# Sistemas Inteligentes

Escuela Técnica Superior de Informática Universitat Politècnica de València

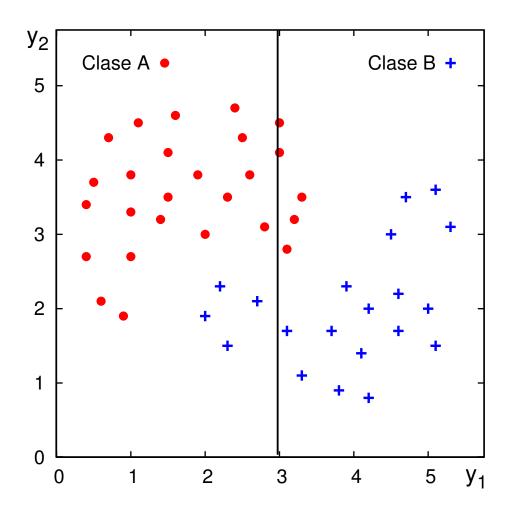
Tema B2T3 Árboles de Clasificación

# Índice

- 1 Árboles de Clasificación (ADC) ⊳ 1
  - 2 Aprendizaje de ADC ▷ 12
  - 3 Bibliografía ⊳ 28

Árboles de clasificación

#### **Ejemplo**



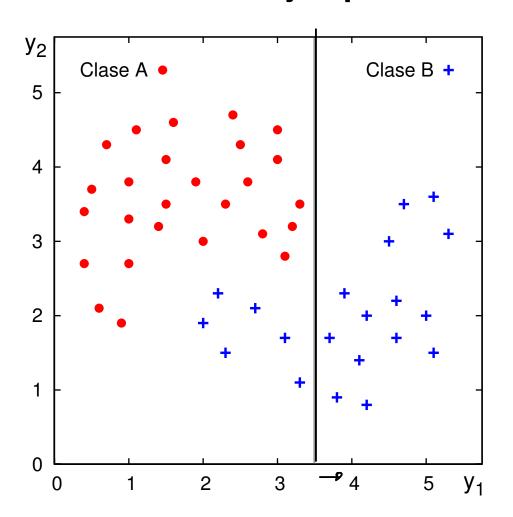
#### Tarea simple ilustrativa:

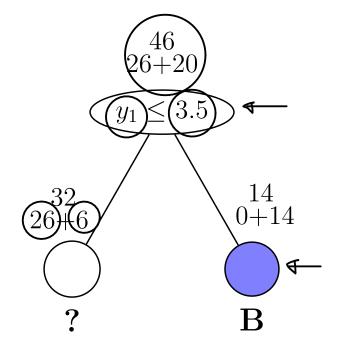
- representación en dos dimensiones ( $E = \mathbb{R}^2$ )
- clasificación en 2 clases
   no separables linealmente

46 datos (vectores)

- 26 de clase A
- 20 de clase B

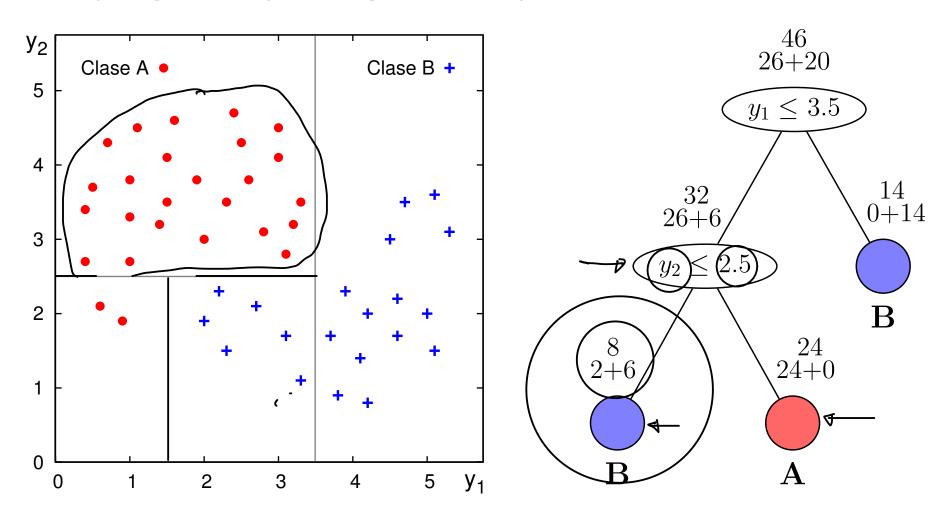
#### Ejemplo: Primera partición





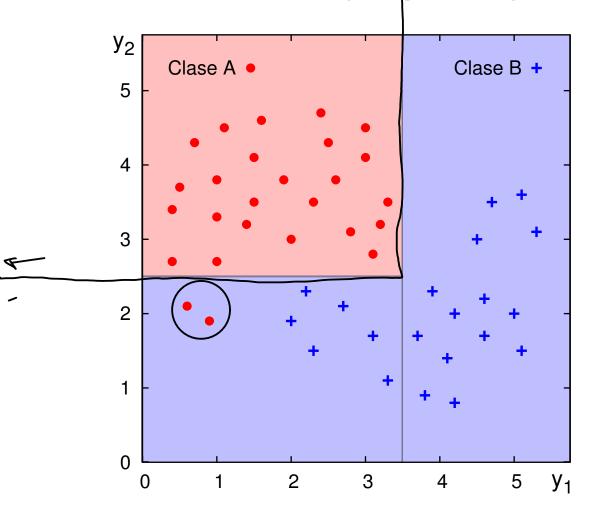
- El nodo raíz evalúa todos los datos con ¿ $y_1 \le 3.5$ ?
- El nodo derecho es *puro* porque todos los datos de ese nodo son de clase B.

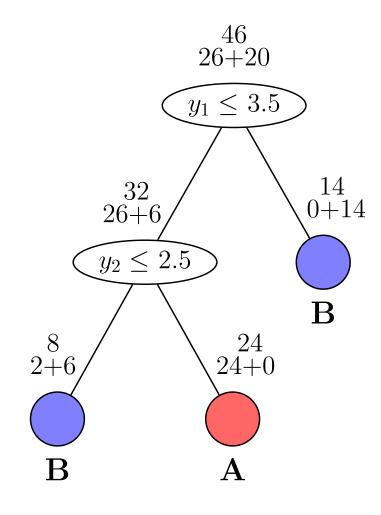
### Ejemplo: segunda partición y fronteras de decisión



- Los datos del nodo izquierdo se particiona con  $y_2 \le 2.5$ ?
- El nodo-hijo derecho es *puro* y se etiqueta como clase A
- El izquierdo no se particiona más y se etiqueta como B (clase mayoritaria)

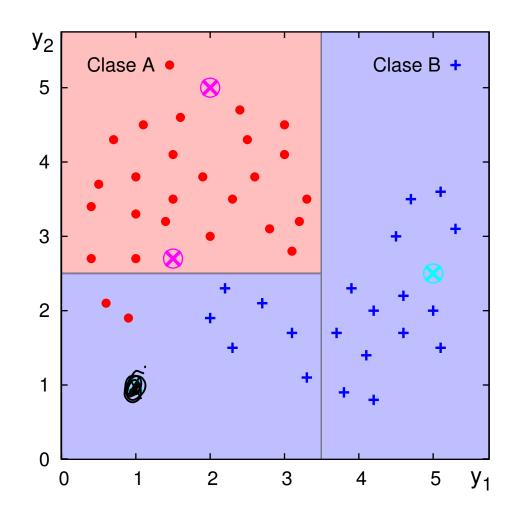
# Ejemplo: regiones de decisión

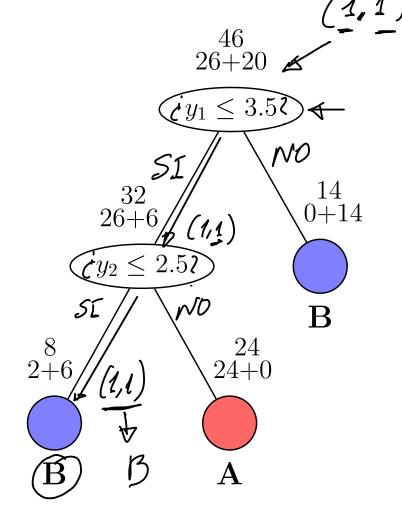




- Fronteras de decisión paralelas a los ejes
- Regiones de decisión rectangulares.
- La probabilidad de error estimada por resustitución es2/46=  $0.0435 \rightarrow 4.35\%$

#### Ejemplo: clasificación de nuevos datos





El árbol de decisión obtenido permite clasificar nuevos datos:

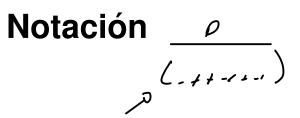
$$(1.0, 1.0)^t$$
:  $y_1 \le 3.5, y_2 \le 2.5 \to \underline{\text{clase B}}$   $(1.5, 2.7)^t$ :  $y_1 \le 3.5, y_2 > 2.5 \to \underline{\text{clase A}}$   $(5.0, 2.5)^t$ :  $y_1 \ge 3.5$   $\to \underline{\text{clase B}}$   $(2.0, 5.0)^t$ :  $y_1 \le 3.5, y_2 > 2.5 \to \underline{\text{clase A}}$ 

Página B2T3.7

# Árboles de clasificación (ADC)

- Estructura resultante de la partición recursiva del espacio de representación a partir de una datos de aprendizaje.
- Cada nodo interno evalúa con una pregunta un atributo concreto
- Cada nodo hoja contiene una etiqueta de clase (clasificación)
- Los datos de test se clasifican mediante una serie de preguntas sobre los valores de sus atributos, empezado por el nodo raiz y siguiendo el camino determinado por las respuestas a las preguntas de los nodos internos, hasta llegar a un nodo hoja que clasifica la muestra en una clase
- Veremos CART¹caracterizado por una partición binaria de los nodos basada en criterios estadísticos sólidos.

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup>Classification And Regression Trees



- Espacio de representación:  $E \equiv \mathbb{R}^D$ ;  $\mathbf{y} = (y_1, y_2, \dots, y_D)^t \in E$
- Muestra de aprendizaje: *N* vectores, con su correcta clasificación:

$$(\underline{y_1},\underline{c_1}),\ldots,(\underline{y_N},c_N), \quad \underline{y_i} \in E, \ c_i \in \mathbb{C} = \{1,2,\ldots,C\}, \ 1 \leq i \leq N$$

- Un árbol se denota por  $\underline{T}$  ("Tree"), un nodo por  $\underline{t}$ , sus hijos izquierdo y derecho por  $\underline{t}_L, \underline{t}_R$ , respectivamente y el conjunto de nodos-hoja o terminales por  $(\hat{T})$
- Una partición binaria ("split") se denota por ③ y el conjunto de particiones admisibles por ⑤

#### Estimación de probabilidades asociadas a los nodos de un ADC

de aprendizaje, el número de estos datos de la clase c, el número de los que están representados en el nodo t, y el número de estos últimos que son de la clase c.

Probabilidad a priori de la clase *c* :

$$\underline{\hat{P}(c)} = \frac{N_c}{N}$$

Probabilidad a posteriori de clase en el nodo t:

$$\frac{\hat{P}(c \mid t)}{N(t)} = \frac{N_c(t)}{N(t)}$$

Probabilidad de un nodo *terminal*,  $t \in \tilde{T}$ :

$$\hat{P}(t) = \frac{N(t)}{N}$$

$$\hat{P}_L(t) = \frac{N(t_L)}{N(t)} - 3$$

Probabilidad de difficación por el hijo izquierdo de 
$$t$$
:  $\hat{P}(t) = \frac{1}{N} \text{ with } \hat{P}(t)$ 

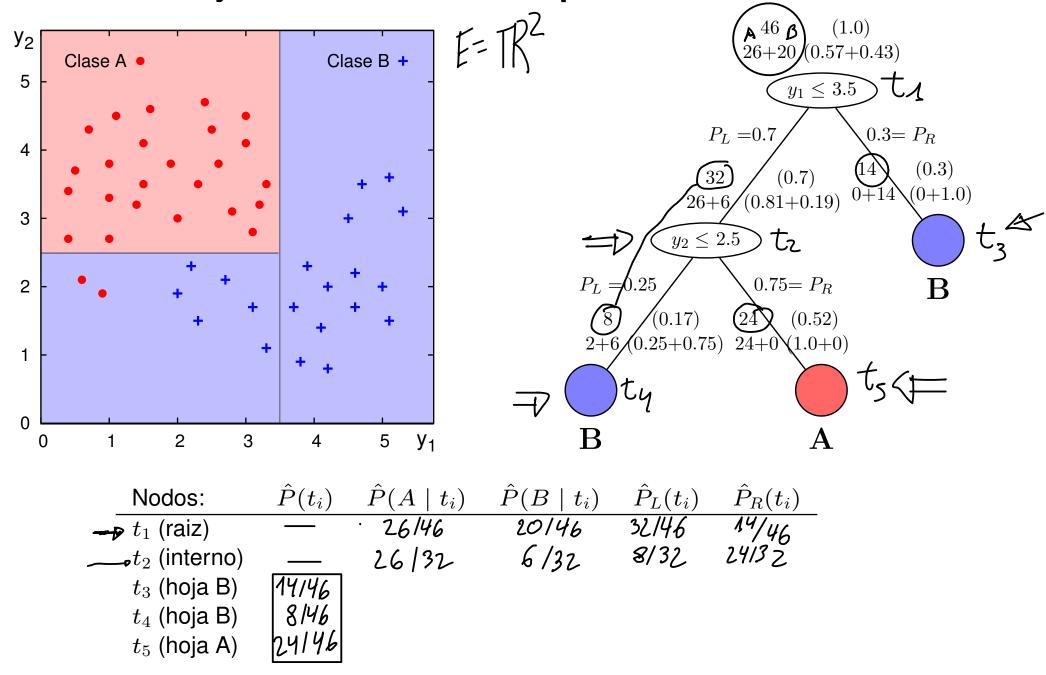
Probabilidad de decisión por el hijo izquierdo de  $t$ :  $\hat{P}_L(t) = \frac{N(t_L)}{N(t)} + \frac{3}{N(t)} + \frac{7}{10} + \frac{7}{10}$ 

Probabilidad de decisión por el hijo derecho de  $t$ :  $\hat{P}_R(t) = \frac{N(t_R)}{N(t)} + \frac{3}{10} + \frac{7}{10} + \frac{7}{10}$ 

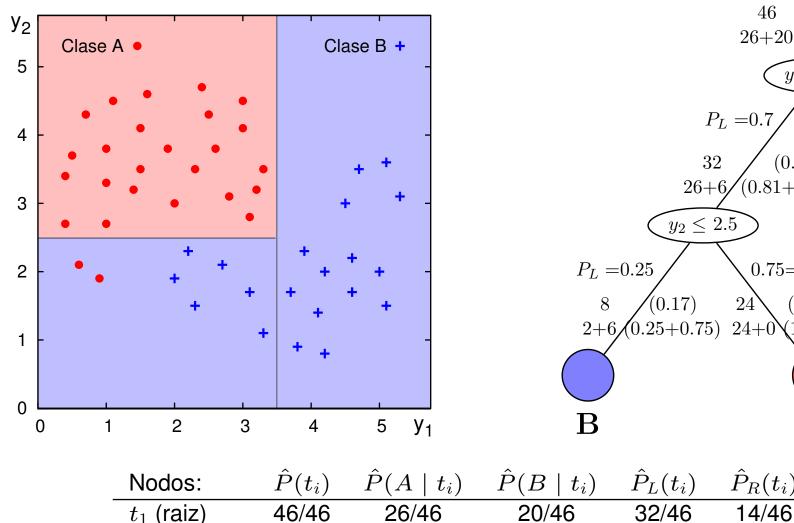
Todo nodo no terminal t verifica las siguients propiedades:

$$\hat{P}_L(t) + \hat{P}_R(t) = 1$$

Ejercicio de cálculo de probabilidades



# Solución al cálculo de probabilidades



		46	(1.0)
		26+20 (0.6)	` '
		$y_1 \leq$	3.5
	D	0.7	0.2 D
	$P_{i}$	$I_L = 0.7$	$\sqrt{0.3} = P_R$
	32	(0.7)	14 (0.3)
		6/(0.81+0.19)	(0+1.0)
	201	(0.01   0.1.	
	$y_2 \leq 2$	2.5	
$P_L = 0$	0.25	$\sqrt{0.75} = P_H$	${f B}$
8	(0.17)	24 (0.52)	2)
2+6	(0.25+0.75)	24+0(1.0+	-0)
	,		,
${f B}$		$oldsymbol{A}$	_
$(\mid t_i)$	$\hat{P}_L(t_i)$	$\hat{P}_R(t_i)$	
/46	32/46	14/46	
30	8/32	24/32	

Nodos:	$\hat{P}(t_i)$	$\hat{P}(A \mid t_i)$	$\hat{P}(B \mid t_i)$	$\hat{P}_L(t_i)$	$\hat{P}_R(t_i)$
$t_1$ (raiz)	46/46	26/46	20/46	32/46	14/46
$t_2$ (interno)	32/46	26/32	6/32	8/32	24/32
$t_3$ (hoja B)	14/46	0/14	14/14	_	_
$t_4$ (hoja B)	8/32	2/8	6/8	_	_
$t_5$ (hoja A)	24/32	24/24	0/24	_	_

# Índice

- 1 Árboles de Clasificación (ADC) ⊳ 1
- 2 Aprendizaje de ADC > 12
  - 3 Bibliografía ⊳ 28

Árboles de clasificación

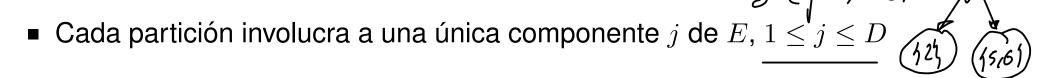
### Aprendizaje de un ADC a partir de una muestra de aprendizaje

Parámetros de un algoritmo de aprendizaje de un ADC:

- 1. Criterio de partición y evaluación de partición:
  - Condiciones o "preguntas" ("splits"):  $\mathbf{b} \mathbf{y} \in B$ ?,  $B \subseteq E$  ←  $\mathbf{c} \mathbf{y} \in S$ ?

     Evaluación v ontimización de la  $\mathbf{z}$ ."
- 2. Criterio de *pureza* de un nodo para detener proceso de partición
- 3. Criterio para asignar una etiqueta de clase a un nodo terminal

Conjunto de preguntas admisibles para formar particiones



- Las preguntas  $\exists y \in B$ ? son de la forma:  $\exists y_j \leq r$ ?,  $r \in \mathbb{R}$   $\exists y_i \in S$ ,  $\exists y_i \in S$   $\exists y_i$
- Los datos son finitos, por tanto sólo hay un número finito de particiones
- Para un nodo t con N(t) elementos:
  - Hay que explorar cada una de las componentes  $j,\ 1 \le j \le D$ , de E
  - Para cada j, hay que explorar (al menos) N(t) posibles valores de r
- Para cada nodo t, hay que explorar al menos  $\mathcal{O}(D \cdot N(t))$  "splits"

$$t_1 > N(t_1)=46$$
 $y_1 = 92$  particiones

DSIC-UPV:

 $y_2$ 

#### Evaluación de la calidad de una partición

- Para evaluar las particiones posibles se usa el concepto de "impureza"
- La impureza de un nodo t,  $\underline{\mathcal{I}(t)}$ , se mide en función de las probabilidades estimadas de las clases en t, para lo cual existen varias aproximaciones.
- Una de las más interesantes se basa en el concepto de entropía (pág. 16):

$$\mathcal{I}(t) = \left( -\sum_{c=1}^{C} \frac{\hat{P}(c \mid t)}{\sum_{c=1}^{C} \frac{\hat{P}(c \mid t)}{N(t)}} \log_2 \frac{\hat{P}(c \mid t)}{\sum_{c=1}^{C} \frac{N_c(t)}{N(t)}} \log_2 \frac{N_c(t)}{N(t)} \right)$$
(1)

Otras definiciones de  $\mathcal{I}(t)$ : *índice Gini* y *probabilidad de error* (ver [1,2,3])

La calidad de una partición del nodo t mediante un "split" s=(j,r), se mide mediante el decremento de impureza:

$$\boxed{\Delta \mathcal{I}(j,r,t)} \stackrel{\text{def}}{=} \underline{\mathcal{I}(t)} - \underline{\hat{P}_L(t)}\underline{\mathcal{I}(t_L)} - \underline{\hat{P}_R(t)}\underline{\mathcal{I}(t_R)} \qquad (2)$$

La mejor partición es aquella que produce mayor decremento de impureza:

#### Entropía

■ Mide la cantidad de información asociada a una decisión k-aria:

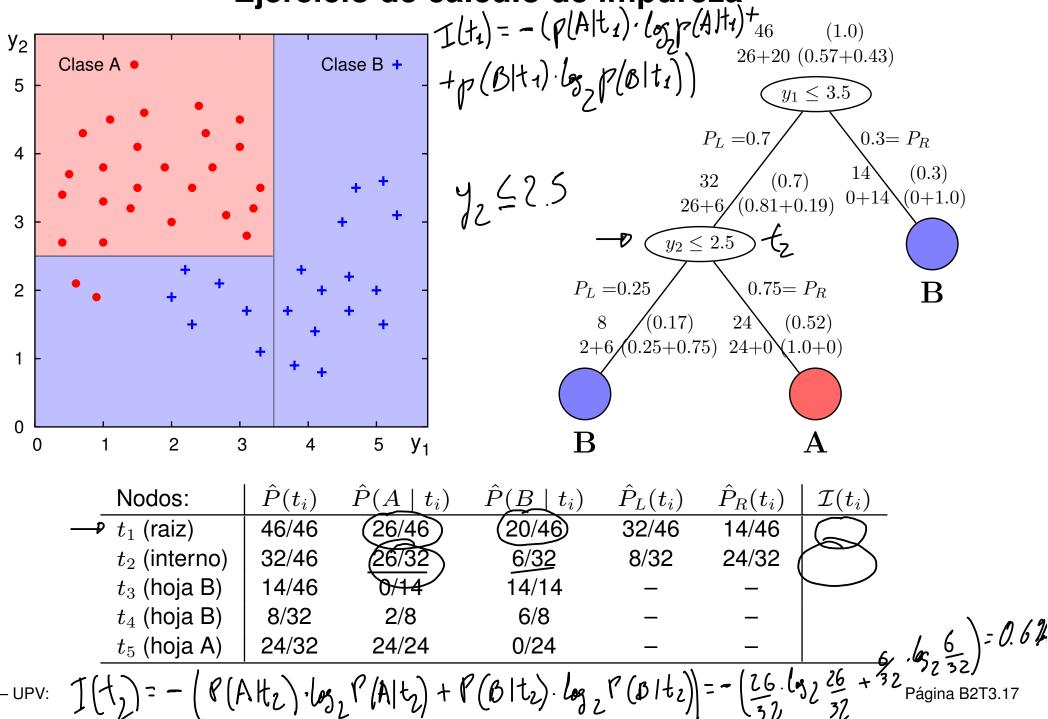
$$H = -\sum_{i=1}^{k} P_i \log_2 P_i \qquad (0 \log 0 \stackrel{\mathsf{def}}{=} 0)$$

- La unidad es el *bit*: información asociada a tomar una decisión *binaria* en la que las dos alternativas son equiprobables.
- El valor mínimo es 0 y corresponde a una decisión en la que solo hay una alternativa posible.
- El valor máximo es  $+\infty$  que se da para decisiones k-arias equiprobables con  $k \to \infty$ :
- Ejemplos:

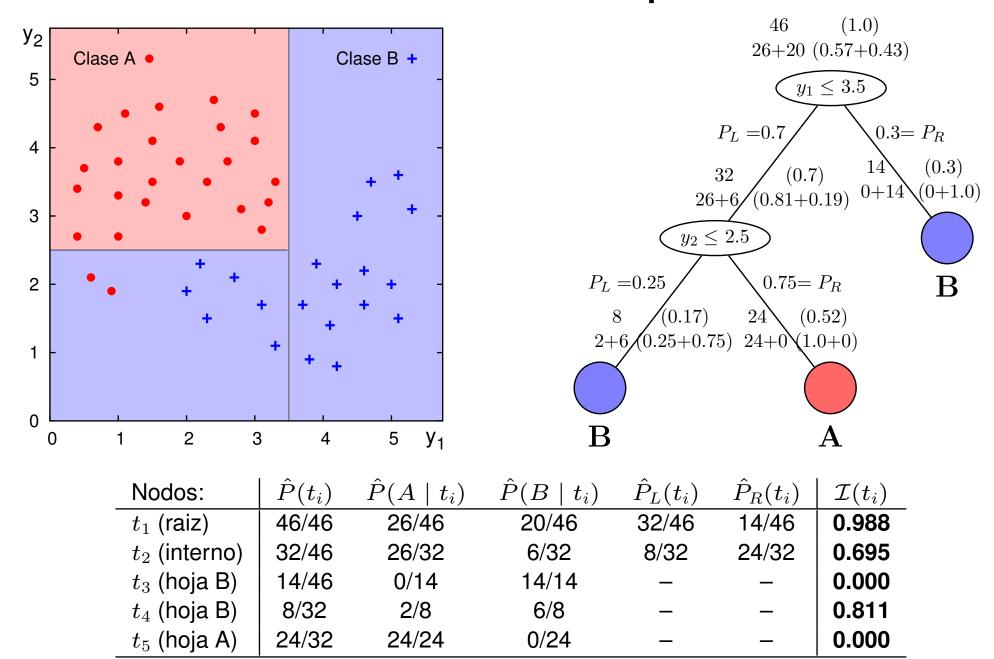
Si 
$$P_1 = P_2 = 1/2$$
,  $H = -(0.5(0-1) + 0.5(0-1)) = 1$   
Si  $P_1 = 1$ ,  $P_2 = 0$ ,  $H = -1 \cdot 0 + 0 = 0$   
Si  $P_1 = 1/k$ ,  $1 \le i \le k$ ,  $H = log_2 k$ ;  $H \to \infty$  si  $k \to \infty$ 

*Ejercicio:* según Eq.(1), calcular  $\mathcal{I}(t) \ \forall t$  en el árbol de la página 5.

Ejercicio de cálculo de impureza



#### Solución al cálculo de impureza



#### Ejercicio (para hacer en clase)

Con respecto al ejemplo de la página 5:

- Calcular el decremento de impureza que se produce al dividir cada uno de los 2 nodos no terminales según Eq (2)
- Las dos particiones que se muestran en este ejemplo son solo ejemplos ilustrativos basados en pura intuición geométrica (es decir, *no* son el resultado de la optimización de ninguna expresión de impureza).

Según la Eq. (3), analizar la segunda partición (la que en el ejemplo se resuelve con s=(2,2.5); es decir,  $y_2 \le 2.5$ ), y determinar si alguna de las siguientes particiones es mejor para ese nodo:  $(y_1 \le 1.95)$ ,  $(y_2 \le 1.8)$ 

Nodos:	$\hat{P}(t_i)$	$\hat{P}(A \mid t_i)$	$\hat{P}(B \mid t_i)$	$\hat{P}_L(t_i)$	$\hat{P}_R(t_i)$	$\mathcal{I}(t_i)$
$t_1$ (raiz)	46/46	26/46	20/46	32/46	14/46	0.988
$t_2$ (interno)	32/46	26/32	6/32	8/32	24/32	0.695
$t_3$ (hoja B)	14/46	0/14	14/14	_	_	0.000
$t_4$ (hoja B)	8/32	2/8	6/8	_	_	0.811
$t_5$ (hoja A)	24/32	24/24	0/24	<del>_</del>	_	0.000

#### Solución al ejercicio

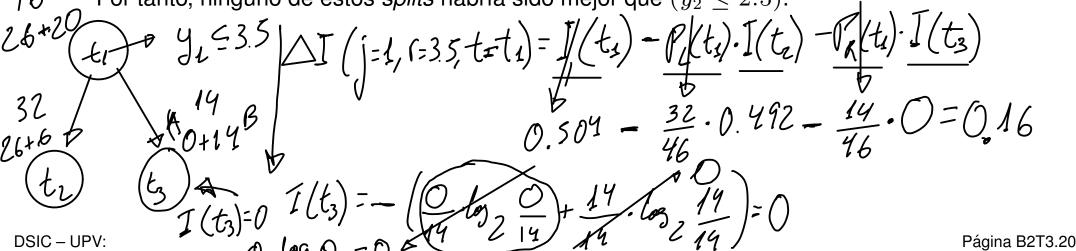
■ Decrementos de impureza para  $t_1$  y  $t_2$ :

Nodos:	$\hat{P}(t_i)$	$\hat{P}(A \mid t_i)$	$\hat{P}(B \mid t_i)$	$\hat{P}_L(t_i)$	$\hat{P}_R(t_i)$	$\mathcal{I}(t_i)$ $\Delta \mathcal{I}(t_i)$
$t_1$ (raiz)	46/46	26/46	20/46	32/46	14/46	(0.504)
$t_2$ (interno)	32/46	26/32	6/32	8/32	24/32	0.492
$t_3$ (hoja B)	14/46	0/14	14/14	_	_	_
$t_4$ (hoja B)	8/32	2/8	6/8	_	_	_
$t_5$ (hoja A)	24/32	24/24	0/24	<del>_</del>	_	_

• *Splits* alternativos en  $t_2$ :

$$(y_1 \le 1.95) : \mathcal{I}(t_L) = 0, \ \mathcal{I}(t_R) = -(11/17) \log(11/17) - (6/17) \log(6/17) = 0.937$$
  
 $(y_2 \le 1.80) : \mathcal{I}(t_L) = 0, \ \mathcal{I}(t_R) = -(26/29) \log(26/29) - (3/29) \log(3/29) = 0.480$   
 $\Delta \mathcal{I}(1, 1.95, t_2) = 0.695 - 0 - (17/32) \cdot 0.937 = 0.197 < 0.492$   
 $\Delta \mathcal{I}(2, 1.80, t_2) = 0.695 - 0 - (29/32) \cdot 0.480 = 0.260 < 0.492$ 

Por tanto, ninguno de estos *splits* habría sido mejor que  $(y_2 \le 2.5)$ .



### Criterios de suficiente "pureza" en nodos terminales

Criterio de parada de particionamiento, cuando máximo decremento de impureza posible es demasiado pequeño:

$$\max_{\substack{1 \le j \le D \\ -\infty \le r \le +\infty}} \Delta \mathcal{I}(j, r, t) < \epsilon$$
(4)

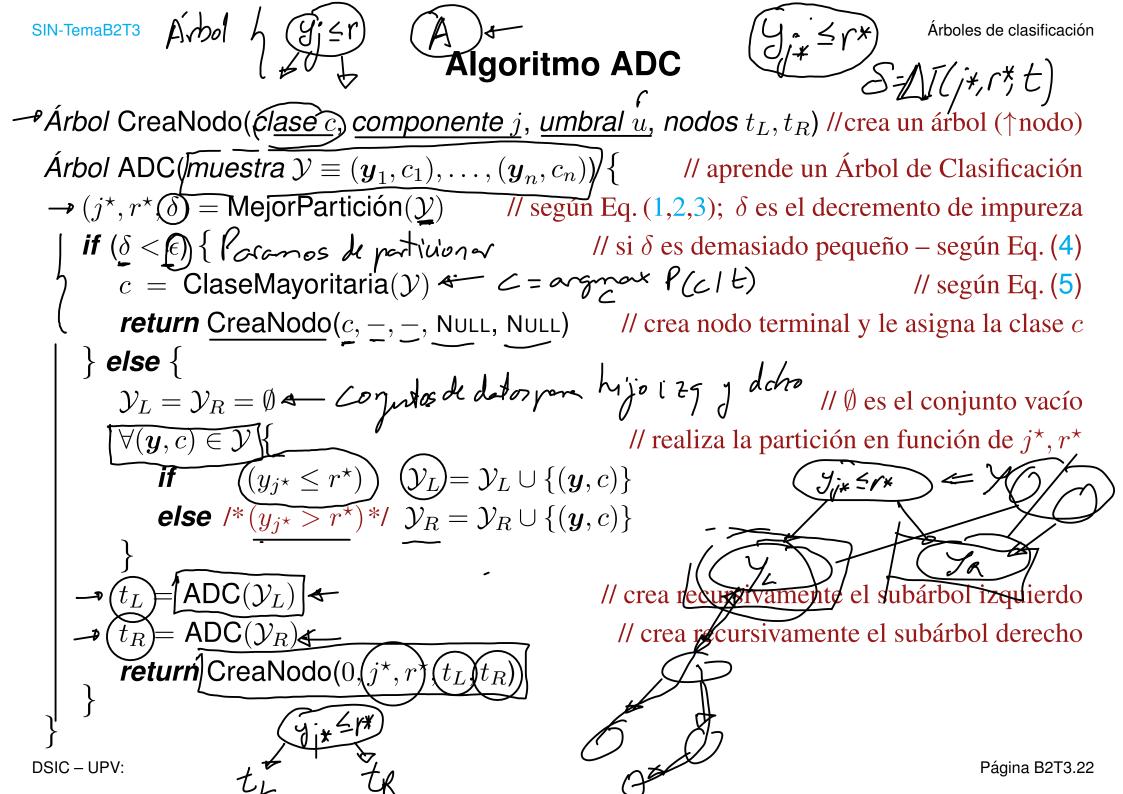
donde  $\epsilon$  es una constante pequeña a determinar empíricamente.

- Otro criterio es exigir que los nodos terminales sean totalmente puros
- Este último criterio tiene problemas de generalización y árboles grandes

### Asignación de etiquetas de clase a nodos terminales

Criterio simple y eficaz: asignar a cada nodo terminal la clase mayoritaria en sus elementos:

$$\widehat{\left(c^{\star}(t)\right)} = \underset{1 < c < C}{\operatorname{argmax}} \ \widehat{\underline{P}(c \mid t)}, \quad \forall t \in \widetilde{T} \tag{5}$$



#### Estimación por resustitución del error de clasificación

Según la teoría de la decisión estadística, la probabilidad de error de un nodo (terminal) t, estimada por resustitución, es:

$$\hat{P}_e(t) = 1 - \max_{1 \le c \le C} \hat{P}(c \mid t)$$

Y para un árbol T:

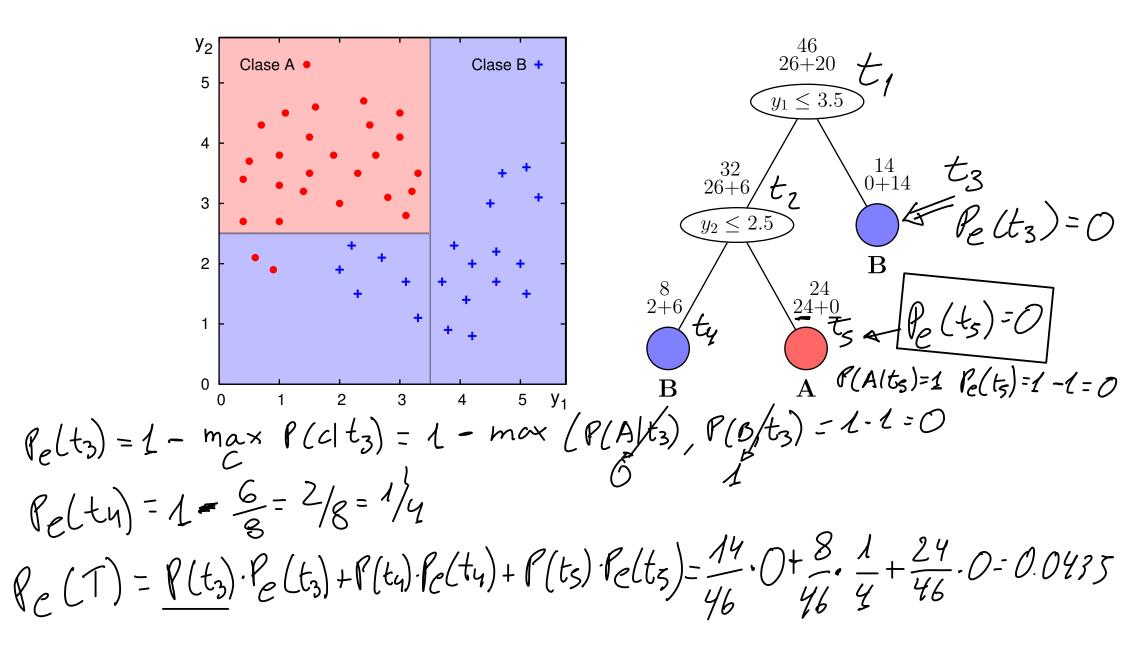
$$\hat{P}_e(T) = \sum_{t \in \tilde{T}} \underline{\hat{P}(t)} \underline{\hat{P}_e(t)}$$

Si se hace crecer el árbol hasta que los nodos terminales sean totalmente puros, el error estimado será nulo, ya que en este caso:

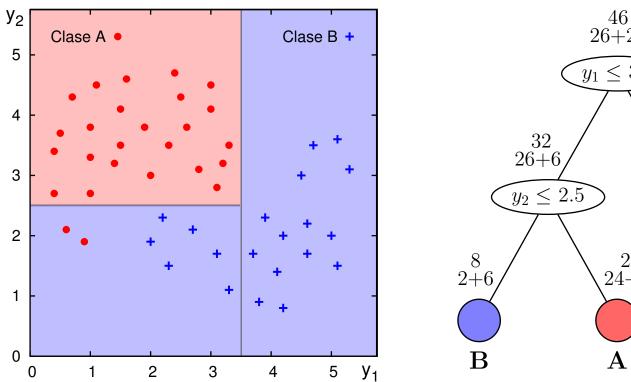
$$\hat{P}_e(t) = 0 \quad \forall t \in \tilde{T}.$$

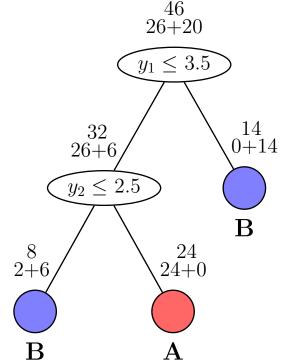
■ Esto conlleva un *sobreaprendizaje* que generalmente no es desable ⇒ esencialmente el árbol se convierte en mero almacén de la muestra de aprendizaje, sin capacidad de generalización ante nuevos datos

#### Estimación por resustitución del error de clasificación



#### Estimación por resustitución del error de clasificación





En el ejemplo de la página 5, (3 nodos terminales, 2 totalmente puros):

$$\hat{P}_e(T) = \hat{P}(t_3)\hat{P}_e(t_3) + \hat{P}(t_4)\hat{P}_e(t_4) + \hat{P}(t_5)\hat{P}_e(t_5)$$

$$= \frac{14}{46} \cdot 0 + \frac{8}{46} \cdot \frac{2}{8} + \frac{24}{46} \cdot 0 = \frac{2}{46} \approx 0.0435 \rightarrow 4.35\%$$

#### Algoritmo ADC: Ejercicio en clase

En un problema de clasificación en 3 clases, para objetos representados mediante vectores de características bidimensionales tenemos la siguiente muestra:

	Е	<b>Intre</b>	nam	17	Te	st					
n	1	2	3	4	5	6	7	8	9		
$\overline{x_{n1}}$	1	1	2	2	3	(3)	3	0	0		
$x_{n2}$	0	1	0	1	0	$ 1\rangle$	-1	1	0		
$c_n$	Α	В	В	В	C	В	C	В	Α		

- 1. Realiza una traza de ejecución del algoritmo ADC sobre el conjunto de entrenamiento siendo  $\epsilon=0$ . Muestra el árbol resultante, los valores de impureza de los nodos generados y los decrementos de impureza de las particiones obtenidas.
- 2. Representa gráficamente las particiones obtenidas y las regiones de decisión tras la ejecución del algoritmo ADC, así como las muestras de entrenamiento.
- 3. Calcula la probabilidad de error en test con intervalos de confianza al 95 % y discute el resultado.
- 4. Muestra el árbol resultante si  $\underline{\epsilon} = 0.5$  y calcula la probabilidad de error en test en este caso.

#### Ejercicio de seguimiento: Algoritmo ADC

En un problema de clasificación en 3 clases, para objetos representados mediante vectores de características tridimensionales tenemos la siguiente muestra:

Entrenamiento									Test						
n	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15
$\overline{x_{n1}}$	0	1	0	2	0	1	1	2	2	1	0	0	1	1	2
$x_{n2}$	0	1	1	1	0	1	0	1	1	0	1	0	0	1	0
$x_{n3}$	0	0	1	0	2	3	2	2	3	0	2	1	3	1	2
$c_n$	Α	Α	Α	Α	В	В	C	C	C	Α	Α	В	В	C	C

- 1. A partir del conjunto de entrenamiento, enumera el conjunto de particiones posibles para el nodo raíz en las que ambos nodos hijos tienen al menos un elemento.
- 2. Calcula la mejor partición inicial (nodo raíz) de acuerdo al decremento de impureza.
- 3. Calcula la probabilidad de error en test tras aplicar el algoritmo ADC con  $\epsilon=0.35$
- 4. Considera sólo las muestras de entrenamiento de las clases B y C. ¿Es posible definir una única partición con error de resustitución igual a cero? ¿Por qué?
- 5. En el caso del apartado anterior, ¿crees que el algoritmo Perceptron conseguiría un error de resustitución igual a cero? ¿Por qué?

## Índice

- 1 Árboles de Clasificación (ADC) ⊳ 1
- 2 Aprendizaje de ADC ▷ 12
- ∘ 3 Bibliografía ⊳ 28

### Bibliografía

- [1] R.O. Duda, D.G. Stork, P.E. Hart. Pattern Classification. Wiley, 2001.
- [2] A. R. Webb, K. D. Copsey. Statistical Pattern Recognition. Wiley, tercera ed., 2011.
- [3] Classification and Regression Trees by L. Breiman, J.H. Friedman, R.A. Olshen y C.J. Stone. Chapman & Hall, 1984.

El material de este tema se basa principalmente en [1] y [2].