dos valores de Y correspondentes àqueles com valores de $X_1, \ldots, X_p$ em R_j.

- Embora a partição do espaço das variáveis preditoras seja arbitrária, usualmente ela é composta por retângulos p-dimensionais que devem ser construídos de modo a minimizar alguma medida de erro de previsão ou de classificação (que explicitaremos posteriormente).
- Como esse procedimento geralmente não é computacionalmente factível dado o número de partições possíveis, mesmo com p moderado, usa-se uma **divisão binária recursiva** (*recursive binary splitting, RBS*) que é uma abordagem top-down and greedy, segundo James et al. (2013).
- Dado o vetor de variáveis preditoras $\mathbf{X} = (X_1, \ldots, X_p)^\top$, o algoritmo consiste dos passos:
  (i) Selecione uma variável preditora X_j e um limiar (ou ponto de corte) t, de modo que a divisão do espaço das variáveis preditoras nas regiões $\{\mathbf{X} : X_j < t\}$ e $\{\mathbf{X} : X_j \geq t\}$ corresponda ao menor erro de predição (ou de classificação).

Preliminares IV

(ii) Para todos os pares (j, t), considere as regiões

$$R_1(j,t) = \{\mathbf{X} : X_j < t\}, \quad R_2(j,t) = \{\mathbf{X} : X_j \geq t\}$$

e encontre o par (j, s) que minimize o erro de predição (ou de classificação) adotado.

(iii) Repita o procedimento, agora dividindo uma das duas regiões encontradas, obtendo três regiões; depois divida cada uma dessas três regiões minimizando o erro de predição (ou de classificação);

(iv) Continue o processo até que algum critério de parada seja satisfeito.

- Um possível critério de parada consiste na obtenção de um número mínimo fixado de observações em cada região.

Árvores para Classificação

- Quando a variável resposta Y é categorizada, o objetivo é identificar a classe mais provável (classe modal) associada aos valores $\mathbf{X} = (X_1, \ldots, X_p)^\top$ das variáveis preditoras.
- Neste caso, uma medida de erro de classificação, comumente denominada taxa de erros de classificação (TEC) é a proporção de observações do conjunto de treinamento que não pertencem à classe modal.
- Outras medidas de erro de classificação, como entropia ou índice de Gini também podem ser usadas.
- Admitamos que a variável resposta tenha K classes e que o espaço de variáveis preditoras seja particionado em M regiões. Designando por $\widehat{p}_{mk}$, a proporção de observações de treinamento da m-ésima região, $m = 1, \ldots, M$, pertencentes à k-ésima classe $k = 1, \ldots, K$, a taxa de erros de classificação dos elementos pertencentes à m-ésima região é

$$TEC_m = 1 - \max_k(\widehat{p}_{mk}).$$

Árvores para Classificação

- Como alternativa para as taxas de erros de classificação, pode-se usar o **índice de Gini** definido como

$$G_m = \sum_{k=1}^{K} \widehat{p}_{mk}(1 - \widehat{p}_{mk}),$$

que, essencialmente, corresponde à soma das variâncias das proporções de classificação em cada classe. Quando o valor de $\widehat{p}_{mk}$ para um dado nó m estiver próximo de 1 para uma dada categoria k e estiver próximo de zero para as demais categorias, o índice de Gini correspondente estará próximo de zero, indicando que para esse nó, uma das K categorias concentrará uma grande proporção dos elementos do conjunto de dados; poucos deles serão classificadas nas demais $K - 1$ categorias. Quanto mais concentrados em uma categoria forem as classificações em um dado nó, tanto maior será o seu grau de **pureza**.

- Outra medida utilizada com o mesmo propósito e que tem características similares àquelas do coeficiente de Gini é a **entropia cruzada**, definida como

$$ET_m = \sum_{k=1}^{K} \widehat{p}_{mk} \log(\widehat{p}_{mk}).$$

Árvores–Exemplo 1

- Vários pacotes, tree, partykit, rpart, caret podem ser utilizados com esse propósito. Cada um desses pacotes é regido por parâmetros que controlam diferentes aspectos da construção das árvores. Consultar os manuais correspondentes para nortear uma seleção adequada a problemas específicos.
- **Exemplo 1.** Consideremos novamente os dados analisados no Exemplo 9.2, disponíveis no arquivo tipofacial, extraídos de um estudo cujo objetivo era avaliar se duas ou mais medidas ortodônticas poderiam ser utilizadas para classificar indivíduos segundo o tipo facial (braquicéfalo, mesocéfalo ou dolicocéfalo).
  Como no Exemplo 9.2, para efeitos didáticos consideramos apenas duas variáveis preditoras, correspondentes a duas distâncias de importância ortodôntica, nomeadamente, a altura facial (altfac) e a profundidade facial (proffac).

Árvores–Exemplo 1

- Os comandos do pacote `partykit` (com os parâmetros *default*) para a construção da árvore de classificação e do gráfico correspondente seguem juntamente com os resultados

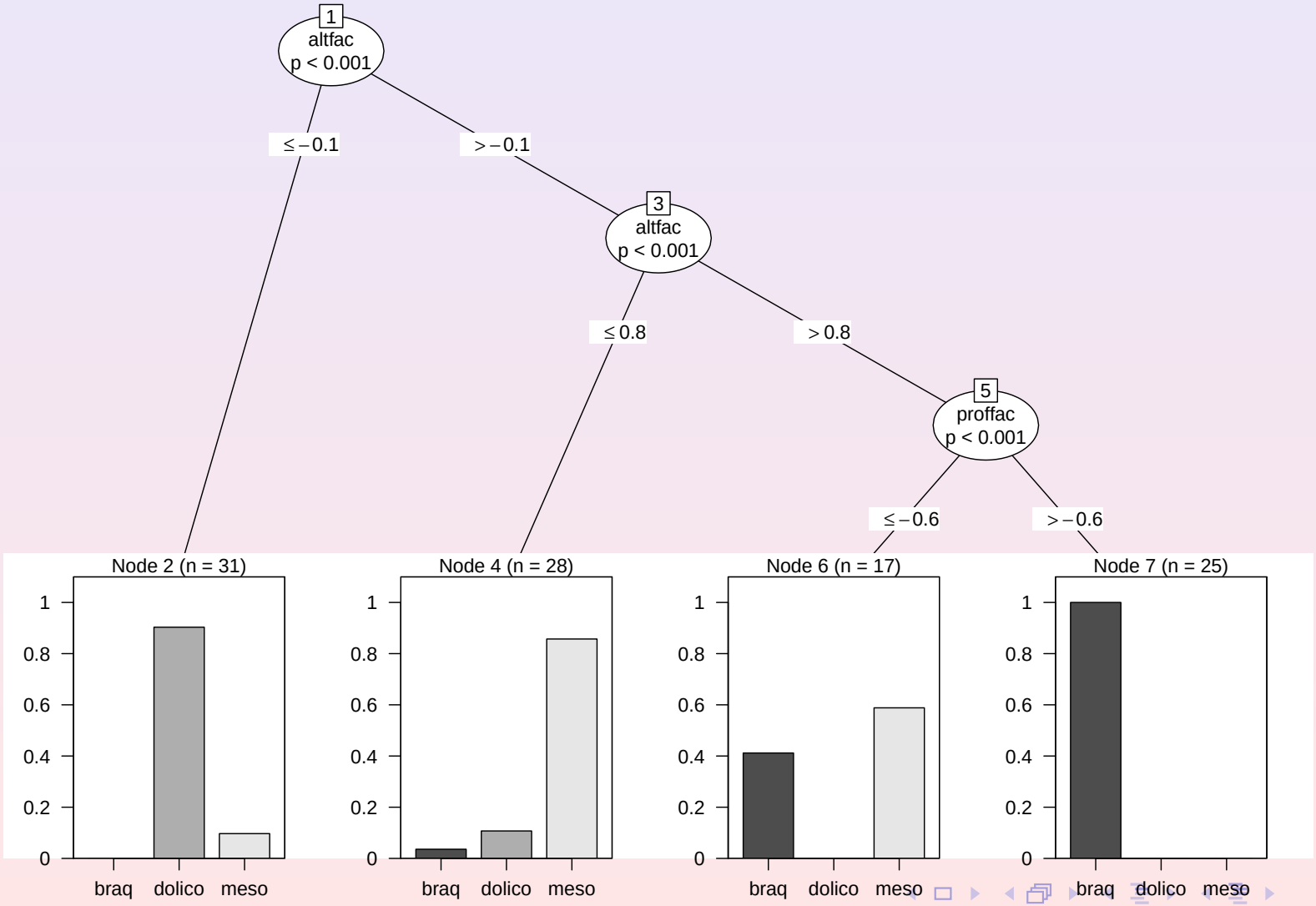
```
facetree <- ctree(grupo ~ altfac + proffac, data=face)
facetree

Model formula:
grupo ~ altfac + proffac

Fitted party:
[1] root
|   [2] altfac <= -0.1: dolico (n = 31, err = 9.7%)
|   [3] altfac > -0.1
|   |   [4] altfac <= 0.8: meso (n = 28, err = 14.3%)
|   |   [5] altfac > 0.8
|   |   |   [6] proffac <= -0.6: meso (n = 17, err = 41.2%)
|   |   |   [7] proffac > -0.6: braq (n = 25, err = 0.0%)

Number of inner nodes:    3
Number of terminal nodes: 4
> plot(facetree)
```

Árvores–Exemplo 1



Árvores–Exemplo 1

- Na Figura 1, os símbolos ovais, que indicam divisões no espaço das variáveis preditoras são chamados de nós internos e os retângulos, que indicam as divisões finais são conhecidos por nós terminais ou folhas da árvore.
- Neste exemplo, temos 3 nós internos e 4 nós terminais. Os segmentos que unem os nós são os galhos da árvore.
- As barras em cada nó terminal indicam a frequência relativa com que as observações que satisfazem as restrições definidoras de cada galho são classificadas nas categorias da variável resposta.
- As regiões em que o espaço das variáveis preditoras foi particionado estão indicadas na Figura 2.

Árvores–Exemplo 1

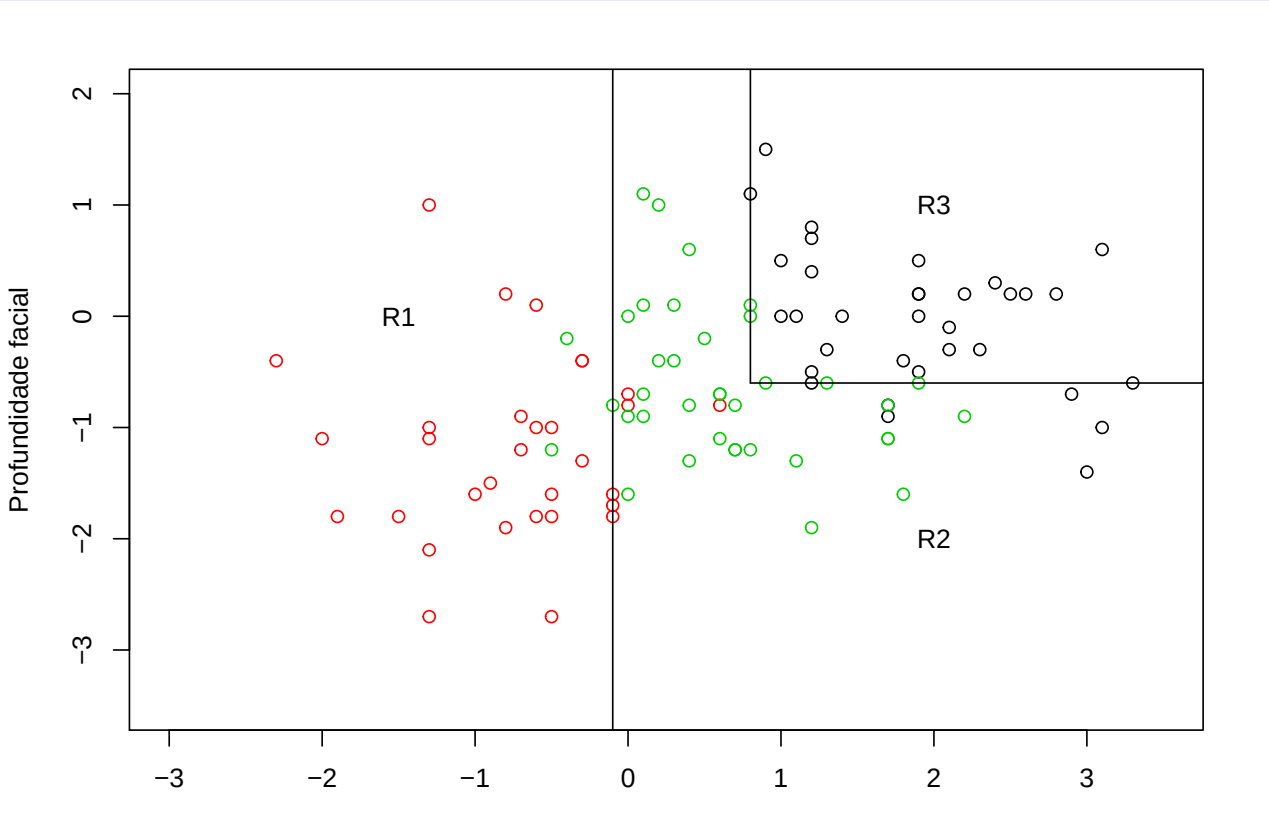


Figura: Regiões em que o espaço das variáveis preditoras do Exemplo 1 está particionado (círculos vermelhos = dolicocéfalos, verdes = mesocéfalos, pretos = braquicéfalos).

Árvores–Exemplo 1

- A variável preditora principal e o correspondente ponto de corte que minimiza a taxa de erros de classificação são altfac e $t = -0,1$, com $TEC = 9,7\%$.
- Para observações com valores $\texttt{altfac} \leq -0,1$ (região R_1), classificamos o indivíduo como dolicocéfalo.
- Para valores de $\texttt{altfac} > -0,1$, a classificação depende do valor de proffac. Nesse caso, se altfac estiver entre $-0,1 \leq 0,8$, (região R_2), classificamos o indivíduo como mesocéfalo com $TEC = 14,3\%$.
- Se, por outro lado, $\texttt{altfac} > 0,8$ e $\texttt{proffac} \leq -0,6$, também classificamos o indivíduo como mesocéfalo (região R_2), com $TEC = 41,2\%$.
- Agora, se $\texttt{altfac} > 0,8$ e $\texttt{proffac} > -0,6$, o indivíduo deve ser classificado como braquicéfalo (região R_3), com $TEC = 0,0\%$.

Árvores–Exemplo 1

- Uma tabela com as classificações originais e preditas por meio da árvore de classificação é obtida por meio do comando predict

```
table(predict(facetree), face\$grupo)
```

```
         braq dolico meso
braq       25      0    0
dolico      0     28    3
meso        8      3   34
```

- A acurácia do classificador é de 86% e $TEC = 14\%$.

Árvores–Exemplo 2

- Um dos problemas associados à construção de árvores de decisão está relacionado com o **sobreajuste** (*overfitting*).
- Se não impusermos uma regra de parada para a construção dos nós, o processo é de tal forma flexível que o resultado final pode ter tantos nós terminais quantas forem as observações, gerando uma árvore em que cada observação é classificada perfeitamente.
- Para contornar esse problema, pode-se considerar o procedimento conhecido como **poda**, que engloba técnicas para limitar o número de nós terminais das árvores.
- A ideia que fundamenta essas técnicas está na construção de árvores com menos nós e, consequentemente, com menor variância e interpretabilidade. O preço a pagar é um pequeno aumento no viés.

Árvores–Exemplo 2

- **Exemplo 2.** Consideremos agora os dados do arquivo coronarias provenientes de um estudo cujo objetivo era avaliar fatores prognósticos de lesão obstrutiva coronariana (`L03`) com categorias 1 :$\geq$ 50% ou 0 :$<$ 50% em 1500 pacientes.
- Embora tenham sido observadas cerca de 70 variáveis preditoras, aqui trabalharemos com `SEXO` (0=fem, 1=masc), `DIAB` (diabetes: 0=não, 1=sim), `IMC` (índice de massa corpórea), `IDADE1` (idade), `TRIG` (concentração de triglicérides) e `GLIC` (concentração de glicose).
- Com propósito didático eliminamos casos em que havia dados omissos em alguma dessas variáveis, de forma que 1034 pacientes foram considerados na análise.
- Os comandos do pacote rpart para a construção da árvore de classificação por meio de validação cruzada com os resultados correspondentes e o gráfico associado, disposto na Figura 3 seguem:

Árvores–Exemplo 2

```
lesaoobs <- rpart(formula = LO3 ~ IDADE1 + SEXO +  GLIC + DIAB +
            IMC + TRIG, method="class", data = coronarias3,
xval = 20,minsplit=10, cp=0.005)
printcp(lesaoobs)

Variables actually used in tree construction:
[1] GLIC IDADE1  IMC  SEXO  TRIG

Root node error: 331/1034= 0.32012
n= 1034
```

Árvores–Exemplo 2

```
          CP nsplit rel error  xerror     xstd
1 0.0453172      0   1.00000 1.00000 0.045321
2 0.0392749      3   0.85801 0.97281 0.044986
3 0.0135952      4   0.81873 0.88218 0.043733
4 0.0090634      6   0.79154 0.87915 0.043687
5 0.0075529      7   0.78248 0.88822 0.043823
6 0.0060423     11   0.75227 0.92749 0.044386
7 0.0050000     13   0.74018 0.97885 0.045062
```

- A função rpart() tem um procedimento de VC embutido, ou seja, usa o CTr para construir a árvore e outro (CTeste) para avaliar a taxa de erros de previsão, repetindo o processo várias vezes. Cada linha da tabela representa um nível diferente da árvore. O erro de classificação obtido por validação cruzada tende a aumentar, pelo menos após o nível ótimo.
- A taxa de erro no nó raiz (root node error) corresponde à decisão obtida quando todas as observações do conjunto de dados são classificados na categoria LO3$>$ 50%.
- O erro relativo (rel error) mede o erro relativo de classificação dos dados de treinamento obtido por intermédio da árvore. O termo rotulado xerror mede o erro relativo de classificação dos elementos do conjunto teste por intermédio da árvore construída com os dados do CTr, e o correspondente erro padrão é rotulado xstd.

Árvores–Exemplo 2

- O produto **root node error** $\times$ **rel error** corresponde ao valor absoluto da taxa de erros obtida no CTr (0,263=0,320 $\times$0,740 para a árvore com 13 subdivisões). O produto **root node error** $\times$ **xerror** corresponde ao valor absoluto da taxa de erros obtida no CTeste e corresponde a uma medida mais objetiva da acurácia da previsão (0,313=0,320 $\times$ 0,979 para a árvore com 13 subdivisões).
- A árvore gerada obtida por intermédio do comando

```
> rpart.plot(lesaoobs, clip.right.labs = TRUE, under = FALSE,
                 extra = 101, type=4)
```

está disposto na Figura 3

Árvores–Exemplo 2

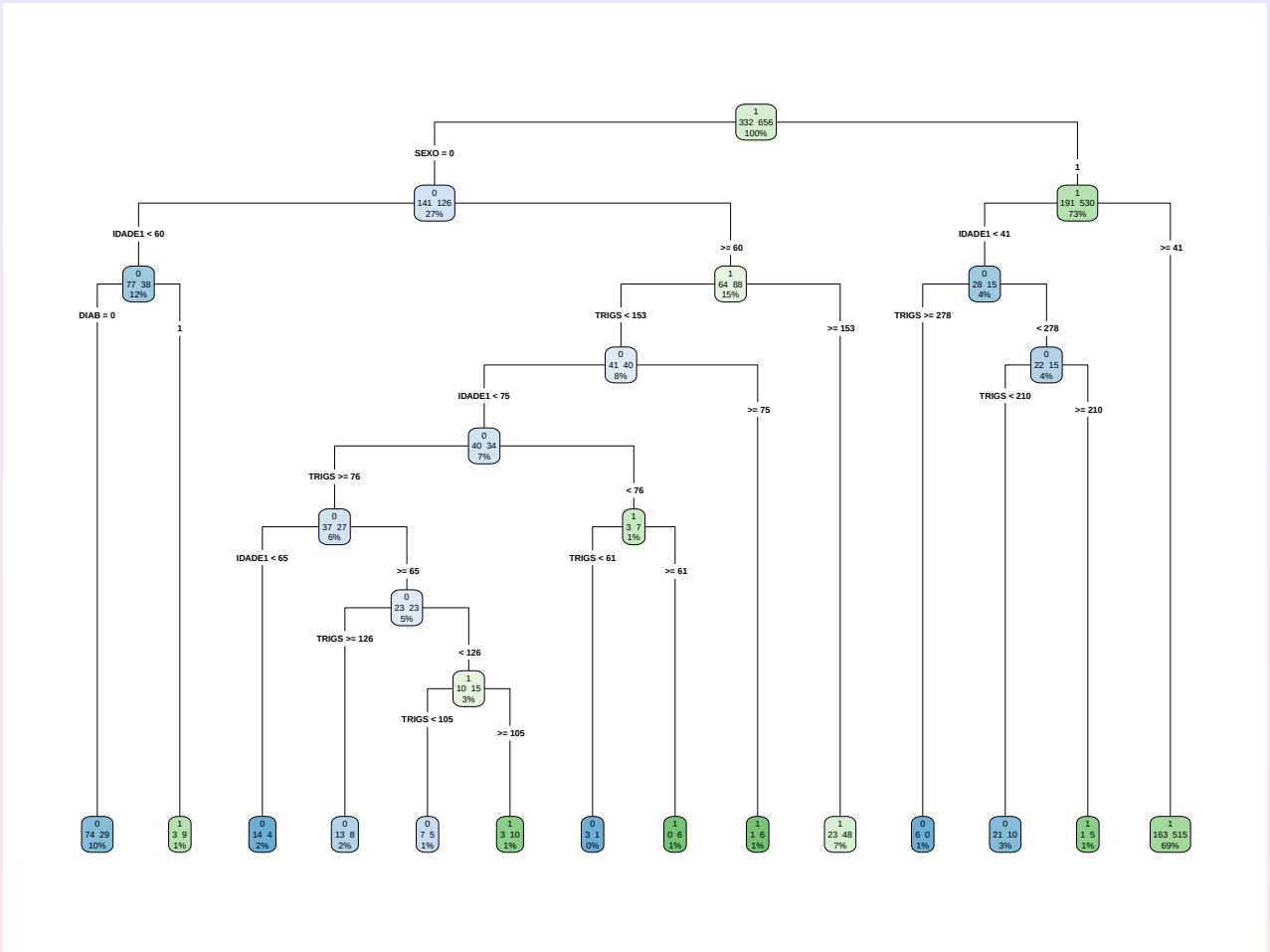


Figura: Árvore de decisão para os dados do Exemplo 2.

Árvores–Exemplo 2

- A tabela com as classificações originais e preditas é obtida por meio do comando

```
table(coronarias\$LO3, predict(lesaoobs, type="class"))
     0   1
  0 145 186
  1  59 644
```

  e indica um erro de classificação de $23,4\% = (186 + 59)/1034$.
- O parâmetro CP (complexity parameter) serve para controlar o tamanho da árvore e corresponde ao menor incremento no custo do modelo necessário para a adição de uma nova variável.
- Um gráfico com a variação desse parâmetro com o número de nós, obtido com o comando `plotcp()` pode ser visto na Figura 4.

Árvores–Exemplo 2

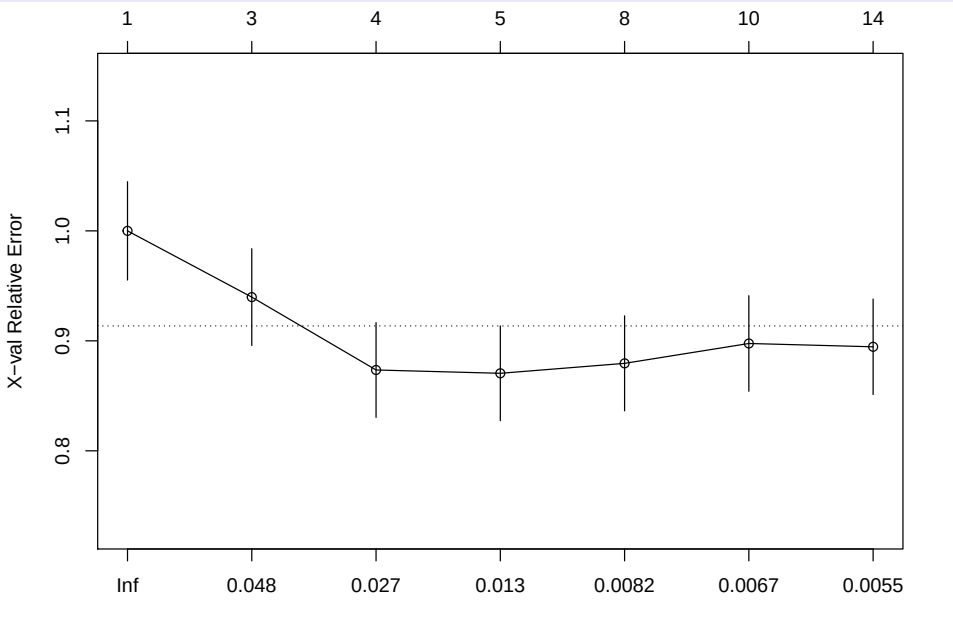


Figura: Gráfico CP para o ajuste da árvore aos dados do Exemplo 2.

Nesse gráfico procura-se o nível para o qual o erro relativo obtido por VC é mínimo. Para o exemplo, esse nível é 4, sugerindo que a árvore obtida no exemplo deve ser podada.

Árvores–Exemplo 3

- Vejamos, agora, ver um exemplo usando o pacote tree.
- **Exemplo 3**. Vamos considerar os dados de crianças que foram submetidas a uma cirurgia da coluna para corrigir cifose congênita. Veja Chambers e Hastie (1992). Os dados contém 81 observações, com as variáveis:

  Y: cifose: uma variável qualitativa (atributo), com os valores *ausente* e *presente*, indicando se cifose estava ausente ou presente após a cirurgia;
  X_1: Age, em meses;
  X_2: Number, o número de vértebras envolvidas;
  X_3: Start, o número da primeira vértebra (a partir do topo) operada.

- O sumário do ajuste e a Figura 5 estão ilustradas a seguir.

Árvores–Exemplo 3

```
Classification tree:
tree(formula = Kyphosis ~ Age + Number + Start, data = kyphosis)
Number of terminal nodes:  10
Residual mean deviance:  0.5809 = 41.24 / 71
Misclassification error rate: 0.1235 = 10 / 81
```

- Vemos que a taxa do erro de classificação é $12,35\%$ e o desvio (*deviance*) é definido por

$$-2\sum_m\sum Kn_{mk}\log\hat{p}_{mk},$$

onde n_{mk} é o número de observações no m-ésimo nó terminal que petence à k-ésima class. Um desvio pequeno indica um bom ajuste aos dados de treinamento. O desvio médio da saída acima é dado pelo desvio dividido por $n - n_0$, n_0 sendo o número de nós terminais, no caso, 10.

- As regiões que determinam a figura são retângulos no espaço tridimensional, logo é complicado, ou não é possível, vê-las em um gráfico.

Árvores–Exemplo 3

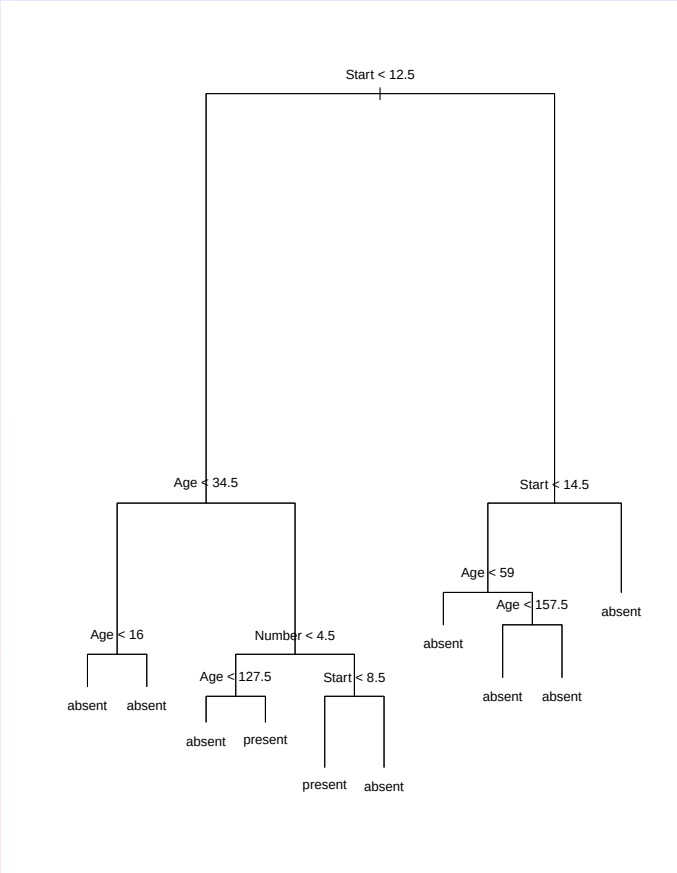


Figura: Árvore para o Exemplo 10.3, com 3 preditores.

Árvores–Exemplo 3

Para poder ver uma partição, vamos considerar somente dois preditores, Start e Age. A árvore correspondente está na Figura 6 e a partição na Figura 7.

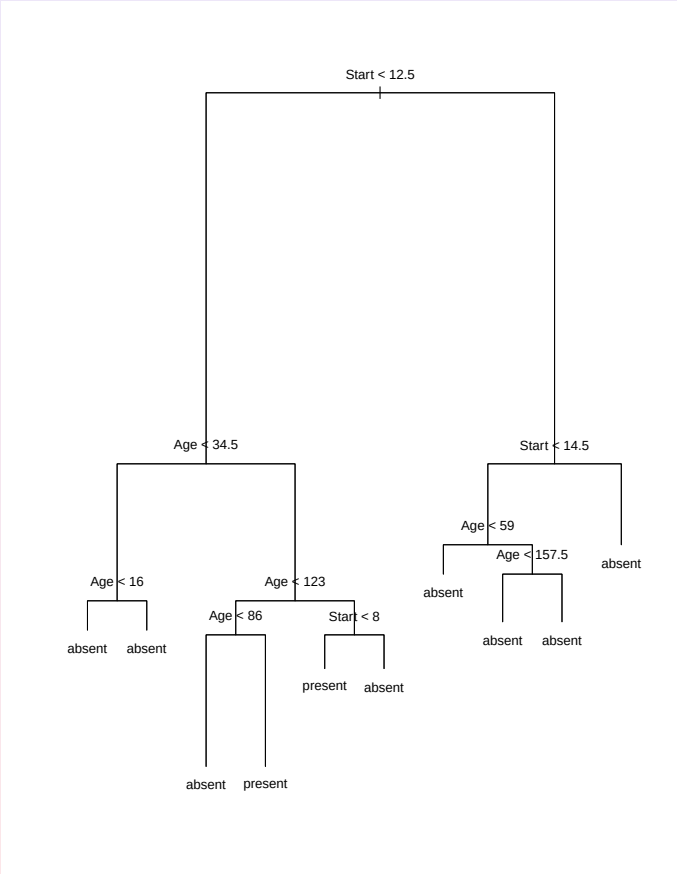


Figura: Árvore para o Exemplo 10.3, com 2 preditores, Start e Age.

Árvores–Exemplo 3

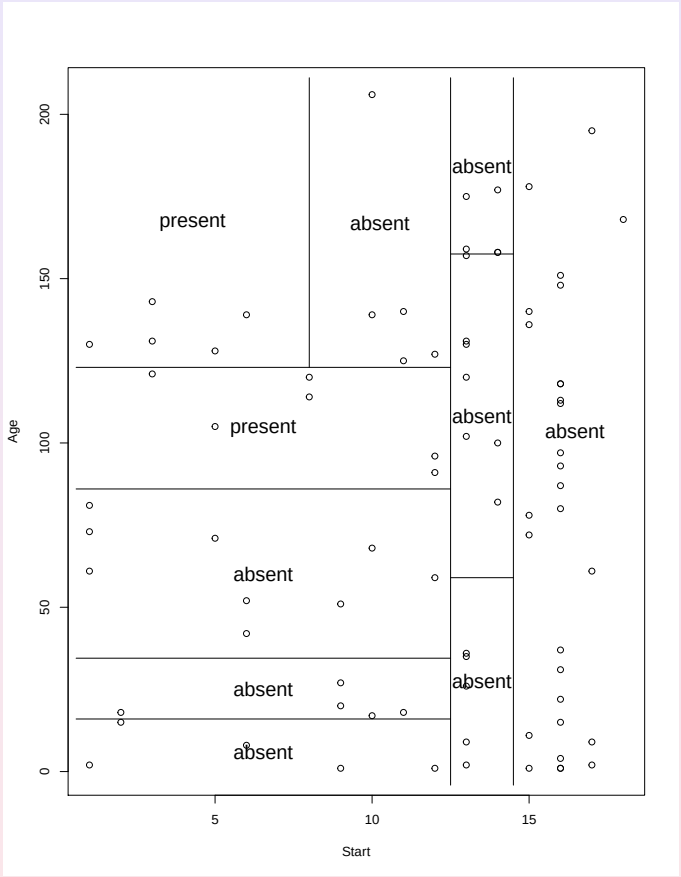


Figura: Regiões para o Exemplo 10.3, com 2 preditores.

Árvores–Exemplo 3

Com relação à Figura 5, algumas regiões que podem ser deduzidas são (sendo $\mathbf{X} = (X_1, X_2, X_3)^{'}$):

$R_1 = \{\mathbf{X} : X_1 < 16, X_3 < 12,5\}$, o valor previsto de Y é ausente;
$R_2 = \{\mathbf{X} : 16 < X_1 < 34,5, X_3 < 12,5\}$, o valor previsto de Y é ausente;
$R_3 = \{\mathbf{X} : 34,5 < X_1 < 127,5, X_2 < 4,5, X_3 < 12,5\}$, o valor previsto de Y é ausente etc.

Poda de uma árvore

- No Exemplo 2 (coronarias), vimos que a árvore deve ser podada, inspecionando o parâmetro de complexidade, CP, que indica valores entre 0,011 e 0,023, com nós entre 5 e 7.
- Uma regra empírica para se efetuar a poda da árvore consiste em escolher a **menor árvore** para a qual o valor de `xerror` é menor do que a soma do menor valor observado de `xerror` com seu erro padrão `xstd`. No exemplo em estudo, o menor valor de `xerror` é $0,87915$ e o de seu erro padrão `xstd` é $0,043687$ de maneira que a árvore a ser construída por meio de poda deverá ser a menor para a qual o valor de `xerror` seja menor que $0,922837$ $(= 0,87915 + 0,043687)$, ou seja a árvore com 4 subdivisões e 5 nós terminais.
- A poda juntamente com o gráfico da árvore podada e a tabela com os correspondentes valores preditos podem ser obtidos com os comandos a seguir:

Poda de uma árvore

```
lesaoobspoda <- prune(lesaoobs, cp = 0.015 ,"CP", minsplit=20, xval=25)
rpart.plot(lesaoobspoda, clip.right.labs = TRUE, under = FALSE,
             extra = 101, type=4)
rpart.rules(lesaoobspoda, cover = TRUE)
  LO3                                                    cover
 0.33 when SEXO is 0 & IDADE1 <  63 & GLIC <  134         13%
 0.35 when SEXO is 1 & IDADE1 <  41                        4%
 0.59 when SEXO is 0 & IDADE1 >= 63 & GLIC <  134         10%
 0.77 when SEXO is 1 & IDADE1 >= 41                       69%
 0.85 when SEXO is 0                & GLIC >= 134          4%
```

Poda de uma árvore

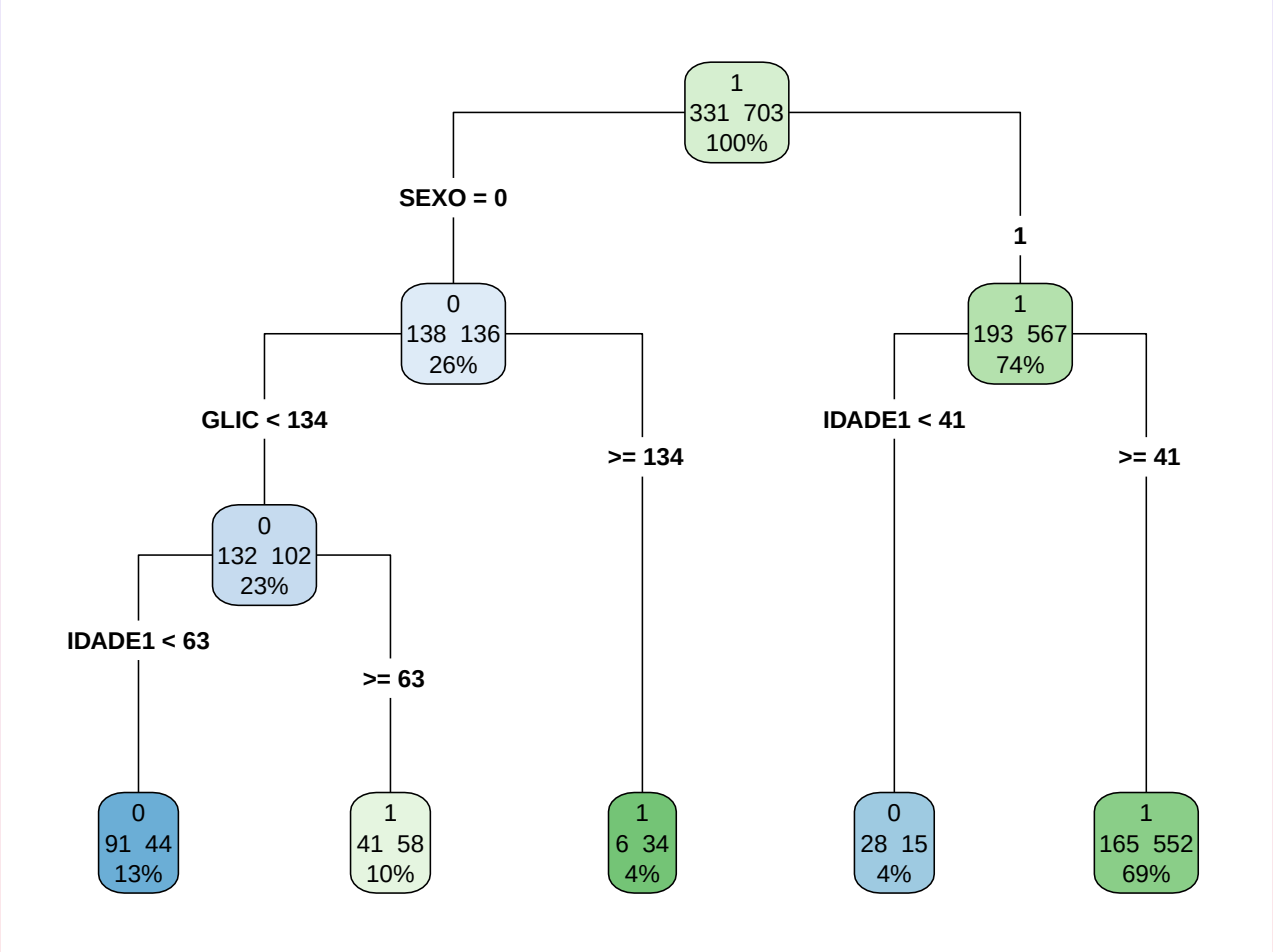


Figura: Árvore (podada) ajustada aos dados do Exemplo 2.

Poda de uma árvore

- O número indicado na parte superior de cada nó da Figura 8 indica a classe majoritária, na qual são classificadas os elementos do conjunto de treinamento; o valor à esquerda no centro do nó representa a frequência desses elementos pertencentes à classe $LO3 = 0$ e o valor à direita corresponde à frequência daqueles pertencentes à classe $LO3 = 1$.
  Na última linha aparece a porcentagem de elementos correspondentes a cada nó terminal.
- A tabela de classificação para o conjunto de dados original (treinamento + validação) obtida a partir da árvore podada é

	0	1
0	119	212
1	59	644

  Nessa tabela, as linhas indicam a classificação real e as colunas informam a classificação predita pela árvore podada. O erro de classificação, $26,2\%$, é ligeiramente maior que o erro obtido com a árvore original, bem mais complexa.

Bagging

- Usualmente, árvores de decisão produzem resultados com grande variância, ou seja, dependendo de como o conjunto de dados é subdividido em conjuntos de treinamento e de teste, as árvores produzidas podem ser diferentes. As técnicas que descreveremos a seguir têm a finalidade de reduzir essa variância.
- A técnica de agregação bootstrap (*bootstrap aggregating*) ou, simplesmente bagging, é um método para gerar múltiplas versões de um previsor (ou classificador) a partir de vários conjuntos de treinamento e, com base nessas versões, construir um previsor (ou classificador) agregado.
- O ideal seria ter vários conjuntos de treinamento, construir previsores e tomar uma média (no caso de regressão) dos previsores. Todavia, na prática, isso não acontece. Uma maneira de prosseguir, é usar réplicas bootstrap do conjunto de treinamento.

Bagging

- Suponha que tenhamos o conjunto de treinamento $(\mathbf{x}_1, y_1), \ldots, (\mathbf{x}_n, y_n)$ e considere o caso de y quantitativa (regressão). Considere B réplicas bootstrap desse conjunto e para cada réplica b, obtemos o previsor de y, $\hat{f}^b(\mathbf{x})$ e construímos o previsor

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

- No caso de classificação, para uma observação teste, considere a classe prevista para cada uma das B árvores e, então, tome como previsor a classe de maior ocorrêcia comum entre os B previsores (voto majoritário). Especificamente,

$$\widehat{c}_{\text{bag}}(\mathbf{x}) = \text{argmax}_k[\#\{(b|\widehat{c}^b(\mathbf{x}) = k\}]$$

  em que $\#\{A\}$ denota a cardinalidade do conjunto A.
- O número de réplicas bootstrap sugerido por Breiman (1996) é cerca de 25. Para detalhes sobre bootstrap veja Efron e Tibshirani (1993) e Notas de Capítulo.

Bagging–Exemplo 4

- **Exemplo 4.** A técnica bagging pode ser aplicada aos dados do Exemplo 2 por meio dos comandos

```
> set.seed(054)
>
> # train bagged model

> lesaoobsbag <- bagging(
+   formula = LO3 ~ SEXO + IDADE1+ GLIC,
+   data = coronarias3,
+   nbagg = 200,
+   coob = TRUE,
+   control = rpart.control(minsplit = 20, cp = 0.015)
+ )
>
> lesaoobspred <- predict(lesaoobsbag, coronarias3)
> table(coronarias3\$LO3, predict(lesaoobsbag, type="class"))

     0   1
  0 117 214
  1  78 625
```

- Variando a semente do processo aleatório, as taxas de erros de classificação giram em torno de 27% a 28%.

Bagging–Exemplo 4

Quatro das 200 árvores obtidas em cada réplica bootstrap podem ser obtidas por meio dos comandos a seguir e estão representadas na Figura 8.

```
as.data.frame(coronarias4)
clr12 = c("#8dd3c7","#ffffb3","#bebada","#fb8072")
n = nrow(coronarias4)
par(mfrow=c(2,2))
sed=c(1,10,22,345)
for(i in 1:4){
  set.seed(sed[i])
  idx = sample(1:100, size=n, replace=TRUE)
  cart =  rpart(LO3 ~ DIAB + IDADE1 + SEXO, data=coronarias4[idx,], mod
  prp(cart, type=1, extra=1, box.col=clr12[i])
}
```

Bagging–Exemplo 4

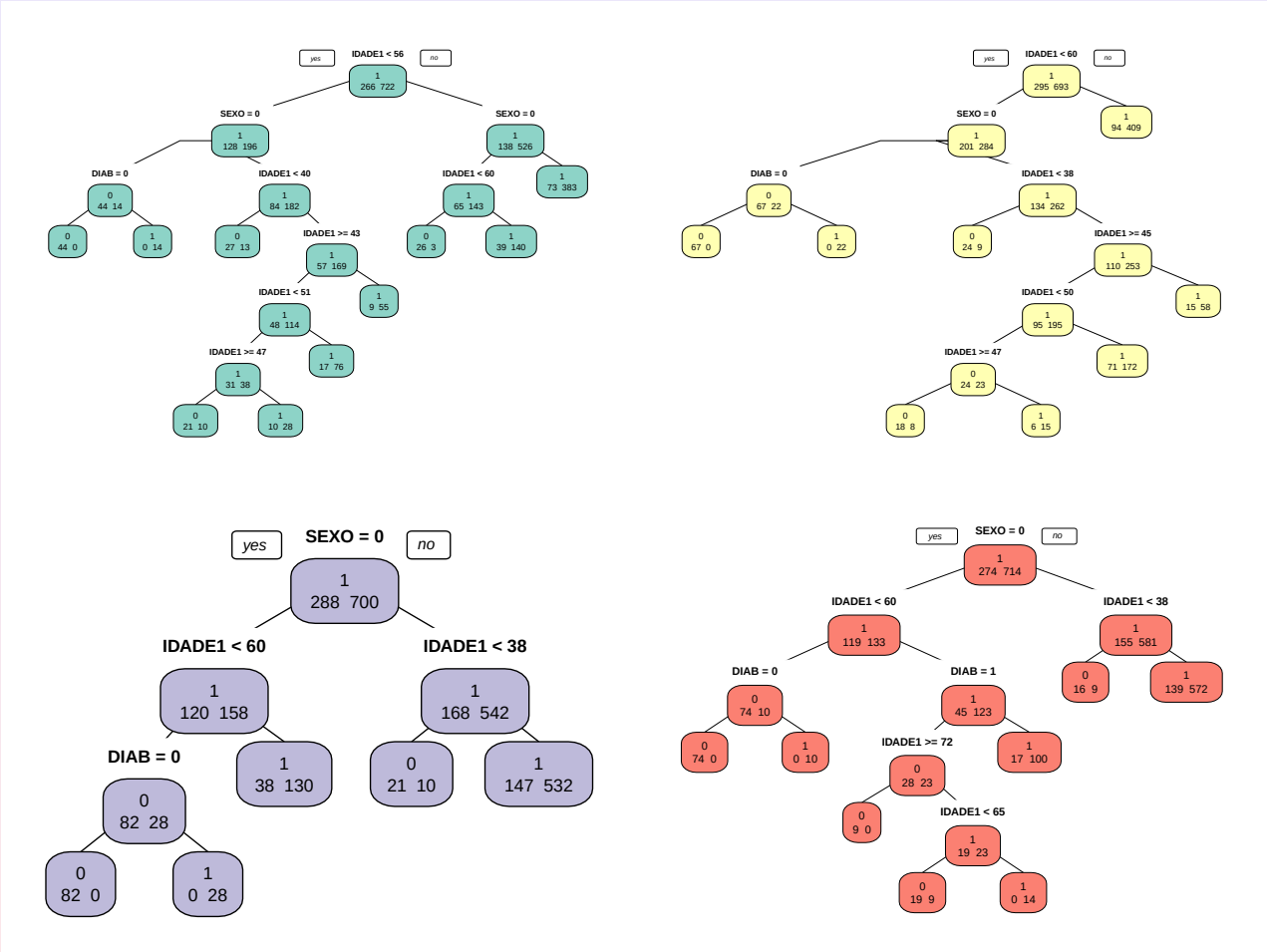


Figura: Exemplos de Árvores obtidas por bagging para os dados do Exemplo 2.

Boosting I

1. O objetivo do procedimento **boosting** é reduzir o viés e a variância em modelos utilizados para aprendizado supervisionado.
2. A ideia básica é considerar um conjunto de previsores (classificadores) fracos de modo a obter um previsor (classificador) forte.
3. Classificadores fracos têm taxas de erro de classificação altas. No caso binário, por exemplo, isso corresponde a uma taxa próxima de 0,50, que seria obtida com uma decisão baseada num lançamento de moeda. Um classificador forte, por outro lado, tem uma taxa de erro de classificação baixa.
4. Diferentemente da técnica bagging, em que B árvores são geradas independentemente por meio de bootstrap, com cada observação tendo a mesma probabilidade de ser selecionada em cada um dos conjuntos de treinamento, no procedimento boosting, as B árvores são geradas sequencialmente a partir de um único conjunto de treinamento, com probabilidades de seleção (pesos) diferentes atribuídos às observações.

Boosting II

5. Observações mal classificadas em uma árvore recebem pesos maiores para seleção na árvore subsequente (obtida do mesmo conjunto de treinamento), com a finalidade de dirigir a atenção aos casos em que a classificação é mais difícil.
6. Em ambos os casos, o classificador final é obtido por meio da aplicação dos B classificadores fracos gerados com as diferentes árvores, por meio do voto majoritário. Além dos pesos atribuídos às observações no processo de geração dos classificadores fracos, o procedimento boosting atribui pesos a cada um deles, em função das taxas de erros de classificação de cada um.
7. Essencialmente, o classificador forte pode ser expresso como

$$\widehat{c}_{\text{boost}}(\mathbf{x}) = \sum_{b=1}^{B} \widehat{c}^{b}(\mathbf{x}) w(b) \tag{2}$$

em que $w(b)$ é o peso atribuído ao classificador $\widehat{c}^{b}(\mathbf{x})$.

Boosting III

8. Se por um lado, o procedimento bagging raramente reduz o viés quando comparado com aquele obtido com uma única árvore de decisão, por outro, ele tem a característica de evitar o sobreajuste. Essas características são invertidas com o procedimento boosting.
9. Existem vários algoritmos para a implementação de boosting. O mais usado é o algoritmo conhecido como AdaBoost (de *adaptive boosting*), desenvolvido por Freund e Schapire (1997). Dada a dificuldade do processo de otimização de (2), esse algoritmo considera um processo iterativo de otimização que produz bons resultados embora não sejam ótimos.
10. A ideia é adicionar o melhor classificador fraco numa determinada iteração ao classificador fraco obtido na iteração anterior, ou seja, considerar o processo

$$\widehat{c}^{b}_{boost}(\mathbf{x}) = \widehat{c}^{b-1}_{boost}(\mathbf{x}) + \widehat{c}^{b}(\mathbf{x})w(b)$$

em que $\widehat{c}^{b}_{boost}(\mathbf{x})$ é o classificador com o melhor incremento no desempenho relativamente ao classificador $\widehat{c}^{b-1}_{boost}(\mathbf{x})$.

Boosting IV

11. Nesse contexto, a escolha de $[\widehat{c}^b(\mathbf{x}), w(b)]$ deve satisfazer

$$[\widehat{c}^b(\mathbf{x}), w(b)] = \text{argmin}_{[c^b(\mathbf{x}), w(b)]}\{E[\widehat{c}^{b-1}_{boost}(\mathbf{x}) + \widehat{c}^b(\mathbf{x})w(b)]\}$$

em que $E[c^b]$ denota o erro de classificação do classificador c^b.

12. Consideremos, por exemplo, um problema de classificação binária baseado num conjunto de treinamento com N observações. No algoritmo **AdaBoost**, o classificador sempre parte de um único nó (conhecido como stump), em que cada observação tem peso $1/N$.
13. O ajuste por meio desse algoritmo é realizado por meio dos seguintes passos:
    1) Ajuste o melhor classificador (fraco) com os pesos atuais e repita os passos seguintes para os $B - 1$ classificadores subsequentes.
    2) Calcule o valor do peso a ser atribuído ao classificador fraco corrente a partir de alguma métrica que indique quanto esse classificador contribui para o classificador forte corrente.
    3) Atualize o classificador forte adicionando o classificador fraco multiplicado pelo peso calculado no passo anterior.

Boosting V

4) Com esse classificador forte, calcule os pesos atribuídos às observações de forma a indicar quais devem ser o foco da próxima iteração (pesos atribuídos às observações mal classificadas devem ser maiores que pesos atribuídos a observações bem classificadas.

14. Os algoritmos para implementação de boosting têm 3 parâmetros:

    (i) o número de árvores, B, que pode ser determinado por validação cruzada;

    (ii) parâmetro de encolhimento (*shrinkage*), $\lambda > 0$, pequeno, da ordem de 0,01 ou 0,001, que controla a velocidade do aprendizado;

    (iii) o número de divisões em cada árvore, d; como vimos, o AdaBoost, usa $d = 1$ e, em geral, esse valor funciona bem.

15. O pacote gbm implementa o boosting e o pacote adabag implementa o algoritmo AdaBoost.

Boosting–Exemplo 5

Exemplo 5. Os dados do CD-esteira contêm informações de 16 variáveis, sendo 4 qualitativas (Etiologia, Sexo, Classe funcional NYHA e Classe funcional WEBER) além de 13 variáveis quantitativas [Idade, Altura, Peso, Superfície corporal, Índice de massa corpórea (IMC), Carga, Frequência cardíaca (FC), VO2 RER, VO2/FC, VE/VO2,VE/VCO2] em diversas fases (REP,LAN,PCR e PICO) de avaliação de um teste de esforço realizado em esteira ergométrica. A descrição completa das variáveis está disponível no arquivo dos dados. Neste exemplo vamos usar as variáveis Carga, Idade, IMC e Peso na fase LAN (limiar anaeróbico) como preditores e VO2 (consumo de oxigênio,como resposta. Para efeito do exemplo, essas variáveis, com as respectivas unidades de medida, serão denotadas como:

Y: consumo de oxigênio (VO2), em $mL/kg/min$;
X_1: carga na esteira, em W (Watts);
X_2: índice de massa corpórea (IMC), em kg/m^2.
X_3: Idade, em anos;
X_4: Peso, em kg.

Boosting–Exemplo 5

Vamos usar o pacote gbm. Com o comando summary() obtemos a influência relativa dos preditores e a figure respectiva, Figura 9.

```
summary(boost.esteira)
var     rel.inf
CARGA   43.46858
IMC     24.22825
Idade   16.84917
Peso    15.45401
```

Vemos que os preditores CARGA e IMC são os mais importantes. Podemos produzir gráficos parciais de dependência para essas duas variáveis (Figura 10). Vemos que o consumo de oxigênio cresce com a CARGA e diminui com o IMC.

Boosting–Exemplo 5

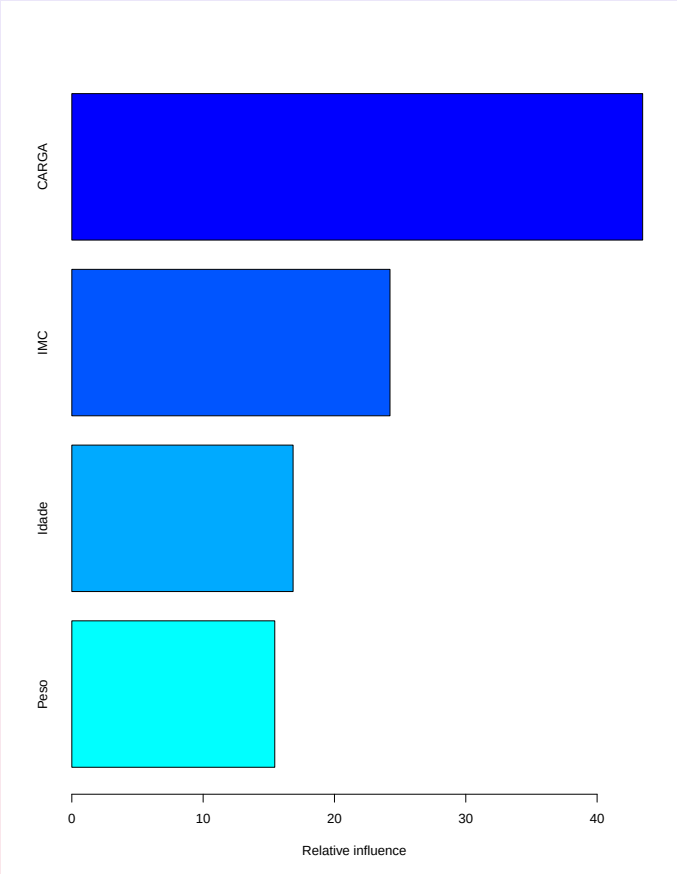


Figura: Influência elativa para os preditores do Exemplo 5.

Boosting–Exemplo 5

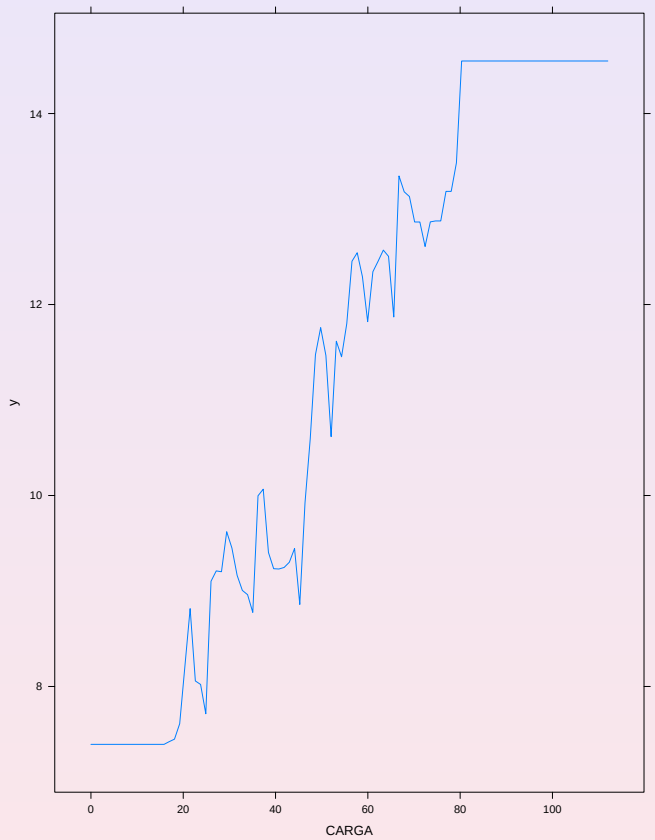


Figura: Consumo de oxigênio versus CARGA .

Boosting–Exemplo 5

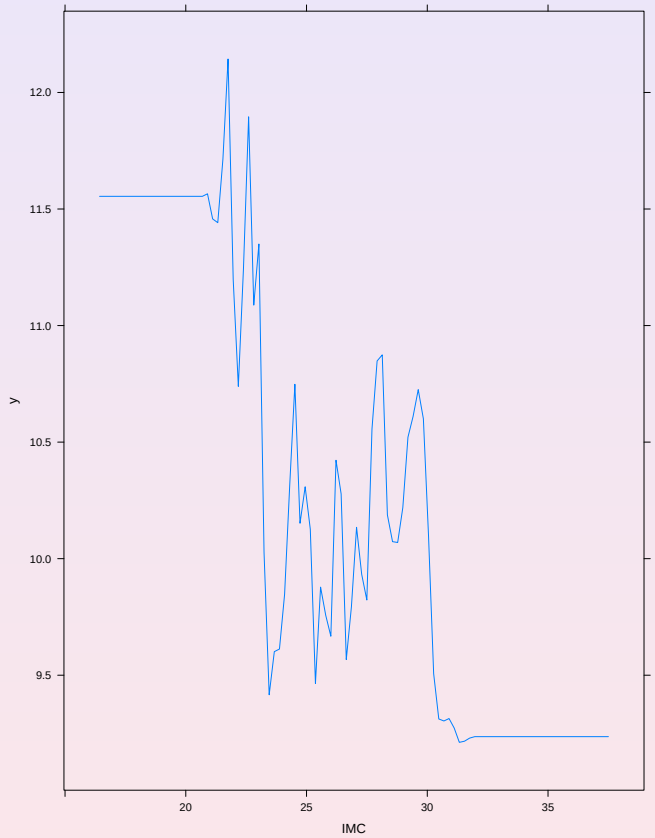


Figura: Consumo de oxigênio versus IMC .

Boosting–Exemplo 5

Agora usamos o modelo via *boosting* para prever VO2 para o conjunto teste.

```
yhat.boost=predict(boost.esteira,newdata=esteira2[-train,],n.trees=5000
mean((yhat.boost-boston.test)^2)
[1] 2.063152e-05
```

Vemos que o EQM obtido via *boosting* é consideravelmente menor do que aquele obtido via *bagging*.

Florestas

- Bagging e florestas aleatórias têm o mesmo objetivo: diminuir a variância e o viés de procedimentos baseados em árvores de decisão.
- Enquanto os dois primeiros enfoques são baseados em um conjunto de B árvores utilizando o mesmo conjunto de p variáveis preditoras em cada um deles, o enfoque conhecido por **florestas aleatórias** utiliza diferentes conjuntos das variáveis preditoras na construção de cada árvore.
- Na construção de um novo nó, em vez de escolher a melhor variável dentre as p disponíveis no conjunto de treinamento, o algoritmo de florestas aleatórias seleciona a melhor delas dentre um conjunto de $m < P$ selecionadas ao acaso. Usualmente, escolhe-se $m \approx \sqrt{p}$.

Florestas

- Formalmente, para cada árvore j, um vetor aleatório θ_j é gerado, independentemente de vetores prévios $\theta_1, \ldots, \theta_{j-1}$, mas com a mesma distribuição. A árvore usando o conjunto de treinamento e θ_j resulta num classificador $\hat{f}_j(\mathbf{x}, \theta_j)$. Cada árvore vota na classe mais popular para o vetor $\mathbf{x}$.
- A acurácia das árvores aleatórias é tão boa quanto a do *AdaBoost* e, às vezes, melhor. O resultado obtido por intermédio do algoritmo de árvores aleatórias em geral é mais robusto com relação a valores atípicos e ruído além de ser mais rápido do que bagging e boosting.
- O pacote randomForest do R implementa florestas. Nesse caso, o número de preditores tem que ser menor do que p.

Florestas–Exemplo 6

- Exemplo 6. Vamos usar o conjunto de dados esteira2 e as variáveis CARGA e IMC para crescer uma floresta. Obtemos o sumário abaixo:

```
Call:
 randomForest(formula = VO2 ~ Idade + CARGA + IMC + Peso,
              data = esteira2, mtry = 2, importance = TRUE,
subset = train)
              Type of random forest: regression
              Number of trees: 500
              No. of variables tried at each split: 2

          Mean of squared residuals: 4.164505
           Percentage Var explained: 52.23
```

- Obtendo-se previsões para o conjunto teste, temos o sumário abaixo:

```
yhat.rf=predict(rf.esteira,newdata=esteira2[-train,])
mean((yhat.rf-esteira.test)^2)
[1] 3.713565
```

- O EQM de previsão via floresta é menor do que aquele via *bagging*, mas maior do que o via *boosting*.

Florestas–Exemplo 6

Um sumário da importância de cada preditor é dado abaixo:

```
summary(boost.esteira)
var  rel.inf
CARGA  43.46858
IMC    24.22825
Idade  16.84917
Peso   15.45401
```

e um gráfico está na Figura 12. Novamente, as variáveis CARGA e IMC são as mais importantes.
Concluindo, sobre os três algoritmos, *bagging*, floresta e *boosting*, o último é o que apresentou o maior poder preditivo.

Florestas–Exemplo 6

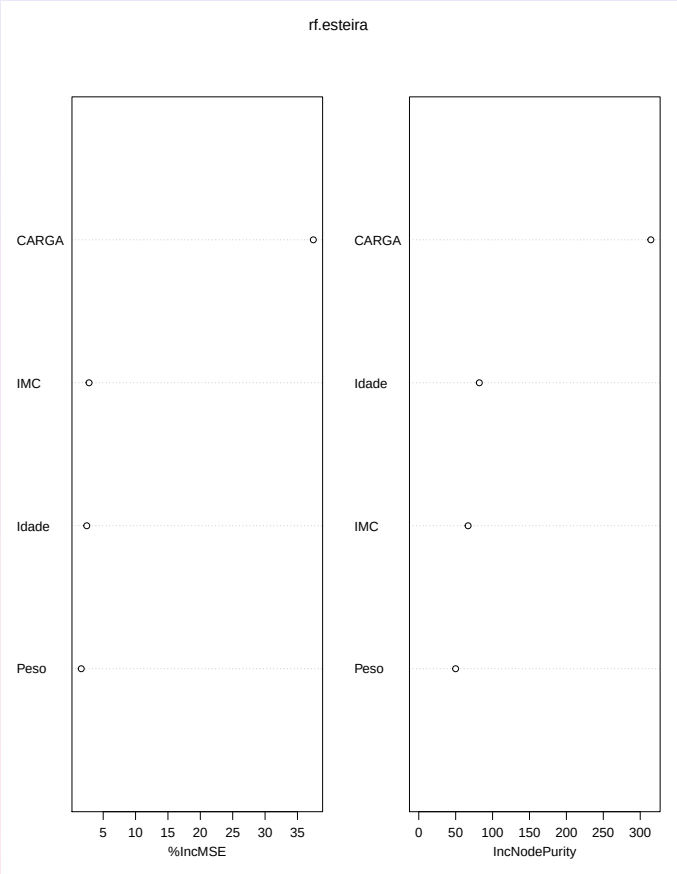


Figura: Importância relativa os preditores do Exemplo 10.5

Árvores para regressão

- Consideremos uma situação com variáveis preditoras $X_1, \ldots, X_p$ e uma variável resposta quantitativa Y. Quando a relação entre variáveis resposta e preditoras for compatível com um modelo linear (no caso de uma relação polinomial, por exemplo), o uso de regressão linear é conveniente e obtemos modelos com interpretabilidade e poder preditivo satisfatórios.
- Quando essa condição não for satisfeita (no caso de modelos não lineares, por exemplo), o uso de árvores pode ser mais apropriado. Além disso, algumas das variáveis preditoras podem ser qualitativas e nesse caso não é necessário transformá-las em **variáveis fictícias** (*dummy variables*) como no caso de modelos de regressão usuais.
- A ideia subjacente é similar àquela empregada em modelos de classificação: subdividir o espaço gerado pelas variáveis explicativas em várias regiões e adotar como previsores, as respostas médias em cada região. As regiões são selecionadas de forma a produzir o menor **erro quadrático médio** ou o menor **coeficiente de determinação**.
- A construção de árvores de regressão pode ser concretizada por meio dos pacotes `tree` e `rpart` entre outros. Ilustraremos a construção de uma árvore para regressão por meio de um exemplo.

Árvores para regressão - Exemplo

- Os dados do arquivo antracose foram extraídos de um estudo cuja finalidade era avaliar o efeito da idade (`idade`), tempo vivendo em São Paulo (`tmunic`), horas diárias em trânsito (`htransp`), carga tabágica (`cargatabag`), classificação sócio-econômica (`ses`), densidade de tráfego na região onde o indivíduo morou (`densid`) e distância mínima entre a residência a vias com alta intensidade de tráfego (`distmin`) num índice de antracose (`antracose`) que é uma medida de fuligem (*black carbon*) depositada no pulmão.
- Como esse índice varia entre 0 e 1, consideramos

$$logrc = \log[\text{índice de antracose}/(1 - \text{índice de antracose})]$$

como variável resposta.

- Inicialmente, construímos uma árvore de regressão para os dados por meio de validação cruzada. Os comandos do pacote `rpart` para gerar a árvore apresentada na Figura 9 são dados a seguir.

Árvores para regressão - Exemplo

```
pulmaotree2 <- rpart(formula = logrc ~ idade + tmunic + htransp +
                     cargatabag + ses + densid + distmin,  data=pulmao,
                     method="anova", xval = 30, cp=0.010)
rpart.plot(pulmaotree2, clip.right.labs = TRUE, under = FALSE,
                extra = 101, type=4)
```

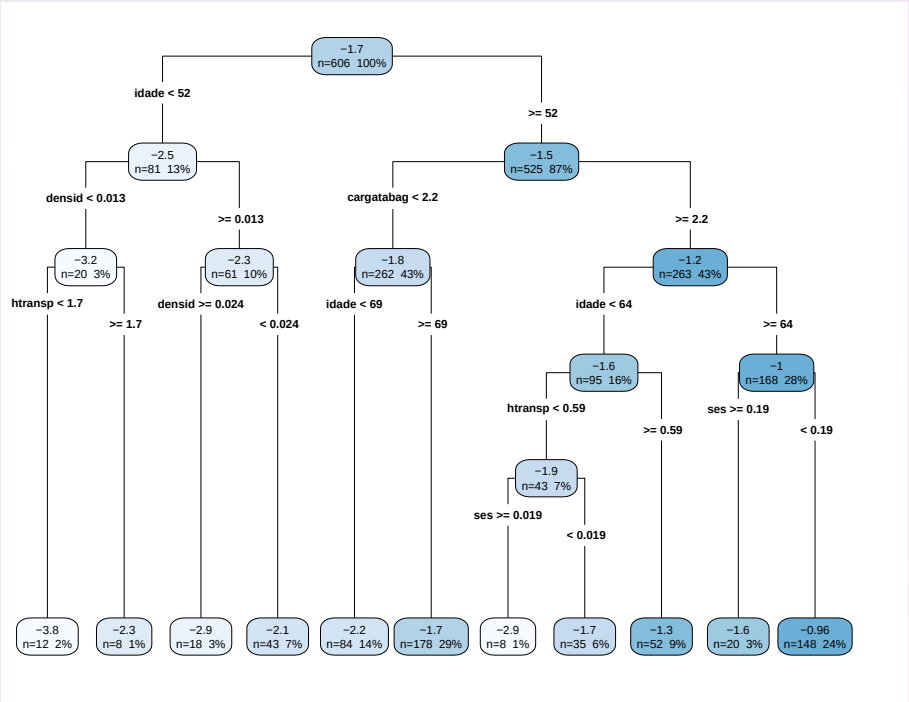


Figura: Árvore de decisão para os dados do Exemplo.

Árvores para regressão - Exemplo

- Os valores apresentados na parte superior de cada nó são as previsões associadas às regiões correspondentes. Na parte inferior encontram-se o número e a porcentagem de elementos incluídos em cada região.
- Para evitar um possível sobreajuste da árvore proposta, convém avaliar o efeito de seu tamanho segundo algum critério. No pacote rpart esse critério é baseado no parâmetro de complexidade (CP) que está relacionado com o número de nós terminais e na relação $1 - R^2$ em que R^2 tem a mesma interpretação do coeficiente de determinação utilizado em modelos lineares.
- Com essa finalidade, podemos utilizar o comando rsq.rpart(pulmaotree2), que gera a tabela com os valores de CP e os gráficos apresentados na Figura 10.

Árvores para regressão - Exemplo

```
Variables actually used in tree construction:
[1] cargatabag densid     htransp    idade      ses
Root node error: 765.87/606 = 1.2638
n= 606
         CP nsplit rel error  xerror     xstd
1  0.087230      0   1.00000 1.00279 0.077419
2  0.062020      1   0.91277 0.96678 0.076624
3  0.025220      2   0.85075 0.91078 0.072406
4  0.024106      3   0.82553 0.91508 0.073489
5  0.015890      4   0.80142 0.85814 0.069326
6  0.014569      5   0.78553 0.87882 0.070312
7  0.011698      6   0.77097 0.89676 0.070309
8  0.011667      7   0.75927 0.90730 0.069025
9  0.011347      8   0.74760 0.91268 0.069066
10 0.010289      9   0.73625 0.91536 0.069189
11 0.010000     10   0.72596 0.91250 0.069202
```

Árvores para regressão - Exemplo

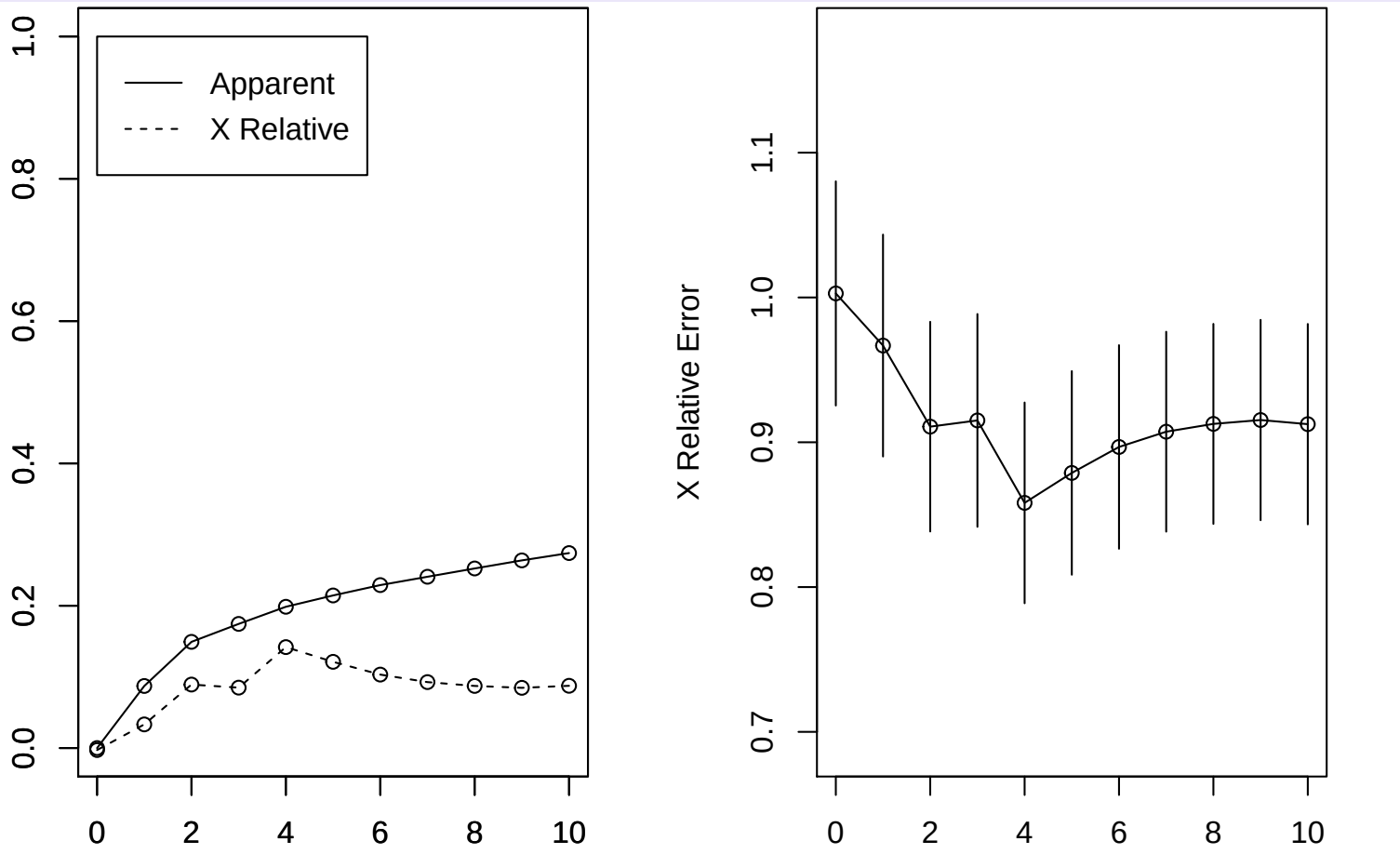


Figura: Efeito do número de divisões para a árvore ajustada aos dados do Exemplo.

Árvores para regressão - Exemplo

Utilizando o mesmo critério aplicado no caso de classificação, a sugestão é podar a árvore, fixando o número de subdivisões em 4, correspondendo a 5 nós terminais. O gráfico da árvore podada (disposto na Figura 11), além da regras de partição do espaço das variáveis explicativas podem ser obtidos com os comandos

```
cpmin <- pulmaotree2$cptable[which.min(pulmaotree2$cptable[,"xerror"]),
                             "CP"]
pulmaotree2poda <-prune(pulmaotree2, cp = cpmin)
rpart.plot(pulmaotree2poda, clip.right.labs = TRUE, under = FALSE,
           extra = 101, type=4)
pulmaotree2poda$cptable
          CP nsplit rel error    xerror       xstd
1 0.08722980      0 1.0000000 1.0027880 0.07741860
2 0.06201953      1 0.9127702 0.9667786 0.07662398
3 0.02521977      2 0.8507507 0.9107847 0.07240566
4 0.02410635      3 0.8255309 0.9150809 0.07348898
5 0.01588985      4 0.8014246 0.8581417 0.06932582
> rpart.rules(pulmaotree2poda, cover = TRUE)
 logrc                                                cover
  -2.5 when idade <  52                                 13%
  -2.2 when idade is 52 to 69 & cargatabag <  2.2       14%
  -1.7 when idade >=       69 & cargatabag <  2.2       29%
  -1.6 when idade is 52 to 64 & cargatabag >= 2.2       16%
  -1.0 when idade >=       64 & cargatabag >= 2.2       28%
```

Árvores para regressão - Exemplo

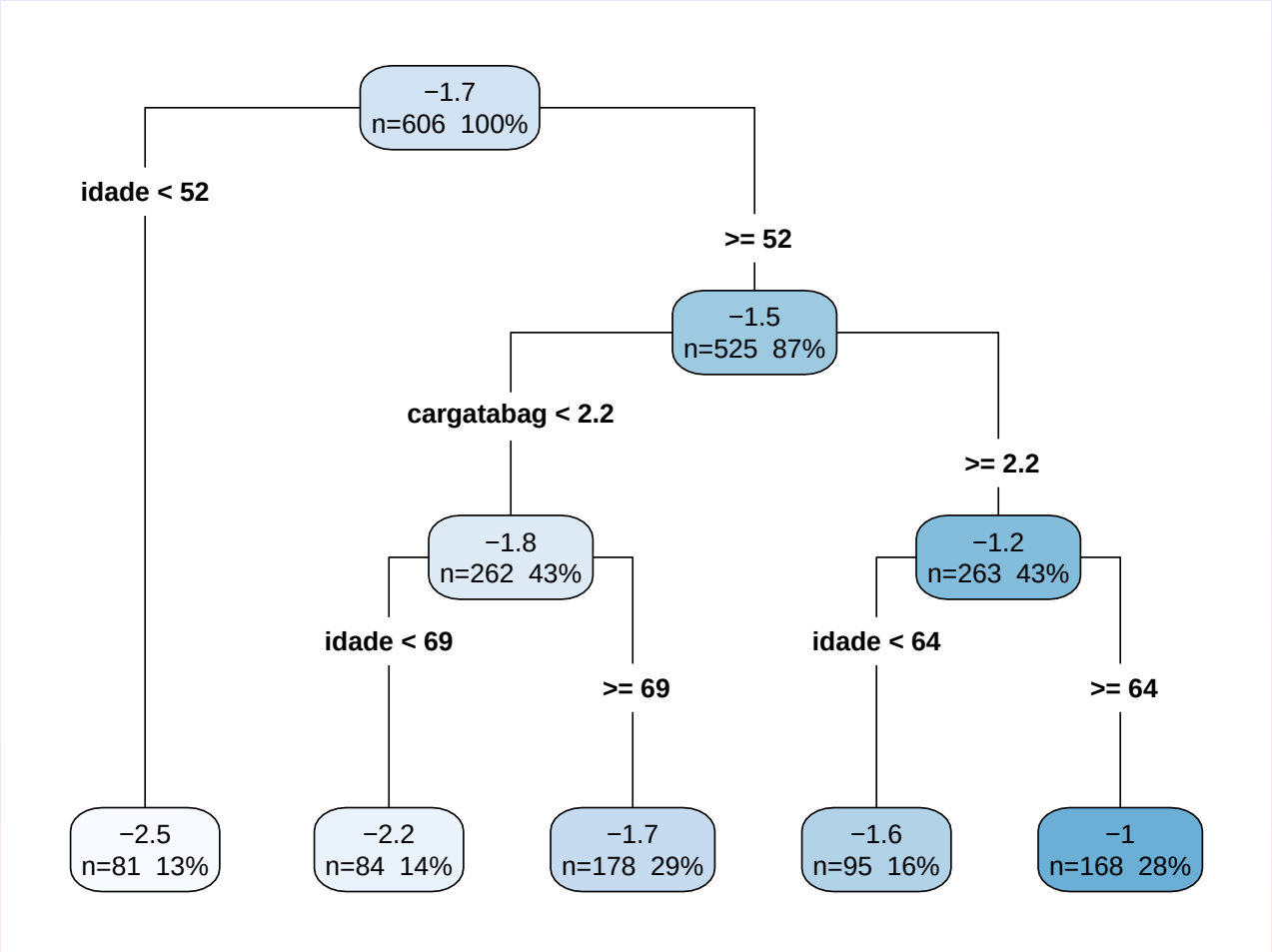


Figura 12: Árvore podada ajustada aos dados do Exemplo.

Árvores para regressão - Exemplo

Valores preditos para o conjunto de dados com o respectivo *RMSE* são obtidos por meio dos comandos

```
rmse = function(actual, predicted) {
sqrt(mean((actual - predicted)^2))
}
rmse(predpulmatree2poda, pulmao$logrc)
[1] 1.006402
```

Convém notar que embora a utilização de árvores de decisão gere um modelo bem mais simples do que aquele obtido por meio de análise regressão, os objetivos são bem diferentes.
Nesse contexto, o modelo baseado em árvores deve ser utilizado apenas quando o objetivo é fazer previsões, pois pode deixar de incluir variáveis importantes para propósitos inferenciais. No Exemplo, uma das variáveis mais importantes para entender o processo de deposição de fuligem no pulmão é o numero de horas gastas em trânsito. Essa variável foi incluída significativamente no ajuste do modelo de regressão mas não o foi no modelo baseado em árvores.

Há um algoritmo boosting aplicável na construção de árvores para regressão. Veja Hastie et al. (2017, cap. 10) para detalhes.

Referências

Breiman, L. (2001). Random forests. *Machine Learning*, **45**, 5–32.

Chambers, J. M and Hastie, T. J. (1992:). *Statistical Models in S*. California: Wadsworth and Brooks/Cole.

Hastie, T. J. and Tibshirani, R. J. (1990). *Generalized Additive Models*. London: Chapman and Hall.

James, G., Witten, D., Hastie, T. and Tibshirani, R. (2017). *Introduction to Statistical Learning*. Springer.

Morettin, P. A. e Singer, J. M. (2021). *Estatística e Ciência de Dados*. Texto Preliminar, IME-USP.