



Universidad
Carlos III de Madrid

UNIVERSIDAD CARLOS III DE MADRID

APRENDIZAJE AUTOMÁTICO, GRADO EN ESTADÍSTICA Y
EMPRESA

Práctica I: KNN y Árboles de clasificación

Marcos Álvarez Martín
Fabio Scielzo Ortiz

Índice

1	Objetivos	4
2	Problema	4
3	Datos	4
4	Desarrollo de la práctica	5
4.1	Carga de los datos	5
4.2	EDA en R	8
4.2.1	EDA con <code>skimr</code>	8
4.2.2	EDA con <code>DataExplorer</code>	9
4.3	EDA en <code>Python</code>	11
4.3.1	Estructura del data-set	11
4.3.2	Resumen Estadístico Descriptivo Básico	16
4.3.3	Análisis gráfico general	18
4.3.4	Análisis de la relación entre los predictores categoricos y la respuesta	25
4.3.5	Análisis de la relación entre los predictores cuantitativos y la re- spuesta	33
4.4	Arboles de clasificación en R	39
4.4.1	Algoritmo <code>rpart</code> con R	39
4.4.2	Algoritmo C5.0 con R	46
4.4.3	Algoritmo CART en R con <code>mlr3</code>	55
4.4.4	Algoritmo C5.0 en R con <code>mlr3</code>	59
4.4.5	Comparación entre R y <code>mlr3</code>	62
4.4.6	Comparación de resultados	64
4.5	Arboles de clasificación en <code>Python</code>	65
4.5.1	Arboles de clasificación: <i>teoría</i>	65
4.5.2	Arboles de Clasificación Penalizados	92
4.5.3	Arboles de clasificación: algoritmo de creación propia en <code>Python</code> . .	93
4.5.4	Testeo del algoritmo de arbol de clasificacion creado en <code>Python</code> . . .	122
4.5.5	Validacion Simple con funcion de validación propia y funcion Clas- sification Tree propia	125
4.5.6	Algoritmo de creacion propia con Gini	127
4.5.7	Testeo del algoritmo	140
4.5.8	Validacion Simple con funcion de validación propia y funcion Re- gresssion Tree Gini propia	141
4.5.9	Arboles de clasificación en <code>Python</code> con <code>Sklearn</code>	143
4.5.10	Validación simple con función de validacion propia y funcion Clas- sification Tree de <code>sklearn</code>	147

4.5.11	4.5.4. Árboles de clasificación penalizados en sklearn : α óptimo .	149
4.5.12	Comparación final entre árboles de clasificación por validación simple	153
4.6	KNN para clasificación en Python	154
4.6.1	KNN para clasificación: teoría	154
4.6.2	4.6.2. Algoritmo de creación propia en Python	155
4.6.3	KNN para clasificación en Python con sklearn	174
4.6.4	Selección óptima del hiperparámetro k en KNN	178
4.7	Comparación final entre árboles y KNN para clasificación por validacion simple	184

5	Bibliografía	185
----------	---------------------	------------

1 Objetivos

- Conocer un contexto de aplicación real.
- Ejercitarnos en el análisis de datos y la implementación de algoritmos de clasificación, para adquirir criterio en la aplicación de los mismos.
- Evaluar las capacidades de R y mlr para la implementación.

2 Problema

- Resolver un problema de clasificación para el diagnóstico de pacientes hepáticos.

3 Datos

- Usaremos el conjunto de datos “Indian Liver Patient Dataset”: Los pacientes con enfermedades del hígado han ido aumentando continuamente debido al consumo excesivo de alcohol, inhalación de gases nocivos, ingesta de alimentos contaminados, encurtidos y drogas.
- Este conjunto de datos se utilizó para evaluar los algoritmos de predicción en un esfuerzo por reducir la carga para los médicos. Este conjunto de datos contiene 416 registros de pacientes hepáticos y 167 registros de pacientes no hepáticos recopilados en el noreste de Andhra Pradesh, India.
- La variable de respuesta es “diseased” (personas que tienen enfermedad del hígado)
- El data set encuentra en la librería “mlr3data”. `data(“ilpd”, package = “mlr3data”)`

4 Desarrollo de la práctica

Vamos a desarrollar esta práctica en los lenguajes de programación R y Python simultáneamente.

En general lo haremos a través el lenguaje Python utilizando un paquete llamado `rpy2` que permite ejecutar código R desde Python

4.1 Carga de los datos

Empezamos la práctica cargando los datos, tanto en R como en Python :

Importamos en Python la librería `rpy2` que nos será esencial para trabajar con R y Python simultáneamente desde el mismo entorno:

```
import warnings
warnings.filterwarnings("ignore")
```

```
import rpy2

%load_ext rpy2.ipython
```

```
%%R

# install.packages("mlr3data")
# install.packages("mlr3")
```

Cargamos los datos en R

```
##R
```

```
data("ilpd", package = "mlr3data")
```

```
head(ilpd,5)
```

	age	gender	total_bilirubin	direct_bilirubin	alkaline_phosphatase
1	65	Female	0.7	0.1	187
2	62	Male	10.9	5.5	699
3	62	Male	7.3	4.1	490
4	58	Male	1.0	0.4	182
5	72	Male	3.9	2.0	195

	alanine_transaminase	aspartate_transaminase	total_protein	albumin
1	16	18	6.8	3.3
2	64	100	7.5	3.2
3	60	68	7.0	3.3
4	14	20	6.8	3.4
5	27	59	7.3	2.4

	albumin_globulin_ratio	diseased
1	0.90	yes
2	0.74	yes
3	0.89	yes
4	1.00	yes
5	0.40	yes

Cargamos los datos en Python

```
import pandas as pd
```

```
Data_Python = pd.read_csv('indian_liver_patient.csv')
```

```
Data_Python = Data_Python.rename({'Dataset': 'Diseased'}, axis=1)
```

```
Data_Python.head()
```

	Age	Gender	Total_Bilirubin	Direct_Bilirubin	Alkaline_Phosphotase
0	65	Female	0.7	0.1	187
1	62	Male	10.9	5.5	699
2	62	Male	7.3	4.1	490
3	58	Male	1.0	0.4	182
4	72	Male	3.9	2.0	195

	Alamine_Aminotransferase	Aspartate_Aminotransferase	Total_Protiens
0	16	18	6.8
1	64	100	7.5
2	60	68	7.0
3	14	20	6.8
4	27	59	7.3

	Albumin	Albumin_and_Globulin_Ratio	Diseased
0	3.3	0.90	1
1	3.2	0.74	1
2	3.3	0.89	1
3	3.4	1.00	1
4	2.4	0.40	1

Describiremos cada una de las variables:

- age: edad del paciente. A los pacientes que exceden 89 son listados con la edad 90
- gender: género del paciente.
- total_bilirubin: Total de bilirubina.
- direct_bilirubin: Bilirubina directa.
- alkaline_phosphatase: Fosfatasa alcalina.
- alanine_transaminase: alanina aminotransferasa o transaminasa glutámico pirúvica.
- aspartate_transaminase: aspartato aminotransferasa.
- total_protein: proteínas totales.
- albumin: albúmina.
- albumin_globulin_ratio: albúmina y globulina ratio.
- diseased: Si tienen (1) o no (2) enfermedad en el hígado.

Ahora que ya tenemos cargados los datos y hemos visto la apariencia de los mismo procedemos a hacer un EDA (exploratory data analysis).

4.2 EDA en R

4.2.1 EDA con skimr

Haremos el EDA con la librería `skimr`, como se pide en el enunciado de la práctica.

```
%%R
```

```
# install.packages('skimr')
```

```
library(skimr) # Cargamos librería
```

```
skim(ilpd) # EDA con librería
```

```
-- Data Summary -----
```

	Values
Name	ilpd
Number of rows	583
Number of columns	11

```
-----  
Column type frequency:
```

factor	2
numeric	9

```
-----  
Group variables      None
```

```
-- Variable type: factor -----
```

	skim_variable	n_missing	complete_rate	ordered	n_unique	top_counts
1	gender	0	1 FALSE	2	Mal: 441, Fem: 142	
2	diseased	0	1 FALSE	2	yes: 416, no: 167	

```
-- Variable type: numeric -----
```

	skim_variable	n_missing	complete_rate	mean	sd	p0	p25
1	age	0	1	44.7	16.2	4	33
2	total_bilirubin	0	1	3.30	6.21	0.4	0.8
3	direct_bilirubin	0	1	1.49	2.81	0.1	0.2
4	alkaline_phosphatase	0	1	291.	243.	63	176.
5	alanine_transaminase	0	1	80.7	183.	10	23
6	aspartate_transaminase	0	1	110.	289.	10	25
7	total_protein	0	1	6.48	1.09	2.7	5.8
8	albumin	0	1	3.14	0.796	0.9	2.6
9	albumin_globulin_ratio	0	1	0.947	0.318	0.3	0.7

	p50	p75	p100	hist
1	45	58	90	<U+2582><U+2586><U+2587><U+2585><U+2581>
2	1	2.6	75	<U+2587><U+2581><U+2581><U+2581><U+2581>
3	0.3	1.3	19.7	<U+2587><U+2581><U+2581><U+2581><U+2581>
4	208	298	2110	<U+2587><U+2581><U+2581><U+2581><U+2581>
5	35	60.5	2000	<U+2587><U+2581><U+2581><U+2581><U+2581>
6	42	87	4929	<U+2587><U+2581><U+2581><U+2581><U+2581>
7	6.6	7.2	9.6	<U+2581><U+2582><U+2587><U+2587><U+2581>
8	3.1	3.8	5.5	<U+2581><U+2585><U+2587><U+2586><U+2581>
9	0.947	1.1	2.8	<U+2586><U+2587><U+2582><U+2581><U+2581>

También haremos uso de la función `str()` que nos da la estructura de nuestro dataset.


```
%%R
```

```
str(ilpd) # Analizamos la estructura de los datos
```

```
'data.frame':  583 obs. of  11 variables:
 $ age           : int  65 62 62 58 72 46 26 29 17 55 ...
 $ gender        : Factor w/ 2 levels "Female","Male": 1 2 2 2 2 2 1 1 2 2 ...
 $ total_bilirubin : num  0.7 10.9 7.3 1 3.9 1.8 0.9 0.9 0.9 0.7 ...
 $ direct_bilirubin : num  0.1 5.5 4.1 0.4 2 0.7 0.2 0.3 0.3 0.2 ...
 $ alkaline_phosphatase : int  187 699 490 182 195 208 154 202 202 290 ...
 $ alanine_transaminase : int  16 64 60 14 27 19 16 14 22 53 ...
 $ aspartate_transaminase: int  18 100 68 20 59 14 12 11 19 58 ...
 $ total_protein      : num  6.8 7.5 7 6.8 7.3 7.6 7 6.7 7.4 6.8 ...
 $ albumin            : num  3.3 3.2 3.3 3.4 2.4 4.4 3.5 3.6 4.1 3.4 ...
 $ albumin_globulin_ratio: num  0.9 0.74 0.89 1 0.4 1.3 1 1.1 1.2 1 ...
 $ diseased           : Factor w/ 2 levels "yes","no": 1 1 1 1 1 1 1 1 2 1 ...
```

Claramente podemos ver como con skimr, las variables que son numéricas las considera todas numéricas, mientras que la función str nos especifica las variables numéricas en si son variables que toman valores reales o enteros.

4.2.2 EDA con DataExplorer

Por último sacaremos un reporte con la librería DataExplorer:

```
%%R
```

```
# install.packages('DataExplorer')
```

```
# DataExplorer::create_report(ilpd,y="diseased")
```

Se genera un reporte en HTML que puede ser abierto en el navegador.

Aquí está la versión en PDF de dicho reporte:

<https://github.com/FabioScielzoOrtiz/Estadistica4all.github.io/blob/main/Notebooks/Aprendizaje%20Automatico/Data%20Profiling%20Report.pdf>

Aunque hemos visto el número de valores ausentes en la salida que nos da skimr, esto se puede hacer a mano como sigue:

```
##R

library(tidyverse)

ilpd %>% map_dbl(.f = function(x){sum(is.na(x))})

# Número de missing values
```

age	gender	total_bilirubin
0	0	0
direct_bilirubin	alkaline_phosphatase	alanine_transaminase
0	0	0
aspartate_transaminase	total_protein	albumin
0	0	0
albumin_globulin_ratio	diseased	
0	0	

Podemos sacar las siguientes conclusiones del EDA anterior: - Se dispone de 583 instancias y 11 variables (2 de tipo factor biclase, 5 de tipo numérico y 4 enteras) - No hay ausencia de valores por lo que no habrá que eliminar instancias o al menos los modelos no se verán dificultados por los mismos. - La variable respuesta es diseased que es una de las variables tipo factor biclase que puede tomar valores “yes” o “no”. Se puede ver como esta variable está un poco desbalanceada ya que tenemos muchas más observaciones con valor “yes”(416 observaciones) que con valor “no”(167 observaciones). - En cuanto a las correlaciones se puede ver que son relativamente altas entre los pares que tienen que ver con sustancias similares, como bilirubina directa y bilirubina total. Con respecto a la variable respuesta podemos ver como hay relaciones directas con el resto de variables y una correlacion similar en torno a 0.7.

4.3 EDA en Python

Ahora vamos a realizar un EDA del data-set pero usando Python

El EDA (Exploratory Data Analysis) en líneas generales va a consistir en:

- Analizar estructura del data-set que tenemos (dimensiones, tipo de variables, valores faltantes, etc)
- Cálculo de estadísticos básicos para cada variable
- Generación de gráficos que aporten información relevante (histogramas, diagramas de barras, scatter plots, box plots, etc)
- Análisis de relaciones entre los predictores y la respuesta.

4.3.1 Estructura del data-set

```
import warnings
warnings.filterwarnings("ignore")
```

```
Data_Python.shape
```

```
(583, 11)
```

Tenemos un data-set con 11 variables y 583 observaciones.

Las variables son:

- 10 predictores (age , gender , Total_Bilirubin , Direct_Bilirubin , Alkaline_Phosphotase , Alamine_Aminotransferase , Aspartate_Aminotransferase , Total_Protiens , Albumin , Albumin_and_Globulin_Ratio)
- 1 respuesta (Diseased)

Las variables **categoricas** del data-set son:

- Diseased y Gender (*binarias*)

Las variables **cuantitativas** del data-set son:

- age , Alkaline_Phosphotase, Alamine_Aminotransferase , Aspartate_Aminotransferase (*discretas*) y Total_Bilirubin , Direct_Bilirubin, Total_Protiens, Albumin, Albumin_and_Globulin_Ratio (*continuas*)

Con el siguiente código podemos ver el tipo de cada una de las variables en Python (que podría no coincidir con el descrito anteriormente, en su caso habría que modificarlo.)

```
Data_Python.info()
```

```
<class 'pandas.core.frame.DataFrame'>
RangeIndex: 583 entries, 0 to 582
Data columns (total 11 columns):
#   Column                                Non-Null Count  Dtype
---  -
0   Age                                   583 non-null    int64
1   Gender                               583 non-null    object
2   Total_Bilirubin                     583 non-null    float64
3   Direct_Bilirubin                    583 non-null    float64
4   Alkaline_Phosphotase                583 non-null    int64
5   Alamine_Aminotransferase            583 non-null    int64
6   Aspartate_Aminotransferase          583 non-null    int64
7   Total_Protiens                      583 non-null    float64
8   Albumin                             583 non-null    float64
9   Albumin_and_Globulin_Ratio          583 non-null    float64
10  Diseased                            583 non-null    int64
dtypes: float64(5), int64(5), object(1)
memory usage: 50.2+ KB
```

En este caso el tipo en Python es correcto para todas las variables salvo para la respuesta (Diseased) ya que Python la considera entera (cuantitativa discreta: int64) cuando realmente es categórica binaria, por ello transformamos su tipo de int64 a object (el tipo clásico de las variables categóricas en Python).

```
Data_Python['Diseased'] = Data_Python['Diseased'].astype('object')
```

Comprobamos que los cambios se han producido correctamente:

```
Data_Python.info()
```

```
<class 'pandas.core.frame.DataFrame'>
RangeIndex: 583 entries, 0 to 582
Data columns (total 11 columns):
#   Column                                Non-Null Count  Dtype
---  -
0   Age                                   583 non-null    int64
1   Gender                               583 non-null    object
2   Total_Bilirubin                     583 non-null    float64
3   Direct_Bilirubin                    583 non-null    float64
4   Alkaline_Phosphotase                583 non-null    int64
5   Alamine_Aminotransferase            583 non-null    int64
6   Aspartate_Aminotransferase          583 non-null    int64
7   Total_Protiens                      583 non-null    float64
8   Albumin                             583 non-null    float64
9   Albumin_and_Globulin_Ratio          583 non-null    float64
```

```
10   Diseased          583 non-null    object
dtypes: float64(5), int64(4), object(2)
memory usage: 50.2+ KB
```

Ahora vamos a ver si existe algún valor nulo en el data-set:

```
Data_Python.isnull().sum()
```

```
Age          0
Gender       0
Total_Bilirubin  0
Direct_Bilirubin  0
Alkaline_Phosphotase  0
Alamine_Aminotransferase  0
Aspartate_Aminotransferase  0
Total_Protiens  0
Albumin      0
Albumin_and_Globulin_Ratio  0
Diseased     0
dtype: int64
```

Ninguna de las variables tiene valores faltantes (nulos).

Ahora vamos a ver cual es el rango de las variables categoricas, y posteriormete lo codificaremos en formato estandar {0,1,2,...} , si es que no lo están ya.

```
Data_Python['Gender'].unique()
```

```
array(['Female', 'Male'], dtype=object)
```

```
Data_Python['Diseased'].unique()
```

```
array([1, 2], dtype=object)
```

Vamos a codificar en formato estandar la variable **Gender** tal que: **Female=0** , **Male=1** , y la variable **Diseased** tal que: **1=0** , **2=1**

Para ello vamos a apoyarnos en la libreria **sklearn**, que posteriormente volverá a ser usada. Se podría hacer esto de otras formas, como con un bucle for, pero en casos en los que el número de categorias es alto, la opción aportada por **sklearn** es bastante más eficiente que un bucle.

```
from sklearn.preprocessing import OrdinalEncoder

ord_enc = OrdinalEncoder()
```

```
Data_Python['Gender'] = ord_enc.fit_transform(Data_Python[['Gender']])
Data_Python['Diseased'] = ord_enc.fit_transform(Data_Python[['Diseased']])
```

Comprobamos que los cambios se han realizado correctamente:

```
Data_Python['Gender'].unique()
```

```
array([0., 1.])
```

```
Data_Python['Diseased'].unique()
```

```
array([0., 1.])
```

Pero cuidado, tras realizar estos cambios tambien se cambia en Python el tipo de las variables codificadas a 'float64', que es un tipo cuantitativo (continuo), por lo que debemos volver a fijar el tipo de Diseased y Gender como 'object' (ya que son categoricas).

```
Data_Python.dtypes
```

```
Age                int64
Gender             float64
Total_Bilirubin    float64
Direct_Bilirubin   float64
Alkaline_Phosphotase  int64
Alamine_Aminotransferase  int64
Aspartate_Aminotransferase  int64
Total_Protiens     float64
Albumin            float64
Albumin_and_Globulin_Ratio  float64
Diseased           float64
dtype: object
```

```
Data_Python['Diseased'] = Data_Python['Diseased'].astype('object')
Data_Python['Gender'] = Data_Python['Gender'].astype('object')
```

Verificamos que se han realizado correctamente los cambios:

```
Data_Python.dtypes
```

```
Age                int64
Gender             object
Total_Bilirubin    float64
Direct_Bilirubin   float64
Alkaline_Phosphotase  int64
Alamine_Aminotransferase  int64
Aspartate_Aminotransferase int64
Total_Protiens     float64
Albumin            float64
Albumin_and_Globulin_Ratio float64
Diseased           object
dtype: object
```

4.3.2 Resumen Estadístico Descriptivo Básico

Ahora vamos a hacer una descripción estadística básica de las variables del data-set:

```
Data_Python.describe(include='all') # include='all' para dar un
↳ tratamiento diferente a las categoricas que a las cuantitativas
```

	Y	Age	Gender	Total_Bilirubin	Direct_Bilirubin
count	583.0	583.000000	583.0	583.000000	583.000000
unique	2.0	NaN	2.0	NaN	NaN
top	0.0	NaN	1.0	NaN	NaN
freq	416.0	NaN	441.0	NaN	NaN
mean	NaN	44.746141	NaN	3.298799	1.486106
std	NaN	16.189833	NaN	6.209522	2.808498
min	NaN	4.000000	NaN	0.400000	0.100000
25%	NaN	33.000000	NaN	0.800000	0.200000
50%	NaN	45.000000	NaN	1.000000	0.300000
75%	NaN	58.000000	NaN	2.600000	1.300000
max	NaN	90.000000	NaN	75.000000	19.700000

	Alkaline_Phosphotase	Alamine_Aminotransferase
count	583.000000	583.000000
unique	NaN	NaN
top	NaN	NaN
freq	NaN	NaN
mean	290.576329	80.713551
std	242.937989	182.620356
min	63.000000	10.000000
25%	175.500000	23.000000
50%	208.000000	35.000000
75%	298.000000	60.500000
max	2110.000000	2000.000000

	Aspartate_Aminotransferase	Total_Protiens	Albumin
count	583.000000	583.000000	583.000000
unique	NaN	NaN	NaN
top	NaN	NaN	NaN
freq	NaN	NaN	NaN
mean	109.910806	6.483190	3.141852
std	288.918529	1.085451	0.795519
min	10.000000	2.700000	0.900000
25%	25.000000	5.800000	2.600000
50%	42.000000	6.600000	3.100000
75%	87.000000	7.200000	3.800000
max	4929.000000	9.600000	5.500000

	Albumin_and_Globulin_Ratio
count	583.000000
unique	NaN
top	NaN
freq	NaN
mean	0.947064
std	0.318492
min	0.300000
25%	0.700000
50%	0.947064
75%	1.100000
max	2.800000

4.3.3 Análisis gráfico general

Histogramas para las variables cuantitativas

Vamos a generar un histograma para cada variable cuantitativa.

```
import numpy as np
import seaborn as sns
import matplotlib as mpl
import matplotlib.pyplot as plt

fig, axs = plt.subplots(3, 3, figsize=(13, 13))

p1 = sns.histplot(data=Data_Python, x="Total_Bilirubin",
    ↪ stat="proportion", bins=15, color="skyblue", ax=axs[0, 0])
p1.set_xticks( range(int(Data_Python['Total_Bilirubin'].min()),
    ↪ int(Data_Python['Total_Bilirubin'].max()) , 10) )
p1.set_yticks( np.arange(0, 1, 0.1) )

p2 = sns.histplot(data=Data_Python, x="Direct_Bilirubin",
    ↪ stat="proportion", bins=15, color="olive", ax=axs[0, 1])
p2.axes.set(xlabel='Direct_Bilirubin', ylabel=' ')
p2.set_xticks( range(int(Data_Python['Direct_Bilirubin'].min()),
    ↪ int(Data_Python['Direct_Bilirubin'].max()) , 3) )
p2.set_yticks( np.arange(0, 1, 0.1) )

p3 = sns.histplot(data=Data_Python, x="Alkaline_Phosphotase",
    ↪ stat="proportion", bins=15, color="blue", ax=axs[0, 2])
p3.axes.set(xlabel='Alkaline_Phosphotase', ylabel=' ')
p3.set_xticks( range(int(Data_Python['Alkaline_Phosphotase'].min()),
    ↪ int(Data_Python['Alkaline_Phosphotase'].max()) , 320) )
p3.set_yticks( np.arange(0, 1, 0.1) )

p4 = sns.histplot(data=Data_Python, x="Alamine_Aminotransferase",
    ↪ stat="proportion", bins=15, color="teal", ax=axs[1, 0])
p4.axes.set(xlabel='Alamine_Aminotransferase', ylabel=' ')
p4.set_xticks( range(int(Data_Python['Alamine_Aminotransferase'].min()),
    ↪ int(Data_Python['Alamine_Aminotransferase'].max()) , 300) )
p4.set_yticks( np.arange(0, 1, 0.1) )

p5 = sns.histplot(data=Data_Python, x="Aspartate_Aminotransferase",
    ↪ stat="proportion", bins=15, color="purple", ax=axs[1, 1])
p5.axes.set(xlabel='Aspartate_Aminotransferase', ylabel=' ')
p5.set_xticks( range(int(Data_Python['Aspartate_Aminotransferase'].min()),
    ↪ , int(Data_Python['Aspartate_Aminotransferase'].max()) , 850) )
p5.set_yticks( np.arange(0, 1, 0.1) )

p6 = sns.histplot(data=Data_Python, x="Total_Protiens", stat="proportion",
    ↪ bins=15, color="pink", ax=axs[1, 2])
p6.axes.set(xlabel='Total_Protiens', ylabel=' ')
p6.set_xticks( range(int(Data_Python['Total_Protiens'].min()),
    ↪ int(Data_Python['Total_Protiens'].max()+1) , 1) )
p6.set_yticks( np.arange(0, 1, 0.1) )
```

```

p7 = sns.histplot(data=Data_Python, x="Albumin", stat="proportion",
    → bins=15, color="orange", ax=axes[2, 0])
p7.axes.set(xlabel='Albumin', ylabel=' ')
p7.set_xticks( range(int(Data_Python['Albumin'].min()) ,
    → int(Data_Python['Albumin'].max()+1) , 1) )
p7.set_yticks( np.arange(0, 1, 0.1) )

p8 = sns.histplot(data=Data_Python, x="Albumin_and_Globulin_Ratio",
    → stat="proportion", bins=15, color="red", ax=axes[2, 1])
p8.axes.set(xlabel='Albumin_and_Globulin_Ratio', ylabel=' ')
p8.set_xticks( np.arange(0, 2, 0.5) )
p8.set_yticks( np.arange(0, 1, 0.1) )

p9 = sns.histplot(data=Data_Python, x="Age", stat="proportion", bins=15,
    → color="green", ax=axes[2, 2])
p9.axes.set(xlabel='Age', ylabel=' ')
p9.set_xticks( range(int(Data_Python['Age'].min()) ,
    → int(Data_Python['Age'].max()) , 10) )
p9.set_yticks( np.arange(0, 1, 0.1) )

plt.show()

```

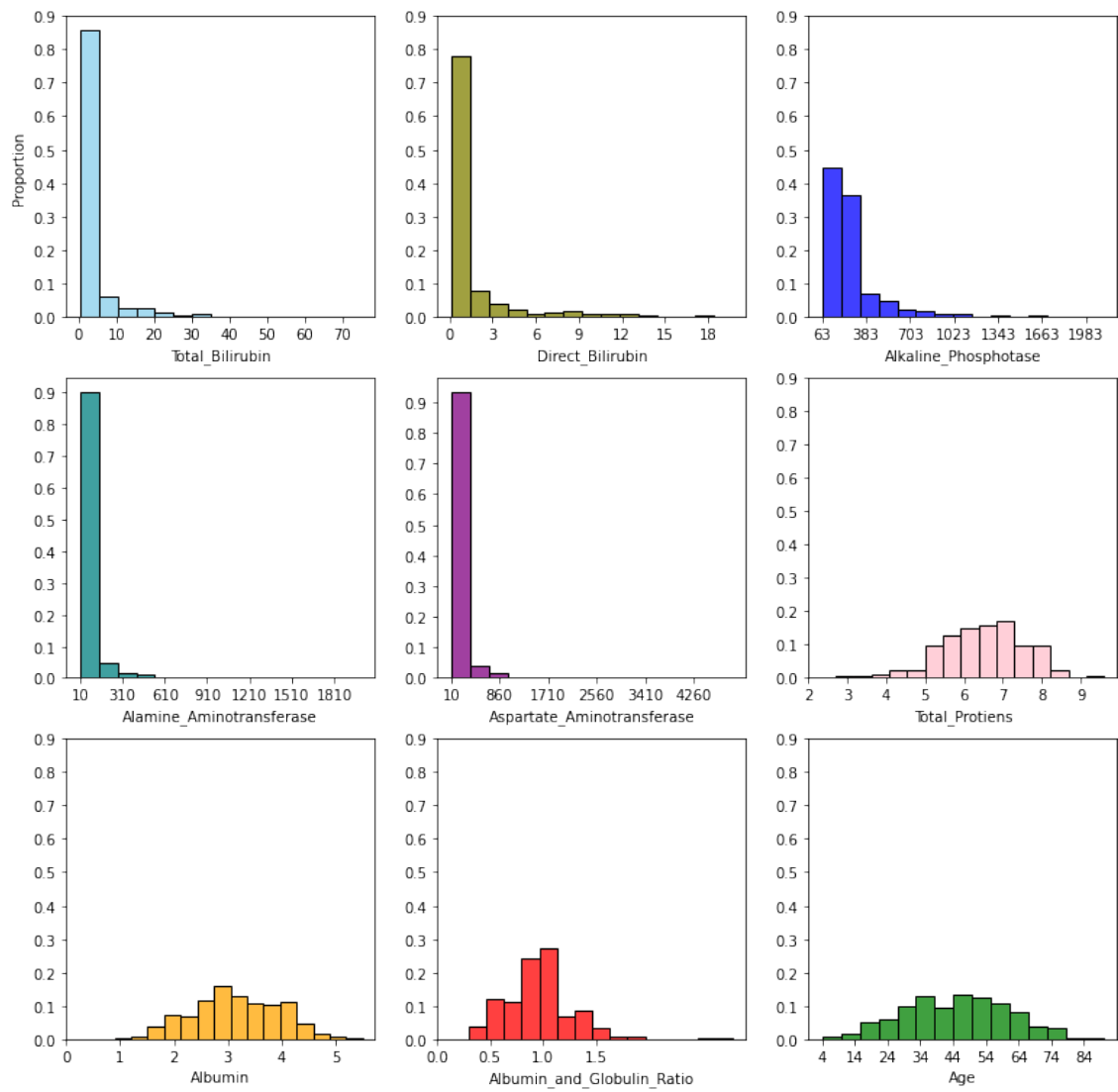


Figure 1: Histogramas variables cuantitativas

Diagramas de barras para las variables categóricas

Ahora vamos a realizar una serie de operaciones para generar dos diagramas de barras, uno para la variable Gender y otro para Diseased.

```
proportion_Female = len( Data_Python.loc[ Data_Python['Gender']==0 , :] )  
↪ / len(Data_Python)  
proportion_Male = len( Data_Python.loc[ Data_Python['Gender']==1 , :] ) /  
↪ len(Data_Python)  
  
proportion_Diseased_yes = len( Data_Python.loc[ Data_Python['Diseased']==0  
↪ , :] ) / len(Data_Python)  
proportion_Diseased_no = len( Data_Python.loc[ Data_Python['Diseased']==1  
↪ , :] ) / len(Data_Python)
```

```
Data_Python['proportion_Gender'] = 0  
  
for i in range(0, len(Data_Python)):  
  
    if Data_Python['Gender'][i] == 0 :  
  
        Data_Python['proportion_Gender'][i] = proportion_Female  
  
    else :  
  
        Data_Python['proportion_Gender'][i] = proportion_Male
```

```
Data_Python['proportion_Diseased'] = 0  
  
for i in range(0, len(Data_Python)):  
  
    if Data_Python['Diseased'][i] == 0 :  
  
        Data_Python['proportion_Diseased'][i] = proportion_Diseased_yes  
  
    else :  
  
        Data_Python['proportion_Diseased'][i] = proportion_Diseased_no
```

```
fig, axs = plt.subplots(1, 2, figsize=(8, 8))  
  
p1 = sns.barplot(x='Gender', y='proportion_Gender', data=Data_Python,  
↪ ax=axs[0])  
p1.set_yticks( np.arange(0, 0.85, 0.1) )  
p1.set_xticklabels(['Female', 'Male'])  
p1.axes.set(xlabel='Gender', ylabel='proportion')  
  
p2 = sns.barplot(x='Diseased', y='proportion_Diseased', data=Data_Python,  
↪ ax=axs[1])  
p2.set_yticks( np.arange(0, 0.85, 0.1) )
```

```

p2.set_xticklabels(['Yes', 'No'])
p2.axes.set(xlabel='Diseased', ylabel=' ')

plt.show()

```

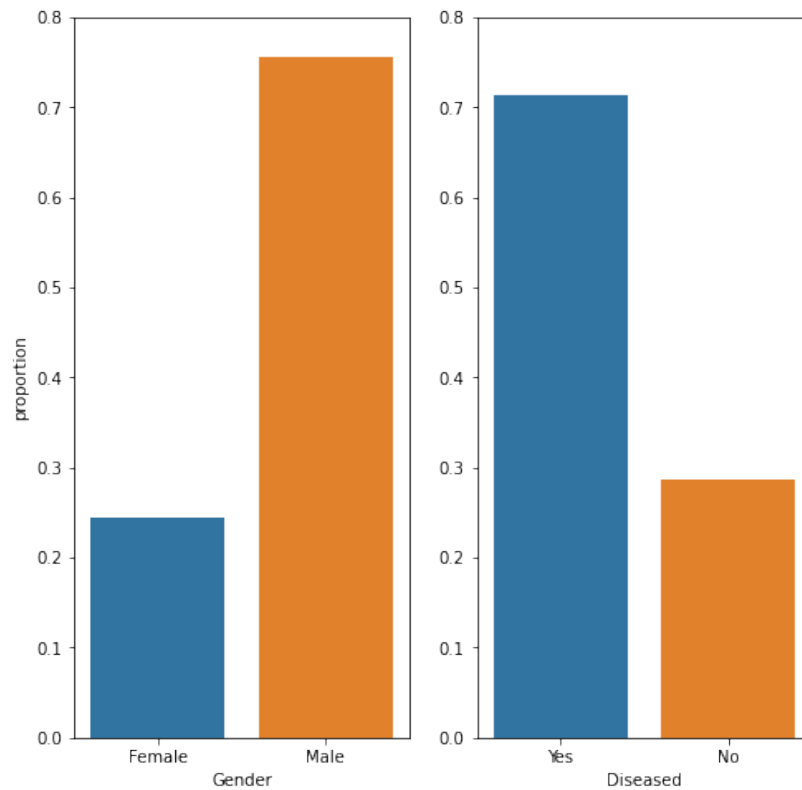


Figure 2: Diagramas de barras variables categoricas

```
[ proportion_Female , proportion_Male ]
```

```
[0.24356775300171526, 0.7564322469982847]
```

```
[ proportion_Diseased_yes , proportion_Diseased_no ]
```

```
[0.7135506003430532, 0.2864493996569468]
```

Como puede verse el porcentaje de mujeres en la muestra es del 24.36% , mientras que el de hombres es del 75.64%

Por otro lado el porcentaje de endfermos es del 71.36%, mientras que el de no enfermos es del 28.64%

Box-plots para las variables cuantitativas

```
fig, axs = plt.subplots(3, 3, figsize=(13, 13))

p1 = sns.boxplot(x=Data_Python['Age'], color="palegreen", ax=axs[0, 0])
p1.set_xticks( range(int(Data_Python['Age'].min()) ,
    ↳ int(Data_Python['Age'].max()+10) , 10) )

p2 = sns.boxplot(x=Data_Python['Direct_Bilirubin'], color="olive",
    ↳ ax=axs[0, 1])
p2.set_xticks( range(int(Data_Python['Direct_Bilirubin'].min()) ,
    ↳ int(Data_Python['Direct_Bilirubin'].max()) , 10) )

p3 = sns.boxplot(x=Data_Python['Alkaline_Phosphotase'], color="blue",
    ↳ ax=axs[1, 0])
p3.set_xticks( range(int(Data_Python['Alkaline_Phosphotase'].min()) ,
    ↳ int(Data_Python['Alkaline_Phosphotase'].max() ) , 300) )

p4 = sns.boxplot(x=Data_Python['Alamine_Aminotransferase'], color="teal",
    ↳ ax=axs[1, 1])
p4.set_xticks( range(int(Data_Python['Alamine_Aminotransferase'].min()) ,
    ↳ int(Data_Python['Alamine_Aminotransferase'].max()) , 500) )

p5 = sns.boxplot(x=Data_Python['Aspartate_Aminotransferase'],
    ↳ color="purple", ax=axs[0, 2])
p5.set_xticks( range(int(Data_Python['Aspartate_Aminotransferase'].min())
    ↳ , int(Data_Python['Aspartate_Aminotransferase'].max()) , 850) )

p6 = sns.boxplot(x=Data_Python['Total_Protiens'], color="pink", ax=axs[1,
    ↳ 2])
p6.set_xticks( range(int(Data_Python['Total_Protiens'].min()) ,
    ↳ int(Data_Python['Total_Protiens'].max()) , 10) )

p7 = sns.boxplot(x=Data_Python['Albumin'], color="orange", ax=axs[2, 2])
p7.set_xticks( range(int(Data_Python['Albumin'].min()) ,
    ↳ int(Data_Python['Albumin'].max()) , 10) )

p8 = sns.boxplot(x=Data_Python['Albumin_and_Globulin_Ratio'], color="red",
    ↳ ax=axs[2, 1])
p8.set_xticks( range(int(Data_Python['Albumin_and_Globulin_Ratio'].min())
    ↳ , int(Data_Python['Albumin_and_Globulin_Ratio'].max()) , 10) )

p9 = sns.boxplot(x=Data_Python['Total_Bilirubin'], color="skyblue",
    ↳ ax=axs[2, 0])
p9.set_xticks( range(int(Data_Python['Total_Bilirubin'].min()) ,
    ↳ int(Data_Python['Total_Bilirubin'].max()) , 10) )

plt.show()
```

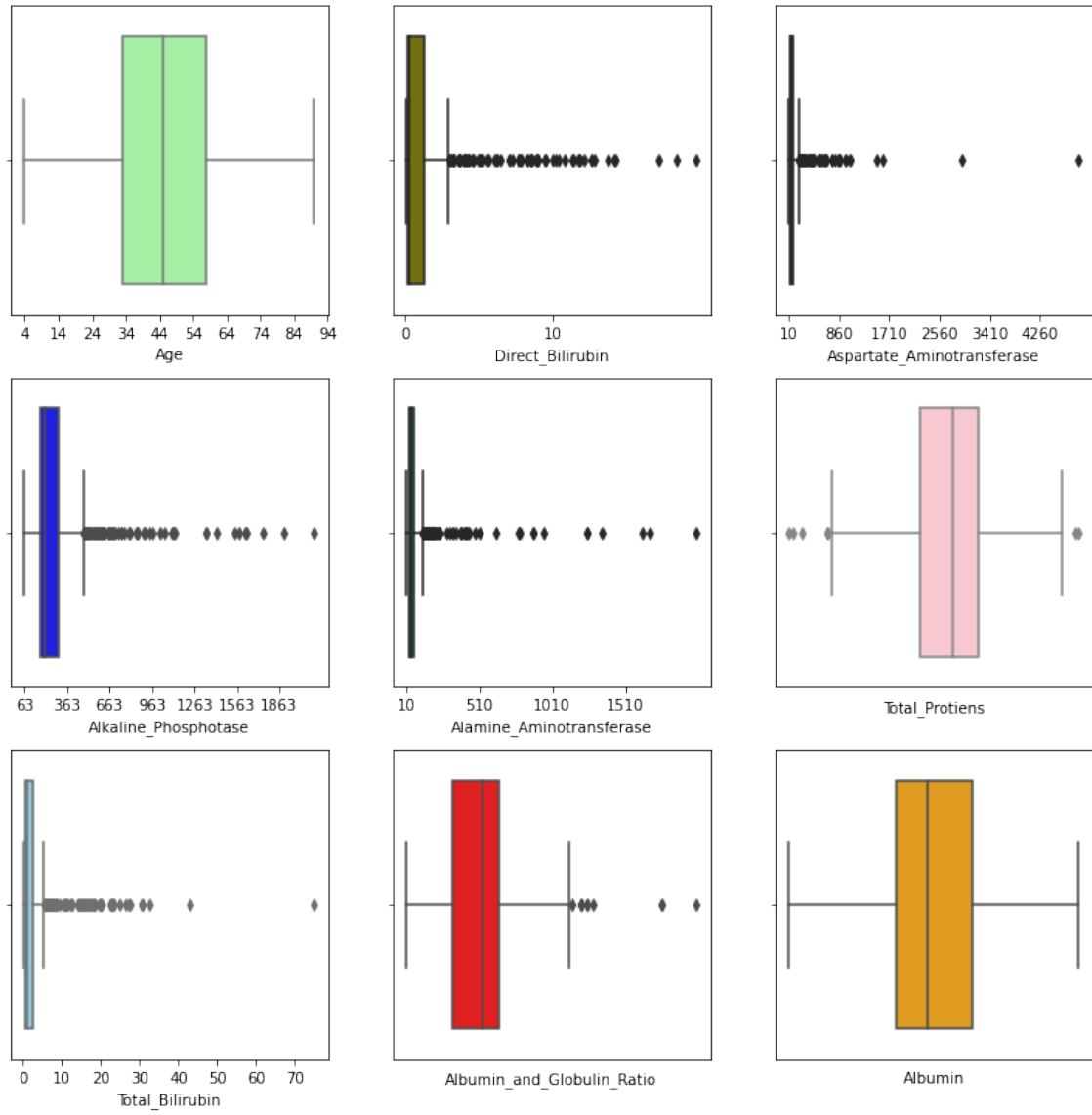


Figure 3: Box-plots variables cuantitativas

4.3.4 Análisis de la relación entre los predictores categoricos y la respuesta

Analisis relación entre respuesta (Diseased) y Gender

Frecuencia relativa de genero condicionada a enfermedad

Ahora vamos a realizar una serie de operaciones para obtener una tabla de frecuencias relativas de la variable Gender condicionada a la respuesta (Diseased). También obtendremos el gráfico de barras asociado a esta tabla.

```
Df_Diseased_Yes = Data_Python.loc[ Data_Python['Diseased']==0 , :]  
  
proportion_Female_in_Diseased_Yes = len(  
    ↪ Df_Diseased_Yes.loc[Df_Diseased_Yes['Gender']==0 , :] ) /  
    ↪ len(Df_Diseased_Yes)  
  
#####  
  
Df_Diseased_Yes = Data_Python.loc[ Data_Python['Diseased']==0 , :]  
  
proportion_Male_in_Diseased_Yes = len(  
    ↪ Df_Diseased_Yes.loc[Df_Diseased_Yes['Gender']==1 , :] ) /  
    ↪ len(Df_Diseased_Yes)  
  
#####  
  
Df_Diseased_No = Data_Python.loc[ Data_Python['Diseased']==1 , :]  
  
proportion_Female_in_Diseased_No = len(  
    ↪ Df_Diseased_No.loc[Df_Diseased_No['Gender']==0 , :] ) /  
    ↪ len(Df_Diseased_No)  
  
#####  
  
Df_Diseased_No = Data_Python.loc[ Data_Python['Diseased']==1 , :]  
  
proportion_Male_in_Diseased_No = len(  
    ↪ Df_Diseased_No.loc[Df_Diseased_No['Gender']==1 , :] ) /  
    ↪ len(Df_Diseased_No)
```

Función para calcular tablas de frecuencias relativas condicionadas con dos variables:

```
def Table_Con_Rel_Freq_2_Var_Py (df, var1, p1, p2, var1_name='var1' ,  
    ↪ var2_name='var2') :  
  
    table = np.zeros(( p2+1 , p1+1 ))  
    table[:] = np.nan  
  
#####  
  
    for i in range(0, p2+1):  
        for j in range(0, p1+1):
```

```

df_new = df.loc[ var1 == j , : ]

table[i,j] = len( df_new.loc[ df_new[var2_name] == i , :] ) /
↪ len(df_new)

table = pd.DataFrame(table)

return table

```

```

Frec_Relativas_Condicionadas_Gender_in_Diseased =
↪ Table_Con_Rel_Freq_2_Var_Py (Data_Python, Data_Python['Diseased'], 1,
↪ 1, var1_name='Diseased' , var2_name='Gender')

Frec_Relativas_Condicionadas_Gender_in_Diseased.index = ['Female' ,
↪ 'Male']
Frec_Relativas_Condicionadas_Gender_in_Diseased.columns = ['Yes' , 'No']
Frec_Relativas_Condicionadas_Gender_in_Diseased =
↪ Frec_Relativas_Condicionadas_Gender_in_Diseased.style.set_caption("Gender
↪ | Diseased ")

```

```

p1 = sns.countplot(data=Data_Python, x="Diseased", hue="Gender",
↪ palette="husl")
p1.set_xticklabels(['Yes', 'No'])
p1.legend(title='Gender', loc='upper right', labels=['Female', 'Male'])

```

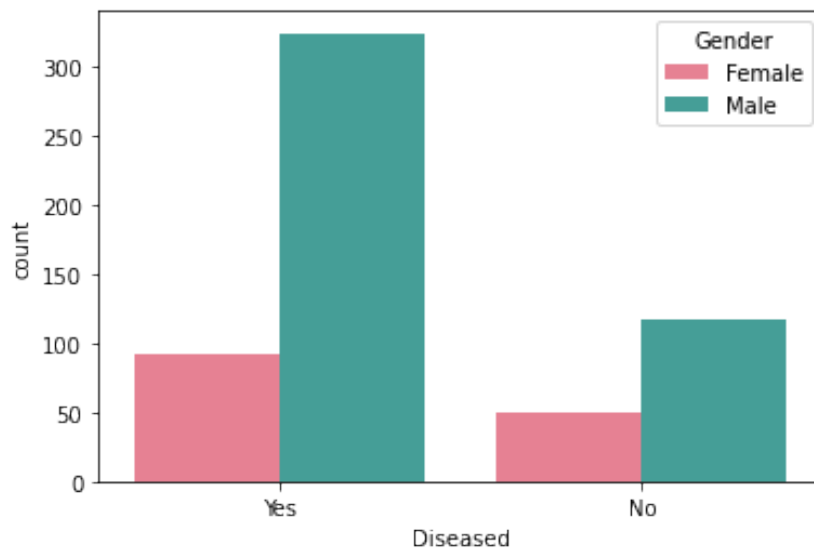


Figure 4: Diagrama de barras de Gender condicionada a Diseased

```
Frec_Relativas_Condicionadas_Gender_in_Diseased
```

Gender | Diseased

	Yes	No
Female	0.221154	0.299401
Male	0.778846	0.700599

```
[proportion_Female_in_Diseased_Yes , proportion_Male_in_Diseased_Yes]
```

```
[0.22115384615384615, 0.7788461538461539]
```

```
[proportion_Female_in_Diseased_No , proportion_Male_in_Diseased_No]
```

```
[0.2994011976047904, 0.7005988023952096]
```

Como puede observarse el porcentaje de mujeres dentro del grupo de los enfermos es del 22.12% , mientras que el de hombres es del 77.88%.

Por otro lado el porcentaje de mujeres dentro del grupo de los no enfermos es del 29.94%, mientras que el de hombres es del 70.06%

Frecuencia relativa de enfermedad condicionada al genero

Ahora vamos a realizar una serie de operaciones para obtener una tabla de frecuencias relativas de la variable respuesta (Diseased) condicionada a la variable Gender . También obtendremos el gráfico de barras asociado a esta tabla.

```
Frec_Relativas_Condicionadas_Diseased_in_Gender =  
→ Table_Con_Rel_Freq_2_Var_Py (Data_Python, Data_Python['Gender'], 1, 1,  
→ var1_name='Gender' , var2_name='Diseased')  
Frec_Relativas_Condicionadas_Diseased_in_Gender.index = ['Yes' , 'No']  
Frec_Relativas_Condicionadas_Diseased_in_Gender.columns = ['Female' ,  
→ 'Male']  
Frec_Relativas_Condicionadas_Diseased_in_Gender =  
→ Frec_Relativas_Condicionadas_Diseased_in_Gender.style.set_caption("Diseased  
→ | Gender")
```

```
p = sns.countplot(data=Data_Python, x="Gender", hue="Diseased",  
→ palette="husl")  
p.set_xticklabels(['Female', 'Male'])  
p.legend(title='Diseased', loc='upper right', labels=['Yes', 'No'])
```

```
Frec_Relativas_Condicionadas_Diseased_in_Gender
```

Diseased | Gender

	Female	Male
Yes	0.647887	0.734694
No	0.352113	0.265306

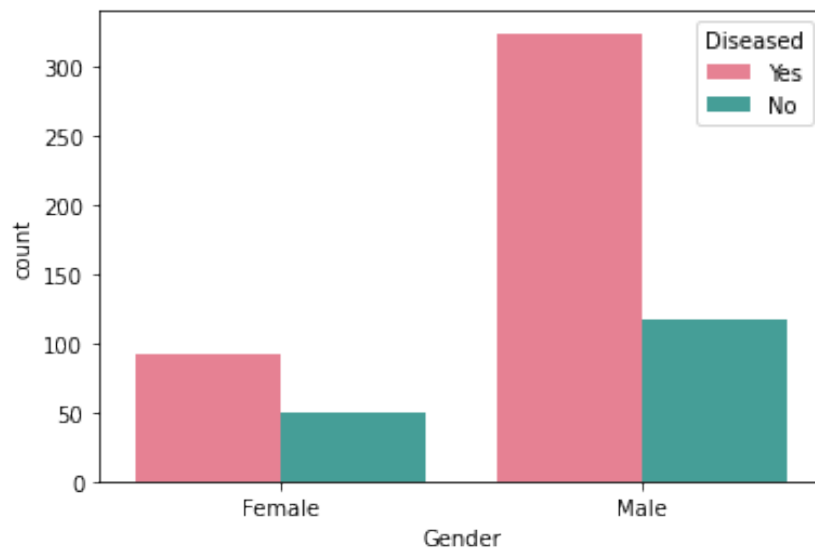


Figure 5: Diagrama de barras de Diseased condicionada a Gender

Como puede observarse el porcentaje de enfermos dentro del grupo de as mujeres es del 64.79% , mientras que el de no enfermos es del 35.21%.

Por otro lado el porcentaje de enfermos dentro del grupo de los hombres es del 73.47%, mientras que el de no enfermos es del 26.53%

Analisis relación entre respuesta (Diseased) y Grupo de Edad

Frecuecnia relativa de enfermedad en funcion del grupo de edad

Tenemos que categorizar la variable cuantitativa Age (edad) , para ello debemos emplear una regla de categorización (mediana, media, cuartiles, Scott ...)

Usaremos la regla de los cuartiles por simplicidad:

```
intervals = np.quantile( Data_Python['Age'] , [0, 0.25, 0.5, 0.75 , 1])
intervals
```

```
array([ 4., 33., 45., 58., 90.])
```

Nos apoyaremos en la funcion `cut()` de la libreria **Pandas** para categorizar la variable Age usando la regla de los cuartiles.

A esta función le das un vector (bins) y construye unos intervalos con los elementos del vector, en este caso (3, 33], (33, 45], (45, 58], (58, 90]. Luego te devuelve a qué intervalo pertenece cada observación de una variable dada (en nuestro caso Age), y también nos permite codificar estos intervalos con la codificación estandar (0,1,2,...), y así obtener una nueva variable que es una versión categorizada de la variable pasada (Age en nuestro caso).

Vamos a restar una cantidad positiva (por ejemplo 1) al mínimo de Age, puesto que ese valor será el extremo inferior del primer intervalo, y dicho intervalo será abierto en ese extremo (por configuración de la función `cut`), por tanto si no restasemos una cantidad positiva, el valor mínimo de Age no estaría en ninguno de los intervalos generados por `cut()`

```
intervals[0] = intervals[0] - 1
intervals
```

```
array([ 3., 33., 45., 58., 90.])
```

```
pd.cut(x=Data_Python['Age'] , bins=intervals , right=True)
```

```
0      (58.0, 90.0]
1      (58.0, 90.0]
2      (58.0, 90.0]
3      (45.0, 58.0]
4      (58.0, 90.0]
...
578    (58.0, 90.0]
579    (33.0, 45.0]
580    (45.0, 58.0]
581    (3.0, 33.0]
582    (33.0, 45.0]
```

Name: Age, Length: 583, dtype: category

Categories (4, interval[float64, right]): [(3.0, 33.0] < (33.0, 45.0] < (45.0, 58.0] < (5

```
pd.cut(x=Data_Python['Age'] , bins=intervals , labels=False)
```

```
0      3
1      3
2      3
3      2
4      3
..
578    3
579    1
580    2
581    0
582    1
Name: Age, Length: 583, dtype: int64
```

```
Data_Python['Age_cat'] = pd.cut(x=Data_Python['Age'] , bins=intervals ,
↪ labels=False)
```

La nueva variable Age_cat es tal que:

$$Age_cat_i = \begin{cases} 0, & \text{if } Age_i \in [Min(Age), Q(0.25, Age)] \\ 1, & \text{if } Age_i \in (Q(0.25, Age), Q(0.50, Age)] \\ 2, & \text{if } Age_i \in (Q(0.50, Age), Q(0.75, Age)] \\ 3, & \text{if } Age_i \in (Q(0.75, Age), Max(Age)] \end{cases}$$

para $i = 1, \dots, n$

Ahora tenemos una variable que nos indica el grupo de edad de cada individuo. Tenemos tres grupos de edad.

Grupo 0: ≤ 33 años

Grupo 1: entre 33 y 45 años

Grupo 2: entre 45 y 58 años

grupo 3: > 58 años

Ahora vamos a generar una tabla de frecuencias relativas de la variable respuesta (Diseased) condicionada a la nueva variable Grupo de edad (Age_cat), también generaremos su gráfico de barras asociado.

```
Frec_Relativas_Condicionadas_Diseased_in_Aged =
→ Table_Con_Rel_Freq_2_Var_Py (Data_Python, Data_Python['Age_cat'], 3,
→ 1, var1_name='Age_cat' , var2_name='Diseased')
Frec_Relativas_Condicionadas_Diseased_in_Aged.index = ['Yes' , 'No']
Frec_Relativas_Condicionadas_Diseased_in_Aged.columns = ['(3, 33]' , '(33,
→ 45]' , '(45, 58]' , '(58, 90]']
Frec_Relativas_Condicionadas_Diseased_in_Aged =
→ Frec_Relativas_Condicionadas_Diseased_in_Aged.style.set_caption("Diseased
→ | Age Group")
```

```
p = sns.countplot(data=Data_Python, x="Age_cat", hue="Diseased",
→ palette="husl")
p.set_xticklabels(['(3, 33]' , '(33, 45]' , '(45, 58]' , '(58, 90]'])
p.legend(title='Diseased', loc='upper right', labels=['Yes', 'No'] )
```

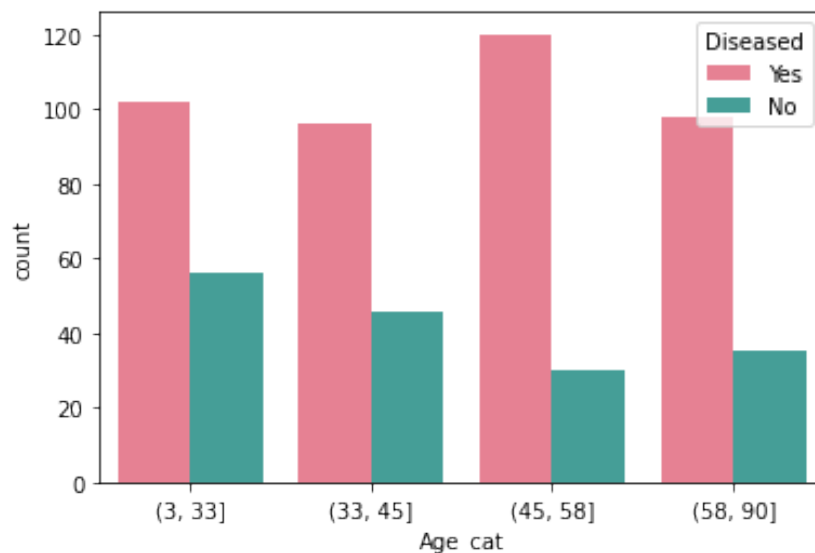


Figure 6: Grafico de barras de Diseased condicionada a grupo de edad (Age_cat)

```
Frec_Relativas_Condicionadas_Diseased_in_Aged
```

Diseased | Age Group

	(3, 33]	(33, 45]	(45, 58]	(58, 90]
Yes	0.645570	0.676056	0.800000	0.736842
No	0.354430	0.323944	0.200000	0.263158

Como puede observarse dentro del grupo de los más jóvenes (de edad menor o igual a 33) el porcentaje de enfermos es del 64.56% , este porcentaje aumenta hasta el 67.60% en el grupo de individuos cuya edad esta entre 33 y 45 años, y hasta el 80% en el de los individuos con una edad entre 45 y 58 años, luego pasa a ser del 73.68% en el grupo de edad superior a 58 años.

Frecuecnia relativa de grupo de edad en funcion de enfermedad

Ahora vamos a generar una tabla de frecuencias relativas de la variable grupo de edad (Age_cat) condicionada a la variable respuesta, también generaremos su gráfico de barras asociado.

```
Frec_Relativas_Condicionadas_Age_in_Diseased = Table_Con_Rel_Freq_2_Var_Py
→ (Data_Python, Data_Python['Diseased'], 1, 3, var1_name='Diseased' ,
→ var2_name='Age_cat')
Frec_Relativas_Condicionadas_Age_in_Diseased.index = ['(3, 33]', '(33,
→ 45]', '(45, 58]', '(58, 90]']
Frec_Relativas_Condicionadas_Age_in_Diseased.columns = ['Yes' , 'No']
Frec_Relativas_Condicionadas_Age_in_Diseased =
→ Frec_Relativas_Condicionadas_Age_in_Diseased.style.set_caption("Age
→ Group | Diseased")
```

```
p = sns.countplot(data=Data_Python, x="Diseased", hue="Age_cat",
→ palette="husl")
p.set_xticklabels(['Yes', 'No'])
p.legend(title='Group Age', loc='upper right', labels= ['(3, 33]', '(33,
→ 45]', '(45, 58]', '(58, 90]'])
```

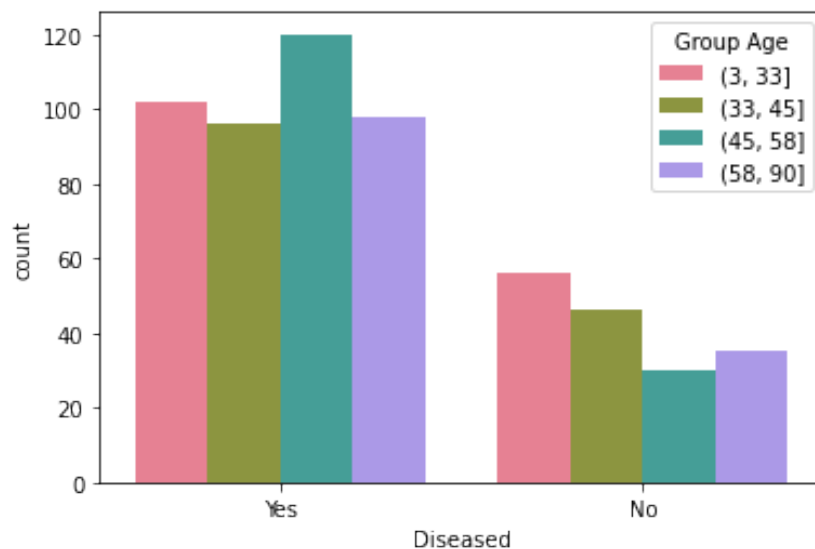


Figure 7: Grafico de barras de grupo de edad (Age_cat) condicionada Diseased

```
Frec_Relativas_Condicionadas_Age_in_Diseased
```


Age Group | Diseased

	Yes	No
(3, 33]	0.245192	0.335329
(33, 45]	0.230769	0.275449
(45, 58]	0.288462	0.179641
(58, 90]	0.235577	0.209581

Se puede apreciar que dentro del grupo de los enfermos , el grupo de edad mas frecuente seria el de los individuos con una edad entre 45 y 58 años, seguido del de más de 58 años.

Por otro lado dentro del grupo de los no enfermos el grupo de edad claramente mayoritario es el de los mas jovenes (edad menor o igual a 33 años), seguido del siguiente grupo mas joven (edad entre 33 y 45).

4.3.5 Análisis de la relación entre los predictores cuantitativos y la respuesta

Resumen Estadístico Descriptivo Cuantitativo en función de Diseased

Ahora vamos a hacer una serie de operaciones para obtener una tabla en la que se pueden comparar los valores de diferentes estadísticos descriptivos básicos para cada variable cuantitativa en función del valor de la respuesta (Diseased).

```
Data_Python_Quantitative_Diseased_yes = Data_Python.loc[
→ Data_Python['Diseased'] == 0 , (Data_Python.columns != 'Gender') &
→ (Data_Python.columns != 'Diseased') & (Data_Python.columns !=
→ 'proportion_Gender') & (Data_Python.columns != 'proportion_Diseased')
→ & (Data_Python.columns != 'Age_cat') ]
Data_Python_Quantitative_Diseased_no = Data_Python.loc[
→ Data_Python['Diseased'] == 1 , (Data_Python.columns != 'Gender') &
→ (Data_Python.columns != 'Diseased') & (Data_Python.columns !=
→ 'proportion_Gender') & (Data_Python.columns != 'proportion_Diseased')
→ & (Data_Python.columns != 'Age_cat') ]
```

```
std_yes = Data_Python_Quantitative_Diseased_yes.std()
std_no = Data_Python_Quantitative_Diseased_no.std()

mean_yes = Data_Python_Quantitative_Diseased_yes.mean()
mean_no = Data_Python_Quantitative_Diseased_no.mean()

Q25_yes = Data_Python_Quantitative_Diseased_yes.quantile(q=0.25)
Q25_no = Data_Python_Quantitative_Diseased_no.quantile(q=0.25)

Q50_yes = Data_Python_Quantitative_Diseased_yes.quantile(q=0.5)
Q50_no = Data_Python_Quantitative_Diseased_no.quantile(q=0.5)

Q75_yes = Data_Python_Quantitative_Diseased_yes.quantile(q=0.75)
Q75_no = Data_Python_Quantitative_Diseased_no.quantile(q=0.75)

min_yes = Data_Python_Quantitative_Diseased_yes.min()
min_no = Data_Python_Quantitative_Diseased_no.min()
```

```
max_yes = Data_Python_Quantitative_Diseased_yes.max()
max_no = Data_Python_Quantitative_Diseased_no.max()
```

```
df_yes = pd.DataFrame({'mean':mean_yes , 'min':min_yes , 'Q25':Q25_yes ,
↳ 'median':Q50_yes , 'Q75':Q75_yes , 'max':max_yes , 'std':std_yes})
```

```
df_no = pd.DataFrame({'mean':mean_no , 'min':min_no , 'Q25':Q25_no ,
↳ 'median':Q50_no , 'Q75':Q75_no , 'max':max_no , 'std':std_no})
```

```
Statistics_Quantitatives_Diseased = pd.DataFrame({

    'Age_yes':df_yes.iloc[0,:],
    'Age_no':df_no.iloc[0,:],
    'Total_Bilirubin_yes':df_yes.iloc[1,:],
    'Total_Bilirubin_no':df_no.iloc[1,:],
    'Direct_Bilirubin_yes':df_yes.iloc[2,:],
    'Direct_Bilirubin_no':df_no.iloc[2,:],
    'Alkaline_Phosphotase_yes':df_yes.iloc[3,:],
    'Alkaline_Phosphotase_no':df_no.iloc[3,:],
    'Alamine_Aminotransferase_yes':df_yes.iloc[4,:],
    'Alamine_Aminotransferase_no':df_no.iloc[4,:],
    'Aspartate_Aminotransferase_yes':df_yes.iloc[5,:],
    'Aspartate_Aminotransferase_no':df_no.iloc[5,:],
    'Total_Protiens_yes':df_yes.iloc[6,:],
    'Total_Protiens_no':df_no.iloc[6,:],
    'Albumin_yes':df_yes.iloc[7,:],
    'Albumin_no':df_no.iloc[7,:],
    'Albumin_and_Globulin_Ratio_yes':df_yes.iloc[8,:],
    'Albumin_and_Globulin_Ratio_no':df_no.iloc[8,:],

    })
```

Statistics_Quantitatives_Diseased

	Age_yes	Age_no	Total_Bilirubin_yes	Total_Bilirubin_no
mean	46.153846	41.239521	4.164423	1.142515
min	7.000000	4.000000	0.400000	0.500000
Q25	34.000000	28.000000	0.800000	0.700000
median	46.000000	40.000000	1.400000	0.800000
Q75	58.000000	55.000000	3.625000	1.100000
max	90.000000	85.000000	75.000000	7.300000
std	15.654412	16.999366	7.144831	1.004472

	Direct_Bilirubin_yes	Direct_Bilirubin_no	Alkaline_Phosphatase_yes
mean	1.923558	0.396407	319.007212
min	0.100000	0.100000	63.000000
Q25	0.200000	0.200000	186.000000
median	0.500000	0.200000	229.000000
Q75	1.800000	0.350000	315.250000
max	19.700000	3.600000	2110.000000
std	3.206901	0.519255	268.307911

	Alkaline_Phosphatase_no	Alamine_Aminotransferase_yes
mean	219.754491	99.605769
min	90.000000	12.000000
Q25	161.500000	25.000000
median	186.000000	41.000000
Q75	213.000000	76.500000
max	1580.000000	2000.000000
std	140.986262	212.768472

	Alkaline_Phosphatase_no	Alamine_Aminotransferase_yes
mean	219.754491	99.605769
min	90.000000	12.000000
Q25	161.500000	25.000000
median	186.000000	41.000000
Q75	213.000000	76.500000
max	1580.000000	2000.000000
std	140.986262	212.768472

	Alamine_Aminotransferase_no	Aspartate_Aminotransferase_yes
mean	33.652695	137.699519
min	10.000000	11.000000
Q25	20.000000	29.750000
median	27.000000	52.500000
Q75	37.500000	108.750000
max	181.000000	4929.000000
std	25.060392	337.389980

	Aspartate_Aminotransferase_no	Total_Protiens_yes	Total_Protiens_no
mean	40.688623	6.459135	6.543114
min	10.000000	2.700000	3.700000
Q25	21.000000	5.700000	5.900000
median	29.000000	6.550000	6.600000

Q75	43.500000	7.200000	7.300000
max	285.000000	9.600000	9.200000
std	36.411620	1.094659	1.063042

Total_Protiens_yes	Total_Protiens_no	Albumin_yes	Albumin_no
mean	6.459135	6.543114	3.060577
min	2.700000	3.700000	0.900000
Q25	5.700000	5.900000	2.500000
median	6.550000	6.600000	3.000000
Q75	7.200000	7.300000	3.625000
max	9.600000	9.200000	5.500000
std	1.094659	1.063042	0.786595

	Albumin_and_Globulin_Ratio_yes	Albumin_and_Globulin_Ratio_no
mean	0.914337	1.028588
min	0.300000	0.370000
Q25	0.700000	0.900000
median	0.900000	1.000000
Q75	1.100000	1.200000
max	2.800000	1.900000
std	0.325374	0.285658

Esta tabla nos aporta información muy relevante, algunos ejemplos son los siguientes:

- La media de edad en el grupo de los enfermos es de 46 años mientras que en el de no enfermos es 41.24
- Hay un 25% de los enfermos que tienen un valor de Total_Bilirubin superior a 3.62, mientras que en el grupo de los no enfermos solo un 25% supera un valor de 1.1.

Diagrama de puntos de la respuesta (Diseased) en función de predictores cuantitativos

En este caso vamos a generar unos diagramas de puntos de la respuesta en función de cada uno de los predictores cuantitativos. El diagrama de puntos que usaremos es un tipo especial que añade ruido horizontal a los puntos para poder así visualizar varios puntos que tengan un mismo valor real (valor sin ruido).

```
fig, axs = plt.subplots(3, 3, figsize=(15, 15))

p1 = sns.stripplot(data=Data_Python, x="Diseased", y="Age", jitter=0.3,
    → size=4, color='red', ax=axs[0, 0])
p1.set_xticklabels(['Yes', 'No'])
p1.set_yticks( range(int(Data_Python['Age'].min()) ,
    → int(Data_Python['Age'].max()) , 7) )

p2 = sns.stripplot(data=Data_Python, x="Diseased", y="Direct_Bilirubin",
    → jitter=0.3, size=4, color='red', ax=axs[0, 1])
p2.set_xticklabels(['Yes', 'No'])

p3 = sns.stripplot(data=Data_Python, x="Diseased",
    → y="Alkaline_Phosphotase", jitter=0.3, size=4, color='red', ax=axs[1,
    → 0])
p3.set_xticklabels(['Yes', 'No'])

p4 = sns.stripplot(data=Data_Python, x="Diseased",
    → y="Alamine_Aminotransferase", jitter=0.3, size=4, color='red',
    → ax=axs[1, 1])
p4.set_xticklabels(['Yes', 'No'])

p5 = sns.stripplot(data=Data_Python, x="Diseased",
    → y="Aspartate_Aminotransferase", jitter=0.3, size=4, color='red',
    → ax=axs[0, 2])
p5.set_xticklabels(['Yes', 'No'])

p6 = sns.stripplot(data=Data_Python, x="Diseased", y="Total_Protiens",
    → jitter=0.3, size=4, color='red', ax=axs[1, 2])
p6.set_xticklabels(['Yes', 'No'])

p7 = sns.stripplot(data=Data_Python, x="Diseased", y="Albumin",
    → jitter=0.3, size=4, color='red', ax=axs[2, 2])
p7.set_xticklabels(['Yes', 'No'])

p8 = sns.stripplot(data=Data_Python, x="Diseased",
    → y="Albumin_and_Globulin_Ratio", jitter=0.3, size=4, color='red',
    → ax=axs[2, 1])
p8.set_xticklabels(['Yes', 'No'])

p9 = sns.stripplot(data=Data_Python, x="Diseased", y="Total_Bilirubin",
    → jitter=0.3, size=4, color='red', ax=axs[2, 0])
p9.set_xticklabels(['Yes', 'No'])
```

```
plt.show()
```

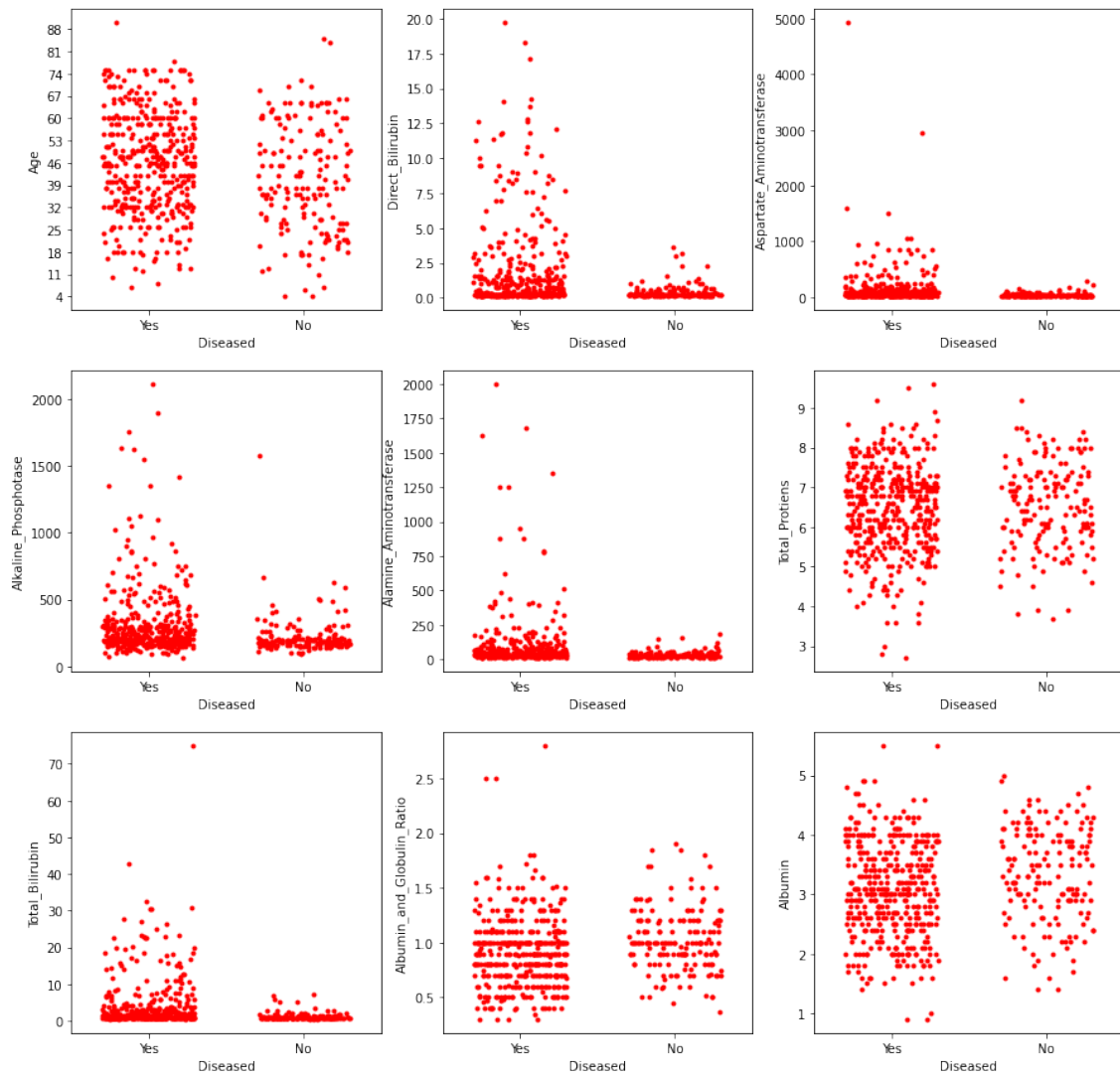


Figure 8: Diagrama de puntos Diseased en función de los predictores cuantitativos

4.4 Árboles de clasificación en R

4.4.1 Algoritmo rpart con R

```
%%R
```

```
library(rpart)
library(rpart.plot)
library(caret)
library(tidyverse)
```

Vamos a hacer la visualización del árbol con `rpart`

```
%%R
```

```
set.seed(0)
datos_entreno<-sample_frac(ilpd,0.75) # fraccionamos la muestra en
↳ entrenamiento y test
datos_test<-setdiff(ilpd,datos_entreno)

arbol_0<-rpart(diseased~.,data = datos_entreno, method = "class", cp=0.01)
rpart.plot(arbol_0,
            extra = 104,          # show fitted class, probs, percentages
            box.palette = "GnBu", # color scheme
            branch.lty = 3,       # dotted branch lines
            shadow.col = "gray",  # shadows under the node boxes
            nn = TRUE)
```

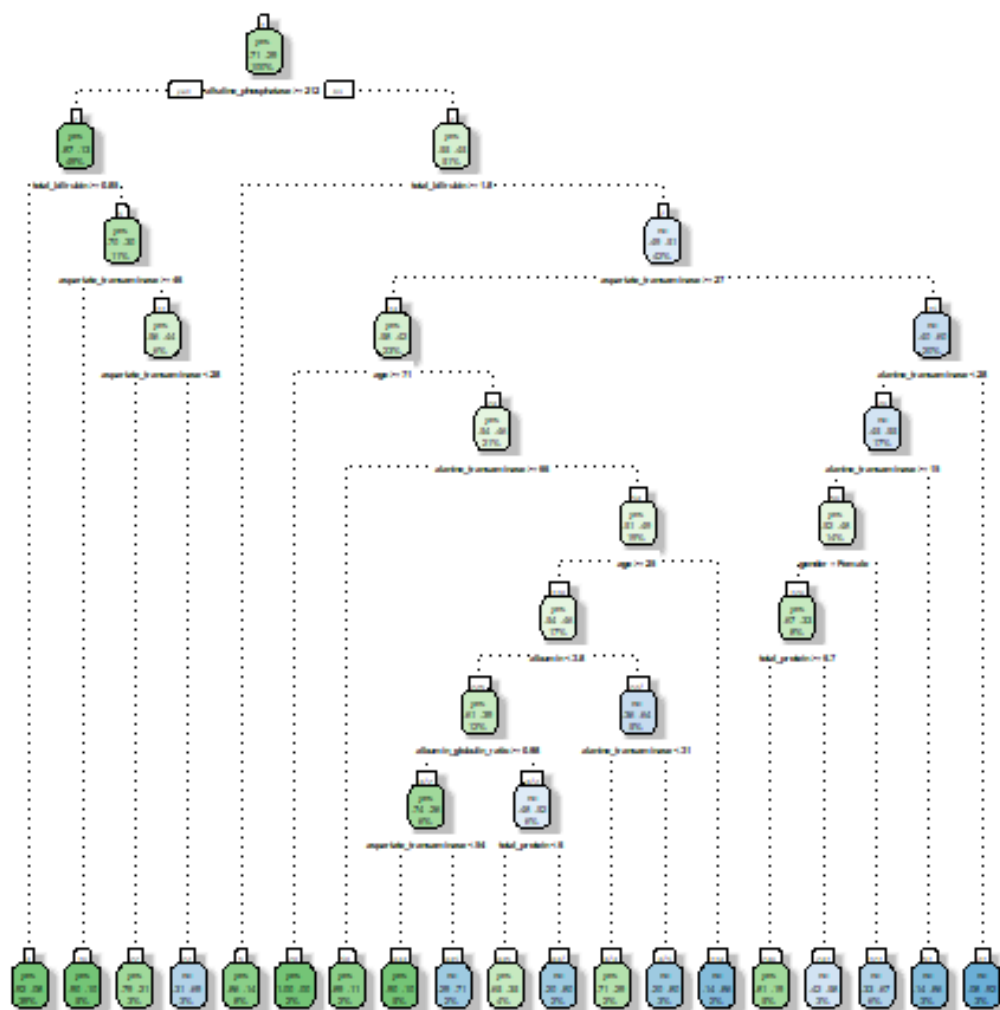


Figure 9: Arbol rpart con R

Ahora vamos a calcular las predicciones y la matriz de confusión:

```
%%R  
  
prediccion1<-predict(arbol_0,newdata=datos_test,type="class")  
  
matriz_confusion1<-confusionMatrix(prediccion1,datos_test[["diseased"]])
```

```
%%R  
  
prediccion1
```

```
  1  2  3  4  5  6  7  8  9 10 11 12 13 14 15 16 17 18 19 20  
no  no yes yes yes yes  no yes  no yes yes yes yes  no  no yes yes yes yes yes  
21 22 23 24 25 26 27 28 29 30 31 32 33 34 35 36 37 38 39 40  
yes yes yes yes  no yes yes yes yes yes yes yes yes yes yes yes yes yes yes  
41 42 43 44 45 46 47 48 49 50 51 52 53 54 55 56 57 58 59 60  
no yes  no  no yes yes yes  no yes yes yes  no yes yes yes  no yes yes yes yes  
61 62 63 64 65 66 67 68 69 70 71 72 73 74 75 76 77 78 79 80  
yes yes yes  no  no yes yes  no yes yes yes  no yes yes  no  no yes yes yes yes  
81 82 83 84 85 86 87 88 89 90 91 92 93 94 95 96 97 98 99 100  
yes yes  no yes  no yes yes yes yes yes  no yes  no  no  no yes yes  no yes yes  
101 102 103 104 105 106 107 108 109 110 111 112 113 114 115 116 117 118 119 120  
yes yes yes yes yes  no  no yes yes yes  no  no  no yes  no yes yes yes  no yes  
121 122 123 124 125 126 127 128 129 130 131 132 133 134 135 136 137 138 139 140  
yes yes yes yes  no yes yes yes  no yes yes  no yes yes yes yes yes yes yes yes  
141  
yes  
Levels: yes no
```

```
%%R  
  
matriz_confusion1
```

Confusion Matrix and Statistics

```
          Reference  
Prediction yes no  
   yes    80 25  
   no    22 14  
  
      Accuracy : 0.6667  
      95% CI   : (0.5824, 0.7437)  
No Information Rate : 0.7234  
P-Value [Acc > NIR] : 0.9431  
  
      Kappa    : 0.1468  
  
McNemar's Test P-Value : 0.7705  
  
      Sensitivity : 0.7843
```

```
Specificity : 0.3590
Pos Pred Value : 0.7619
Neg Pred Value : 0.3889
Prevalence : 0.7234
Detection Rate : 0.5674
Detection Prevalence : 0.7447
Balanced Accuracy : 0.5716
```

```
'Positive' Class : yes
```

Debido a la alta complejidad de estos arboles le vamos a hacer un proceso de pre poda, para ello podemos hacer uso tanto del parámetro `cp` o directamente manipulando los hiperparametros de los modelos.

Arbol podado con una profundidad maxima de 4:

```
%%R

set.seed(0)
datos_entreno2<-sample_frac(ilpd,0.75) # Separamos los datos de
↳ entrenamiento
datos_test2<-setdiff(ilpd, datos_entreno2) # Separamos los datos de test

arbol_1<-rpart(diseased~.,data=datos_entreno2, maxdepth=4, method =
↳ "class") # Cambiamos la profundidad
rpart.plot(arbol_1,
            extra = 104,          # show fitted class, probs, percentages
            box.palette = "GnBu", # color scheme
            branch.lty = 3,       # dotted branch lines
            shadow.col = "gray",  # shadows under the node boxes
            nn = TRUE)
```

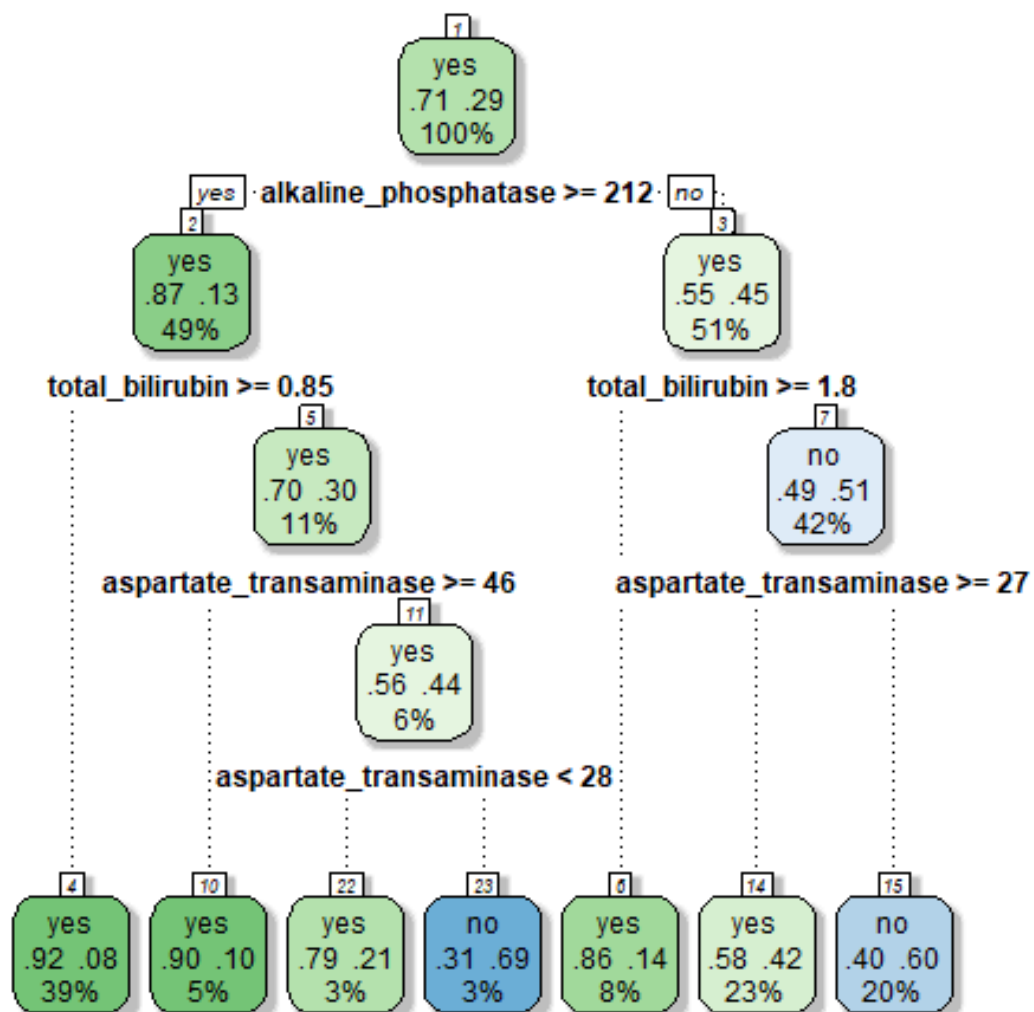


Figure 10: Arbol rpart podado en R

Con esto hemos conseguido un modelo mucho más simple que el anterior sin prepo. El cual es más fácil de interpretar.

En estos gráficos, cada uno de los rectángulos representa un nodo de nuestro árbol, con su regla de clasificación.

Cada nodo está coloreado de acuerdo a la categoría mayoritaria entre los datos que agrupa. Esta es la categoría que ha predicho el modelo para ese grupo.

Dentro del rectángulo de cada nodo se nos muestra qué proporción de casos pertenecen a cada categoría y la proporción del total de datos que han sido agrupados allí.

Estas proporciones nos dan una idea de la precisión de nuestro modelo al hacer predicciones.

Calculamos las predicciones y la matriz de confusión:

```
%%R
```

```
prediccion2 <-predict(arbol_1,newdata=datos_test2,type="class")
matriz_confusion2<-confusionMatrix(prediccion2,datos_test2[["diseased"]])
```

```
%%R
```

```
prediccion2
```

```

  1  2  3  4  5  6  7  8  9 10 11 12 13 14 15 16 17 18 19 20
no  no yes yes yes yes no yes no yes yes yes yes no no yes yes yes yes yes
21 22 23 24 25 26 27 28 29 30 31 32 33 34 35 36 37 38 39 40
yes yes yes yes no yes yes yes yes yes yes yes yes yes yes yes yes yes yes yes
41 42 43 44 45 46 47 48 49 50 51 52 53 54 55 56 57 58 59 60
no yes yes no yes yes yes no yes yes yes yes yes no yes yes yes yes yes yes
61 62 63 64 65 66 67 68 69 70 71 72 73 74 75 76 77 78 79 80
yes yes yes no no yes yes no yes yes yes yes yes yes yes yes yes yes yes yes
81 82 83 84 85 86 87 88 89 90 91 92 93 94 95 96 97 98 99 100
yes yes no yes yes yes yes yes yes yes yes yes no yes no yes yes no yes yes
101 102 103 104 105 106 107 108 109 110 111 112 113 114 115 116 117 118 119 120
yes yes yes yes yes yes no yes yes yes no no no yes no yes yes yes yes yes
121 122 123 124 125 126 127 128 129 130 131 132 133 134 135 136 137 138 139 140
yes yes yes yes yes yes yes yes no yes yes no yes yes yes yes yes yes yes
141
yes
Levels: yes no
```

```
%%R
```

```
matriz_confusion2
```

Confusion Matrix and Statistics

```
      Reference
Prediction yes no
      yes  87 29
      no   15 10

      Accuracy : 0.6879
      95% CI : (0.6045, 0.7633)
      No Information Rate : 0.7234
      P-Value [Acc > NIR] : 0.84963

      Kappa : 0.123

      Mcnemar's Test P-Value : 0.05002

      Sensitivity : 0.8529
      Specificity : 0.2564
      Pos Pred Value : 0.7500
      Neg Pred Value : 0.4000
      Prevalence : 0.7234
      Detection Rate : 0.6170
      Detection Prevalence : 0.8227
      Balanced Accuracy : 0.5547

      'Positive' Class : yes
```

Se puede ver como hemos mejorado un poco la precisión de la predicción simplemente cambiando la profundidad máxima. Cabe remarcar que el algoritmo de los CART utilizan el índice de Gini como criterio de división.

4.4.2 Algoritmo C5.0 con R

Cargamos el paquete específico del Arbol de clasificación C5.0

```
%%R  
  
# install.packages("C50",dependencies=TRUE)  
  
library(C50)
```

Realizamos la partición en datos de entrenaminento y test:

```
%%R  
  
set.seed(0)  
tamano_total<-nrow(ilpd)  
tamano_entreno<-round(tamano_total*0.75)  
datos_indices<-sample(1:tamano_total,size = tamano_entreno)  
datos_entreno<-ilpd[datos_indices,]  
datos_test<-ilpd[-datos_indices,]
```

Las siguientes proporciones deberían de ser relativamente similares para que los arboles den unos buenos resultados:

```
%%R  
  
round(table(datos_entreno$diseased)/nrow(datos_entreno), 3)
```

```
   yes    no  
0.709 0.291
```

```
%%R  
  
round(table(datos_test$diseased)/nrow(datos_test), 3)
```

```
   yes    no  
0.726 0.274
```

Ejecución del modelo de clasificación C5.0

```
%%R  
  
modeloC50 <- C5.0(diseased~.,data=datos_entreno,trials=1,rules=FALSE)
```

Información del modelo creado

```
%%R
```

```
summary(modeloC50)
```

Call:

```
C5.0.formula(formula = diseased ~ ., data = datos_entreno, trials = 1, rules  
= FALSE)
```

```
C5.0 [Release 2.07 GPL Edition]      Thu Oct 13 16:14:45 2022  
-----
```

Class specified by attribute `outcome`

Read 437 cases (11 attributes) from undefined.data

Decision tree:

```
direct_bilirubin > 0.9: yes (135/9)
direct_bilirubin <= 0.9:
: ...alanine_transaminase > 65:
:   : ...albumin <= 3.9: yes (35/1)
:   :   : albumin > 3.9:
:   :     : ...aspartate_transaminase <= 99: no (4/1)
:   :     :   : aspartate_transaminase > 99: yes (4)
:   :   : alanine_transaminase <= 65:
:   :     : ...alkaline_phosphatase > 211:
:   :     :   : ...total_bilirubin <= 0.8:
:   :     :     : : ...gender = Female:
:   :     :     :   : : ...age <= 39: yes (2)
:   :     :     :   :   : age > 39: no (5)
:   :     :     :   :   : gender = Male:
:   :     :     :     : : ...age <= 13: no (3)
:   :     :     :     :   : age > 13:
:   :     :     :       : ...albumin_globulin_ratio <= 0.55: no (2)
:   :     :     :       :   : albumin_globulin_ratio > 0.55: yes (25/4)
:   :     :   : total_bilirubin > 0.8:
:   :     :     : : ...age > 37: yes (27/1)
:   :     :     :   : age <= 37:
:   :     :       : ...total_bilirubin > 1.6: no (2)
:   :     :       :   : total_bilirubin <= 1.6:
:   :     :         : ...alanine_transaminase <= 23: no (2)
:   :     :         :   : alanine_transaminase > 23: yes (10/1)
:   :   : alkaline_phosphatase <= 211:
:   :     : ...direct_bilirubin <= 0.1:
:   :     :   : ...gender = Male: yes (21/5)
:   :     :   :   : gender = Female:
:   :     :     : : ...alkaline_phosphatase <= 168: no (4)
:   :     :     :   :   : alkaline_phosphatase > 168: yes (8/2)
:   :   : direct_bilirubin > 0.1:
:   :     : ...total_bilirubin <= 0.7:
```

```

: ...alanine_transaminase > 33:
:   : ...aspartate_transaminase > 64: yes (3)
:   :   aspartate_transaminase <= 64:
:   :     : ...aspartate_transaminase <= 41: yes (2)
:   :     :     aspartate_transaminase > 41: no (2)
:   :   alanine_transaminase <= 33:
:   :     : ...albumin_globulin_ratio > 0.9: no (19)
:   :     :     albumin_globulin_ratio <= 0.9:
:   :       : ...gender = Female:
:   :         : ...alkaline_phosphatase <= 176: yes (3/1)
:   :         :     alkaline_phosphatase > 176: no (3)
:   :       :     gender = Male:
:   :         : ...age <= 34: no (2)
:   :         :     age > 34: yes (5/1)
total_bilirubin > 0.7:
: ...gender = Female:
:   : ...alanine_transaminase > 29: no (7)
:   :   alanine_transaminase <= 29:
:   :     : ...total_bilirubin > 0.9: no (7/1)
:   :     :     total_bilirubin <= 0.9:
:   :       : ...albumin <= 4.3: yes (23/3)
:   :       :     albumin > 4.3: no (4/1)
:   :     gender = Male:
:   :       : ...aspartate_transaminase <= 25:
:   :       :     : ...albumin <= 3.9: no (18/1)
:   :       :     :     albumin > 3.9: yes (5/1)
:   :       :     aspartate_transaminase > 25:
:   :       :       : ...aspartate_transaminase > 70: no (4)
:   :       :       :     aspartate_transaminase <= 70:
:   :       :       :       : ...albumin_globulin_ratio <= 0.58: no (3)
:   :       :       :       :     albumin_globulin_ratio > 0.58: yes (38/11)

```

Evaluation on training data (437 cases):

```

      Decision Tree
-----
Size      Errors

    33    44(10.1%)    <<

(a)    (b)    <-classified as
----    ----
    306      4    (a): class yes
     40     87    (b): class no

```

Attribute usage:

```

100.00% direct_bilirubin
 69.11% alanine_transaminase
 59.27% alkaline_phosphatase

```


Calculamos las predicciones del modelo:

```
%%R

(prediccion<-predict(modeloC50, newdata = datos_test,type="class"))

[1] no  yes yes yes yes yes no  yes yes yes yes no  yes no  yes yes yes no
[19] yes yes yes yes yes yes yes yes yes yes no  yes yes yes yes yes yes
[37] yes yes yes yes yes yes yes yes yes no  yes no  no  yes yes yes no  yes
[55] yes yes yes yes yes yes yes yes yes yes yes yes yes yes yes yes yes
[73] yes yes yes yes no  yes no  no  yes yes yes yes yes yes yes yes yes
[91] yes yes yes yes yes yes yes no  yes no  yes yes no  yes yes yes yes yes
[109] yes yes yes yes yes no  yes no  yes no  yes no  yes yes no  yes yes yes
[127] yes yes yes no  yes yes yes no  yes yes no  yes yes yes yes yes yes yes
[145] yes yes
Levels: yes no
```

Calculamos la matriz de confusión:

```
%%R

(matriz_confusion<-table(predicho=prediccion, real=datos_test$diseased))

      real
predicho yes no
yes      92 30
no       14 10
```

Calculamos la tasa de acierto en la clasificación (TAC) obtenida parte del modelo, es decir el porcentaje de clasificaciones correctas.

```
%%R

100*sum(diag(matriz_confusion))/sum(matriz_confusion)
```

```
[1] 69.86301
```

TAC = 0.6986

Calculamos la tasa de error de clasificación (TEC = 1 - TAC) cometido por el modelo, que es el porcentaje de clasificaciones incorrectas

```
%%R

error_clas<-round(mean(prediccion != datos_test$diseased),3)
paste(
  "El error de clasificación es",
  "\t→ del:",100*error_clas,"%",sum(prediccion==datos_test$diseased),"clasificaciones",
  "\t→ correctas de un total de",length(prediccion)
)
```

```
[1] "El error de clasificacion es del: 30.1 %. 102 clasificaciones correctas de un total
```

TEC = 0.301

Ahora vamos a podar el arbol con la libreria C5.0

Seleccionamos la submuestra del 75% de los datos

```
%%R

set.seed(0)
tamano_total<-nrow(ilpd)
tamano_entreno<-round(tamano_total*0.75)
datos_indices<-sample(1:tamano_total,size = tamano_entreno)
datos_entreno<-ilpd[datos_indices,]
datos_test<-ilpd[-datos_indices,]
```

Las siguientes proporciones deberían de ser relativamente similares para que los arboles den unos buenos resultados:

```
%%R

round(table(datos_entreno$diseased)/nrow(datos_entreno), 3)
```

```
   yes    no
0.709 0.291
```

```
%%R

round(table(datos_test$diseased)/nrow(datos_test), 3)
```

```
   yes    no
0.726 0.274
```

Ejecución del arbol de clasificación podado con la libreria C5.0

```
%%R

modeloC50<-C5.0(diseased~.,data=datos_entreno, trials=1, rules=FALSE, control
↪ = C5.0Control(minCases = 10, earlyStopping = TRUE))
```

Información del modelo creado

```
%%R

summary(modeloC50)
```

```
Call:
C5.0.formula(formula = diseased ~ ., data = datos_entreno, trials = 1, rules
 = FALSE, control = C5.0Control(minCases = 10, earlyStopping = TRUE))
```

```
C5.0 [Release 2.07 GPL Edition]      Thu Oct 13 16:14:56 2022
-----
```

Class specified by attribute `outcome'

Read 437 cases (11 attributes) from undefined.data

Decision tree:

```
direct_bilirubin > 0.9: yes (135/9)
direct_bilirubin <= 0.9:
:...alanine_transaminase > 65: yes (43/4)
  alanine_transaminase <= 65:
:...alkaline_phosphatase > 211: yes (78/20)
    alkaline_phosphatase <= 211:
      :...direct_bilirubin <= 0.1: yes (33/11)
        direct_bilirubin > 0.1:
          :...total_bilirubin <= 0.7: no (39/11)
            total_bilirubin > 0.7:
              :...gender = Female:
                :...total_bilirubin <= 0.8: yes (20/5)
                  : total_bilirubin > 0.8: no (21/7)
                gender = Male:
                  :...aspartate_transaminase <= 25: no (23/5)
                    aspartate_transaminase > 25: yes (45/18)
```

Evaluation on training data (437 cases):

Decision Tree		

Size		Errors
9	90(20.6%)	<<
(a)	(b)	<-classified as
-----	-----	
287	23	(a): class yes
67	60	(b): class no

Attribute usage:

```
100.00% direct_bilirubin
 69.11% alanine_transaminase
 59.27% alkaline_phosphatase
 33.87% total_bilirubin
```

24.94% gender
15.56% aspartate_transaminase

Time: 0.0 secs

Gráfico del modelo:

```
%%R
```

```
plot(modeloC50)
```

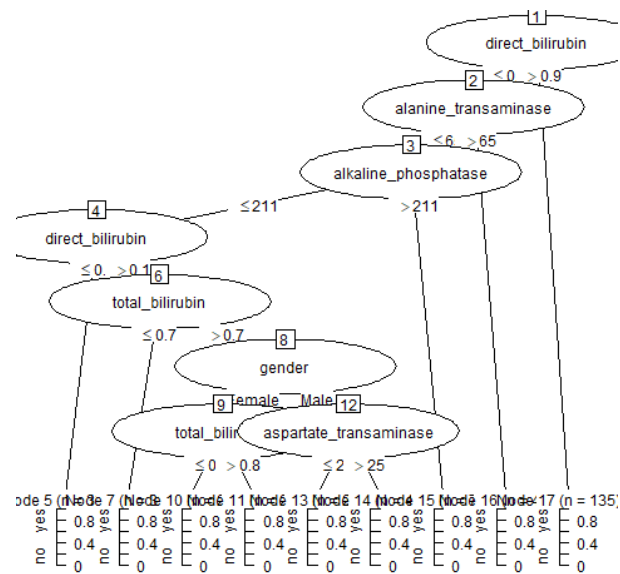


Figure 12: Arbol C5.0 podado con R

Calculamos las predicciones:

```
%%R
```

```
(prediccion<-predict(modeloC50, newdata = datos_test,type="class"))
```

```
[1] no no yes yes yes yes yes yes yes no yes yes yes yes yes yes yes yes
[19] yes yes yes yes yes yes yes yes yes yes no yes yes yes yes yes yes yes
[37] yes yes yes yes yes yes yes yes yes no yes no no yes yes yes yes yes
[55] yes yes yes yes yes yes yes yes yes no no yes no yes no no yes yes
[73] no yes yes yes yes yes no yes yes yes yes yes yes yes yes no yes no
[91] yes no yes yes yes yes yes no yes no yes yes no yes no yes yes yes
[109] yes yes yes yes yes yes yes no yes yes no no yes yes yes yes yes yes
[127] yes yes yes yes yes yes yes no yes yes no yes yes yes yes yes yes yes
[145] yes yes
Levels: yes no
```

Calculamos la matriz de confusión:

```
%%R
```

```
(matriz_confusion<-table(predicho=prediccion, real=datos_test$diseased))
```

```
      real
predicho yes no
yes      92 28
no       14 12
```

Porcentaje de clasificados correctamente:

```
%%R
```

```
100*sum(diag(matriz_confusion))/sum(matriz_confusion)
```

```
[1] 71.23288
```

TAC = 0.7123

Error de clasificación :

```
%%R

error_clas<-round(mean(prediccion != datos_test$diseased),3)
paste(
  "El error de clasificacion es
  ↪ del:",100*error_clas,"%.",sum(prediccion==datos_test$diseased),"clasificaciones
  ↪ correctas de un total de",length(prediccion)
)
```

```
[1] "El error de clasificacion es del: 28.8 %. 104 clasificaciones correctas de un total
```

TEC = 0.288

4.4.3 Algoritmo CART en R con mlr3

No es necesario preprocesar los datos para árboles (dummy y normalización).

```
%%R

# install.packages('mlr3extralearners')

library(mlr3)
library(mlr3learners)
```

```
R[write to console]:
Attaching package: 'mlr3'
```

```
R[write to console]: The following object is masked from 'package:skimr':
```

```
partition
```

Creamos la tarea de clasificación:

```
%%R

ILPD_task <- as_task_classif(ilpd , target = "diseased")
```

Partimos el data-set en parte de test y parte de train:

```
%%R  
res_desc <- rsmpl("holdout" , ratio=0.75)  
  
set.seed(0)  
  
res_desc$instantiate(ILPD_task)
```

Definimos el método de aprendizaje:

```
%%R  
  
tree_learner <- lrn("classif.rpart" , maxdepth=4)
```

Entrenamos y evaluamos el modelo:

```
%%R  
  
tree_resample<-resample(task = ILPD_task, learner =  
  ↪ tree_learner,resampling = res_desc,store_models = TRUE)
```

```
INFO [16:15:05.775] [mlr3] Applying learner 'classif.rpart' on task 'ilpd' (iter 1/1)
```

Calculamos las predicciones:

```
%%R  
  
tree_test<-tree_resample$predictions()  
tree_test[[1]]
```

<PredictionClassif> for 146 observations:

row_ids	truth	response
4	yes	no
9	no	no
11	yes	yes

575	yes	yes
577	yes	yes
583	no	yes

Calculamos la accuracy (que es la TAC):

```
%%R  
  
tree_acc <- tree_resample$aggregate(msr("classif.acc"))  
  
tree_acc
```

```
classif.acc  
0.6917808
```

Visualizamos el modelo:

Primero obtendremos la expresion en texto del modelo, luego su gráfico.

```
%%R  
  
tree_learner<-tree_resample$learners[[1]]  
tree_learner$model
```

```
n= 437
```

```
node), split, n, loss, yval, (yprob)  
* denotes terminal node
```

```
1) root 437 127 yes (0.70938215 0.29061785)  
 2) alkaline_phosphatase>=211.5 216 28 yes (0.87037037 0.12962963)  
   4) total_bilirubin>=0.85 169 14 yes (0.91715976 0.08284024) *  
   5) total_bilirubin< 0.85 47 14 yes (0.70212766 0.29787234)  
      10) aspartate_transaminase>=45.5 20 2 yes (0.90000000 0.10000000) *  
      11) aspartate_transaminase< 45.5 27 12 yes (0.55555556 0.44444444)  
          22) aspartate_transaminase< 27.5 14 3 yes (0.78571429 0.21428571) *  
          23) aspartate_transaminase>=27.5 13 4 no (0.30769231 0.69230769) *  
3) alkaline_phosphatase< 211.5 221 99 yes (0.55203620 0.44796380)  
  6) total_bilirubin>=1.75 36 5 yes (0.86111111 0.13888889) *  
  7) total_bilirubin< 1.75 185 91 no (0.49189189 0.50810811)  
     14) aspartate_transaminase>=26.5 99 42 yes (0.57575758 0.42424242) *  
     15) aspartate_transaminase< 26.5 86 34 no (0.39534884 0.60465116) *
```

```
%%R
```

```
rpart.plot(tree_learner$model)
```

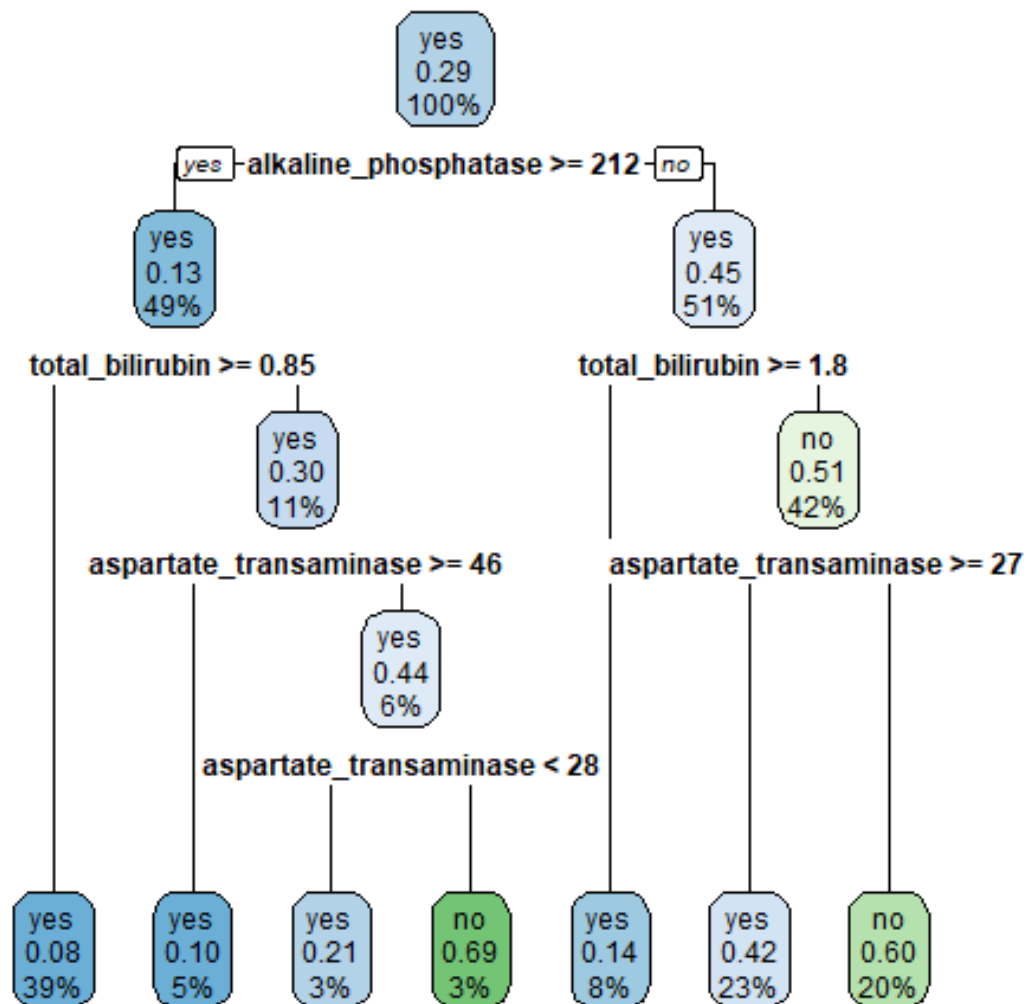


Figure 13: Arbol rpart podado con mlr3

4.4.4 Algoritmo C5.0 en R con mlr3

```
%%R  
  
library(mlr3)  
library(mlr3learners)  
library(mlr3extralearners)
```

Cambiamos el tipo de los datos a numerico porque si no el algoritmo no funciona.

```
%%R  
  
ilpd$age<-as.numeric(ilpd$age)  
ilpd$alkaline_phosphatase<-as.numeric(ilpd$alkaline_phosphatase)  
ilpd$alanine_transaminase<-as.numeric(ilpd$alanine_transaminase)  
ilpd$aspartate_transaminase<-as.numeric(ilpd$aspartate_transaminase)
```

Creamos la tarea de clasificación:

```
%%R  
  
ILPD_task<-as_task_classif(ilpd,target = "diseased")
```

Definimos el método de evaluación:

```
%%R  
  
res_desc<-rsmp("holdout",ratio=0.75)  
set.seed(0)  
res_desc$instantiate(ILPD_task)
```

Definimos el método de aprendizaje:

```
%%R  
  
tree_learner<-lrn("classif.C50")
```

Entrenamos y evaluamos el modelo:

```
%%R  
  
tree_resample<-resample(task = ILPD_task, learner = tree_learner,  
  ↪ resampling = res_desc, store_models = TRUE)
```

```
INFO [16:15:13.538] [mlr3] Applying learner 'classif.C50' on task 'ilpd' (iter 1/1)
```

Obtenemos la predicciones del modelo:

```
%%R
```

```
tree_test<-tree_resample$predictions()  
tree_test[[1]]
```

<PredictionClassif> for 146 observations:

row_ids	truth	response
4	yes	no
9	no	yes
11	yes	yes

575	yes	yes
577	yes	yes
583	no	yes

Calculamos la accuracy (TAC) del modelo:

```
%%R
```

```
tree_acc<-tree_resample$aggregate(msr("classif.acc"))  
  
tree_acc
```

```
classif.acc  
0.6986301
```

TAC = 0.6986

Visualizamos el modelo :

```
%%R
```

```
tree_learner<-tree_resample$learners[[1]]  
tree_learner$model
```

Call:

```
C50::C5.0.formula(formula = f, data = data, control = ctrl)
```

Classification Tree

Number of samples: 437

Number of predictors: 10

Tree size: 35

Non-standard options: attempt to group attributes

Como vemos no da plena información sobre la estructura del modelo.

Ahora hemos intentado graficar el modelo, pero nos sale un error.

```
%%R
```

```
# plot(tree_learner$model)
```

4.4.5 Comparación entre R y mlr3

Algoritmo RPART con Rpart (R) Inicializamos la semilla y dividimos el data frame en datos de muestra de entrenamiento y muestra de test con funciones de dplyr. Después creamos el modelo con rpart y le metemos la variable respuesta, el data frame de entrenamiento, el método y el coeficiente de partición que nos poda el árbol. Posteriormente, sacamos las predicciones a partir del modelo, el data frame de test y el type. Por último, lo que hacemos es sacar la matriz de confusiones, que nos da una medida de cómo de bueno es nuestro modelo. Más concretamente, en este problema, nos interesa la accuracy.

Aunque no se pide, para poder podar los árboles en este caso, lo que se puede hacer es ajustar los hiperparámetros como pueden ser la profundidad máxima. Y en este tipo de árboles se utiliza GINI como criterio de división.

Algoritmo C5.0 con C5.0 (R) Lo primero que hacemos es crear la semilla y dividir el data frame en datos de entrenamiento y datos de test. Hecho esto, hacemos el modelo con C5.0 y le metemos la variable respuesta, el data frame de entrenamiento, si queremos que nos saque las reglas y el número de intentos (este es un argumento que nos es útil en un proceso de boosting). Para ver la información del modelo creado lo que hacemos es uso de la función summary y lo graficamos con plot. Por último, lo que hacemos es como en el caso anterior sacar las predicciones con predict y la matriz de confusiones, en este caso la hemos sacado con table, que no te saca como en el caso anterior otros estadísticos a parte de la accuracy como puede ser Kappa. En este caso, no es así y para sacar la accuracy, tenemos que calcularla a mano.

Para podar, este tipo de árboles lo que se puede hacer es usar control dentro de la función que crea el modelo, en nuestro caso hemos puesto un mínimo de casos y una parada rápida. La diferencia principal entre los algoritmos es que el C5.0 utiliza la entropía como criterio de división.

Algoritmo RPART con Mlr3 Lo primero que hacemos es crear una tarea de clasificación, donde tenemos los datos y el problema a resolver. Después le metemos el método de evaluación, en este caso holdout al 75% y dividimos los datos en test y entrenamiento. Posteriormente, definimos el método de aprendizaje con un learner donde se contiene el método a utilizar. Lo entrenamos y evaluamos con resample y los distintos objetos que hemos creado en pasos anteriores. Para sacar las predicciones, la accuracy y visualizar el modelo, lo que debemos hacer es llamar a los elementos del modelo pertinentes, y no como en R que debemos calcularlos a mano.

Algoritmo C5.0 con Mlr3 Lo primero que hacemos es cambiar las variables que son enteras a numéricas. Después, de la misma forma que para rpart creamos la tarea donde metemos los datos y le indicamos la variable respuesta. Definimos el método de evaluación, que como en el anterior usamos un holdout al 75% y dividimos los datos en entrenamiento y test. Posteriormente, definimos el método de aprendizaje con un learner y en este caso es “classif.c50”. A partir de aquí, procedemos de la misma forma que en el caso anterior con las predicciones, accuracy y visualización del modelo.

A modo de resumen, con R es bastante intuitivo el proceso, pero tiene el problema de que cuando quieres sistematizar el análisis, ya que este tipo de árboles dependen mucho de como sea la partición en muestra entrenamiento y muestra test, es realmente complicado. También podemos ver como el ajuste de hiperparámetros o la poda de los árboles es bastante manual, por lo que esto no es demasiado eficiente.

En general, en mlr3 está todo el proceso mucho más optimizado y de forma más automática. Además el preproceso o el ajuste de hiperparámetros es mucho más fácil que con R. Podemos decir que mlr3 es una familia de paquetes que forman un ecosistema muy avanzado para algoritmos de machine learning, aun así es algo complicado acostumbrarnos

a la sintaxis del paquete y a su filosofía. Después de haber trabajado un tiempo con este grupo de paquetes, está claro que es mucho mejor que hacerlo con R y algunas librerías sueltas.

A modo de resumen, en R puedes hacer problemas básicos, pero a la hora de hacer un proceso completo, lo idóneo es usar la librería `mlr3` a pesar de que la curva de aprendizaje y aclimatación al paquete por su filosofía y sintaxis pueda parecer algo complicada al principio. Todo ello sin decir que con `mlr3` todos los algoritmos se programan de una forma similar, ahorrando líneas de código con respecto a hacerlo con `rpart` y `C5.0`.

En ninguno de los casos, hace falta un preproceso de los datos.

4.4.6 Comparación de resultados

Rpart con R

Sin podar:

5 predicciones primeras: NO NO YES YES YES

Accuracy modelo: 0.6667

Primeros índices: 1 2 3 5 6

Podado:

5 predicciones primeras: NO NO YES YES YES

Accuracy modelo: 0.6879

Primeros índices: 1 2 3 5 6

C5.0 con R

Sin podar:

5 predicciones primeras: NO YES YES YES YES

Accuracy modelo: 0.6986

Primeros índices: 1 2 3 5 6

Podado:

5 predicciones primeras: NO NO YES YES YES

Accuracy modelo: 0.7123

Primeros índices: 1 2 3 5 6

Rpart con Mlr3

5 predicciones primeras: NO NO YES YES YES

Accuracy modelo: 0.6917

Primeros índices: 4 9 11 12 13

C5.0 con Mlr3

5 predicciones primeras: NO YES YES YES YES

Accuracy modelo: 0.6986

Primeros índices: 4 9 11 12 13

Se puede ver como dan cosas distintas con R y Mlr3 aunque la diferencia es mínima. También vemos diferencias entre algoritmos ya que parece que dan una mayor precisión los algoritmos c5.0 además de una mayor eficiencia computacional. En cuanto a los índices, podemos ver como Mlr3 coge distintos de los que toma R. También tenemos que remarcar que la semilla es la misma en todos los casos.

4.5 Árboles de clasificación en Python

4.5.1 Árboles de clasificación: *teoría*

Vamos a considerar el siguiente tipo de árboles (matemáticos):

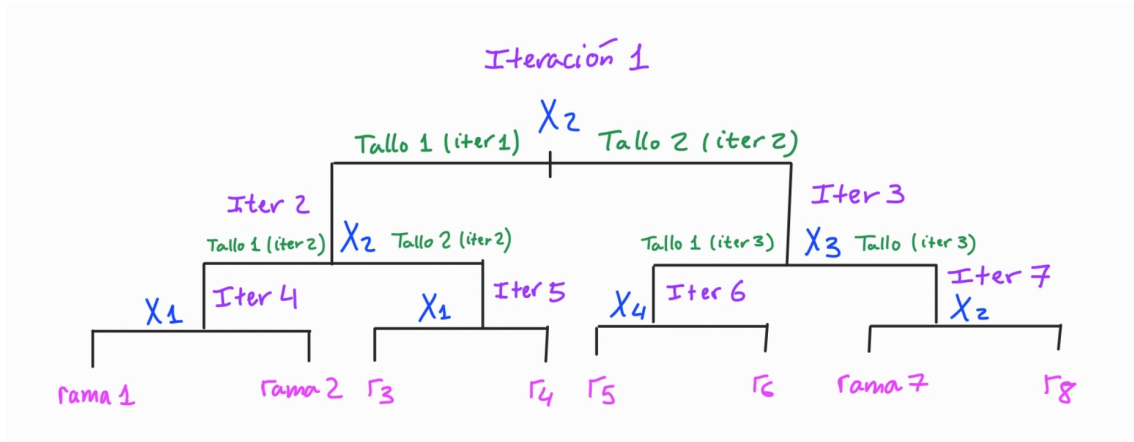


Figure 14: Arbol matemático

Es importante tener en cuenta los elementos que están reflejados, pues los usaremos posteriormente.

Los árboles están compuestos de iteraciones, que a su vez cada una de ellas se dividen en dos tallos. La unión de tallos de distintas iteraciones da lugar a las ramas del árbol.

Definición formal de los árboles de clasificación

La idea de los algoritmos de árboles de clasificación es segmentar las observaciones de los predictores X_1, \dots, X_p para predecir el valor de la respuesta Y en base a esa información segmentada. Es algo así como predecir Y por grupos/segmentos.

Elementos Básicos

- Tenemos unos predictores X_1, \dots, X_p y una variable respuesta **categorica** Y
- Tenemos un árbol T de la forma del expuesto en la imagen con $m - 1$ iteraciones y m ramas.
- r_h es la rama h -ésima del árbol
- Cada iteración del árbol tiene asociado uno de los predictores X_1, \dots, X_n
- Cada iteración del árbol tiene dos tallos (tallo 1 (izquierdo) y tallo 2 (derecho)).
- En cada tallo de una iteración se define un intervalo.
- I_{lt} es el intervalo asociado al tallo l de la iteración t
- Para simplificar el problema consideraremos $I_{1t} = (-\infty, s_t)$ y $I_{2t} = [s_t, \infty]$ donde s_t es llamado punto de corte de la iteración t del árbol
- R_h es la región (rectángulo n -dimensional) definida por la rama h del árbol

Criterio de prediccion de la variable respuesta

Dada una nueva observacion $x_{new} = (x_{new,1}, x_{new,2}, \dots, x_{new,p})$ la idea es predecir y_{new} como sigue:

Sea f_{r,R_h} la frecuencia relativa de la clase/grupo r en la rama h -esima del arbol.

Es decir, es la proporcion de individuos de la muestra de entrenamiento que caen en la rama h del arbol y que pertenecen a la clase r (es decir, para los que $Y = r$) :

$$f_{r,R_h} = \frac{\# \{i / x_i \in R_h \text{ y } y_i = r\}}{\# \{i / x_i \in R_h\}}$$

Donde: $r \in \text{Rango}(Y) = \{0, 1, \dots, c-1\}$

- Si $x_{new} \in R_h \Rightarrow x_{new}$ es clasificado en la clase/grupo mayoritaria (más frecuente) en la rama h (r_h)

Por tanto:

- Si $r_{R_h}^* = \arg \max_r (f_{r,R_h})$, entonces :

$$\text{Si } x_{new} \in R_h \Rightarrow \hat{y}_{new} = r_{R_h}^*$$

Observación:

Definida la region R_h , es relativamente sencillo resolver el problema $\max_r (f_{r,R_h})$ y asi obtener $r_{R_h}^*$

Objetivo : Usando la **tasa de error de clasificacion** como métrica a optimizar

Definimos el **error de entrenamiento de la rama h de un arbol de clasificacion** como la tasa de error de clasificacion para las observaciones de entrenamiento que caen en la rama h de dicho arbol, es decir, como:

$$TEC(R_h) = 1 - f_{r_{R_h}^*, R_h}$$

Observación:

$f_{r_{R_h}^*, R_h}$ es la proporcion de individuos de la muestra de entrenamiento que caen en la rama h del arbol y que son de la clase/grupo $r_{R_h}^*$ (el valor de la variable respuesta para ellos es $r_{R_h}^*$)

Como el modelo clasifica a los que caen en esa rama como de la clase $r_{R_h}^*$, es decir, como la predicción de la respuesta para todo individuo que pertenezca a esa rama es $r_{R_h}^*$, por parte del modelo, entonces se tiene lo siguiente:

$f_{r_{R_h}^*, R_h}$ es la proporcion de individuos de la muestra de entrenamiento que caen en la rama h del arbol que son correctamente clasificados por el modelo (proporcion de individuos de la region R_h a los que se les ha predicho bien la respuesta).

$TEC(R_h)$ es la proporcion de individuos de la muestra de entrenamiento que caen en la rama h del arbol (sus observaciones de los predictores pertenecen a R_h) y que han sido clasificados erroneamente. Se les ha clasificado en la clase $r_{R_h}^*$ y su clase era otra diferente, es decir, tenian un valor distinto a $r_{R_h}^*$ para la variable respuesta, que es el valor que el modelo les predice para la respuesta.

Definimos el **error global de entrenamiento de un arbol de clasificación** como la suma de los errores de entrenamiento de las ramas del arbol de clasificación:

$$\sum_{h=1}^m TEC(R_h)$$

El **objetivo** es construir un arbol de regresion con m ramas tal que **minimice el error global de entrenamiento**.

Es decir, formalmente el objetivo es:

$$\underset{R_1, \dots, R_m}{Min} \sum_{h=1}^m TEC(R_h)$$

Pero para escoger las regiones R_1, \dots, R_m que definen las ramas del arbol hay que determinar dos elementos que definen a su vez a las regiones:

1. Qué predictores estan asociados a cada iteracion del arbol \Rightarrow Para cada iteracion escoger X_j (es decir, escoger j)
2. Qué intervalos estan asociados a cada uno de los dos tallos de cada interaccion \Rightarrow Para cada iteracion i escoger I_{1i} y I_{2i} (es decir, escoger el punto de corte s_i)

Por tanto el problema a resolver se puede reformular como:

Para cada iteracion i escoger X_j (es decir j) y s_i tal que se acaben formando un arbol cuyas ramas definan unas regiones R_1, \dots, R_m que **minimicen** $\sum_{h=1}^m TEC(R_h)$

Objetivo : Usando el **índice de Gini** como métrica a optimizar

Definimos el **error de entrenamiento de la rama h de un arbol de clasificacion con t iteraciones** como el índice de Gini de la respuesta en la rama h del arbol (índice de gini de la respuesta en la region R_h) , es decir, como:

$$G_{R_{ht}} = \sum_{r=0,1,\dots,c-1} f_{r,R_h} \cdot (1 - f_{r,R_h})$$

Donde: $Rango(Y) = \{0, 1, \dots, c - 1\}$

G_{R_h} toma valores pequeños cuando la frecuencia de una clase $r = 0, 1, \dots$ en la region R_h es alta , y por tanto la del resto baja.

G_{R_h} toma valores altos cuando las frecuencias de las clases se reparten de manera “igualitaria” en la region R_h . Y cuanto mas igualitaria es la reparticion de las classes, mas alto es G_{R_h} . Hasta el punto que cuando la reparticion es totalmente igualitaria, esto es, cada clase tiene la misma frecuencia , si hay c clases, cada una tiene una frecuencia relativa de $1/c$ en la region, entonces en indice de Gini alcanza su maximo valor.

Ejemplo:

Para $c = 3$ ($Rango(Y) = \{0, 1, 2\}$)

Si tenemos: $f_{0,R_{ht}} = 0.40$, $f_{1,R_{ht}} = 0.30$ y $f_{2,R_{ht}} = 0.30 \Rightarrow G_{R_{ht}} = 0.66$

Si tenemos: $f_{0,R_{ht}} = 0.80$, $f_{1,R_{ht}} = 0.10$ y $f_{2,R_{ht}} = 0.10 \Rightarrow G_{R_{ht}} = 0.34$

Si tenemos: $f_{0,R_{ht}} = 0.9$, $f_{1,R_{ht}} = 0.05$ y $f_{2,R_{ht}} = 0.05 \Rightarrow G_{R_{ht}} = 0.185$

Teniendo esto en cuenta nos interesan que en cada rama (region R_h) la frecuencia de la clase mayoritaria sea lo mayor posible, y eso equivale a que el índice de Gini sea lo menos posible dentro de cada rama, siguiendo la filosofia empleada con la *TEC*, donde nos interesaba que $f_{r_{R_h}^*, R_h}$ fuese lo mayor posible en cada rama.

Definimos el **error global de entrenamiento de un arbol de clasificación** como la suma de los errores de entrenamiento de las ramas del arbol de clasificación:

$$\sum_{h=1}^m G_{R_h}$$

El **objetivo** es construir un arbol de regresion con m ramas tal que **minimice el error global de entrenamiento**.

Es decir, formalmente el objetivo es:

$$\underset{R_1, \dots, R_m}{Min} \sum_{h=1}^m G_{R_h}$$

En el fondo minimizar el error de clasificacion de un arbol de clasificacion equivale a minimizar el indice de Gini en las ramas del arbol conjuntamente (a nivel global).

Pero para escoger las regiones R_1, \dots, R_m que definen las ramas del arbol hay que determinar dos elementos que definen a su vez a las regiones:

1. Qué predictores estan asociados a cada iteracion del arbol \Rightarrow Para cada iteracion i escoger X_j (es decir, escoger j)
2. Qué intervalos estan asociados a cada uno de los dos tallos de cada interaccion \Rightarrow Para cada iteracion i escoger el punto de corte s_i)

Por tanto el porblema a resolver se puede reformular como:

Para cada iteracion i escoger X_j (es decir j) y s_i tal que se acaben formando un arbol cuyas ramas definan unas regiones R_1, \dots, R_m que **minimicen** $\sum_{h=1}^m G_{R_h}$

Propuesta de algoritmo para la resolución del problema: algoritmo de partición binaria

Consiste en ir generando el árbol de manera secuencial, iteración a iteración, minimizando en cada paso el error de clasificación para las observaciones de train que caen en las ramas asociadas a la iteración en cuestión que está siendo optimizada.

El algoritmo se basa en la resolución secuencial de problemas de minimización, uno por cada iteración tenga el árbol que se acabará generando.

Para entender el funcionamiento del algoritmo es recomendable tener en mente un árbol como este:

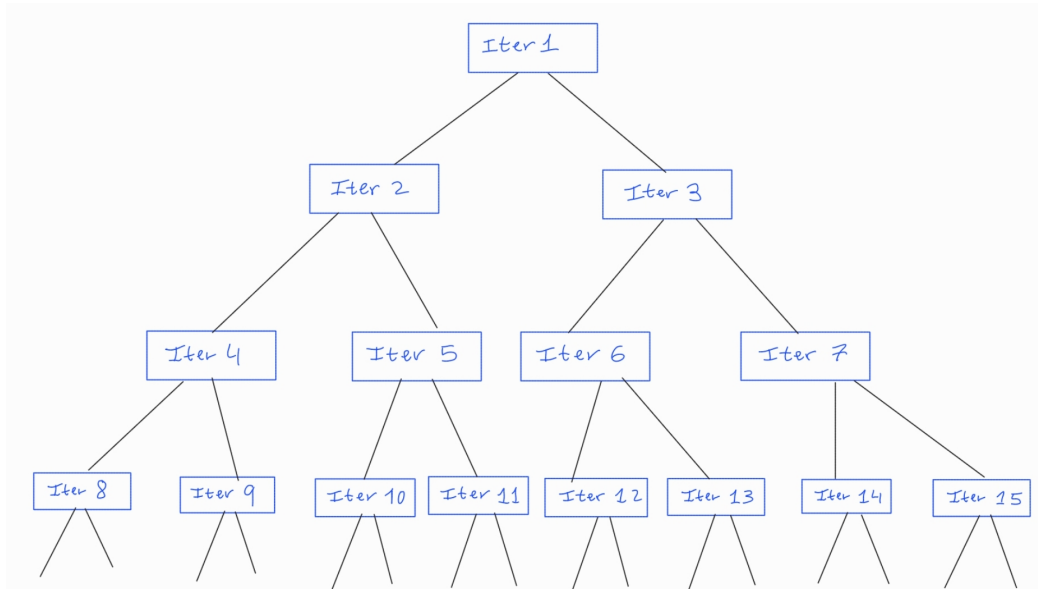


Figure 15: Arbol genérico

Problema de la Iteración 1

Arbol en el problema de la Iteración 1:

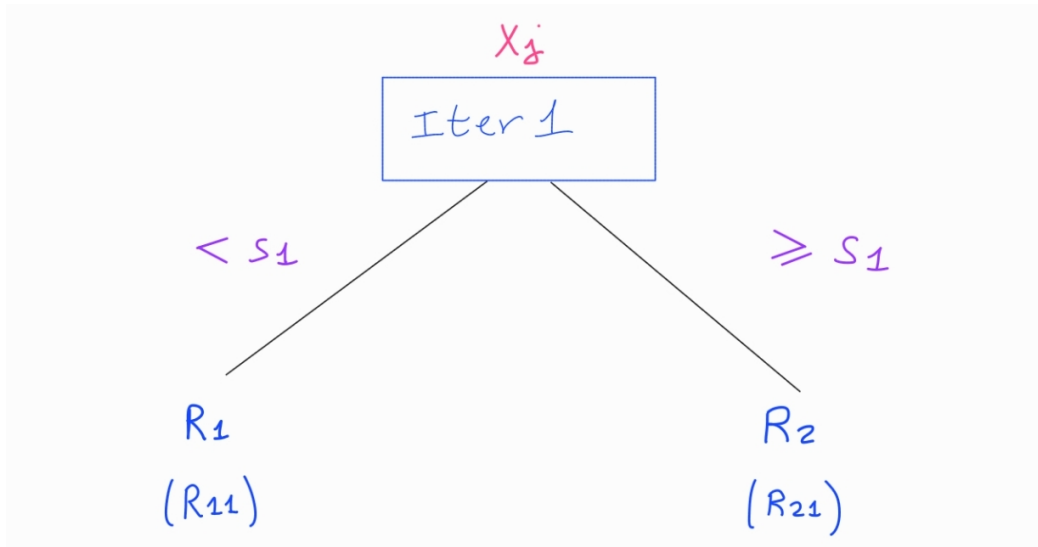


Figure 16: Arbol en el problema de la Iteración 1

La idea es, determinar las regiones R_{11} y R_{21} (es decir, j y s_1) del arbol de la figura 16 que minimizan el error de entrenamiento global de dicho arbol.

Formalmente:

- Si utilizamos la **TEC** como metrica de error a minimizar:

$$\begin{aligned}
 & \underset{R_{11}, R_{21}}{Min} \left(TEC(R_{11}) + TEC(R_{21}) \right) = \\
 & = \underset{R_{11}, R_{21}}{Min} \left(\left(1 - f_{r_{R_{11}}^*, R_{11}} \right) + \left(1 - f_{r_{R_{21}}^*, R_{21}} \right) \right) \\
 & = \underset{R_{11}, R_{21}}{Min} \left(1 - \frac{\# \{i / x_i \in R_{11} \text{ y } y_i = r_{R_{11}}^*\}}{\# \{i / x_i \in R_{11}\}} + 1 - \frac{\# \{i / x_i \in R_{21} \text{ y } y_i = r_{R_{21}}^*\}}{\# \{i / x_i \in R_{21}\}} \right) \\
 & = \underset{j, s_1}{Min} \left(1 - \frac{\# \{i / x_i < s_1 \text{ y } y_i = r_{R_{11}}^*\}}{\# \{i / x_i < s_1\}} + 1 - \frac{\# \{i / x_i \geq s_1 \text{ y } y_i = r_{R_{21}}^*\}}{\# \{i / x_i \geq s_1\}} \right)
 \end{aligned}$$

- Si utilizamos el **índice de Gini** como metrica de error a minimizar:

$$\begin{aligned}
& \underset{R_{11}, R_{21}}{Min} \left(G_1 = G_{R_{11}} + G_{R_{21}} \right) = \\
& = \underset{R_{11}, R_{21}}{Min} \left\{ \sum_{r=0,1,\dots,c-1} f_{r,R_{11}} \cdot (1 - f_{r,R_{11}}) + \sum_{r=0,1,\dots,c-1} f_{r,R_{21}} \cdot (1 - f_{r,R_{21}}) \right\} \\
& = \underset{R_{11}, R_{21}}{Min} \left\{ \sum_{r=0,1,\dots,c-1} \frac{\# \{i / x_i \in R_{11} \text{ y } y_i = r\}}{\# \{i / x_i \in R_{11}\}} \cdot \left(1 - \frac{\# \{i / x_i \in R_{11} \text{ y } y_i = r\}}{\# \{i / x_i \in R_{11}\}} \right) \right. \\
& \quad \left. + \sum_{r=0,1,\dots,c-1} \frac{\# \{i / x_i \in R_{21} \text{ y } y_i = r\}}{\# \{i / x_i \in R_{21}\}} \cdot \left(1 - \frac{\# \{i / x_i \in R_{21} \text{ y } y_i = r\}}{\# \{i / x_i \in R_{21}\}} \right) \right\} \\
& = \underset{j, s_1}{Min} \left\{ \sum_{r=0,1,\dots,c-1} \frac{\# \{i / x_{ij} < s_1 \text{ y } y_i = r\}}{\# \{i / x_{ij} < s_1\}} \cdot \left(1 - \frac{\# \{i / x_{ij} < s_1 \text{ y } y_i = r\}}{\# \{i / x_{ij} < s_1\}} \right) \right. \\
& \quad \left. + \sum_{r=0,1,\dots,c-1} \frac{\# \{i / x_{ij} \geq s_1 \text{ y } y_i = r\}}{\# \{i / x_{ij} \geq s_1\}} \cdot \left(1 - \frac{\# \{i / x_{ij} \geq s_1 \text{ y } y_i = r\}}{\# \{i / x_{ij} \geq s_1\}} \right) \right\}
\end{aligned}$$

- Denotaremos por $(j^{*(i)}, s^{*(i)})$ a una solución del problema de la Iteración i
- Criterio de parada: *hiperparámetro* k

Si $\#\{i = 1, \dots, n / x_i \in R_{11}^*\} < k \Rightarrow$ No se resuelve el problema de la Iteración 2 (ni por tanto los de aquellas que nazcan bajo la Iteración 2: Iteraciones 4, 5, 8, 9, 10, 11 etc)

Si $\#\{i = 1, \dots, n / x_i \in R_{11}^*\} \geq k \Rightarrow$ Si se resuelve el problema de la Iteración 2 (lo cual no implica que se vayan a resolver los problemas de otras Iteraciones).

Si $\#\{i = 1, \dots, n / x_i \in R_{21}^*\} < k \Rightarrow$ No se resuelve el problema de la Iteración 3 (ni por tanto los de aquellas que nazcan bajo la Iteración 3: Iteraciones 6, 7, 12, 13, 14, 15 etc)

Si $\#\{i = 1, \dots, n / x_i \in R_{21}^*\} \geq k \Rightarrow$ Si se resuelve el problema de la Iteración 3 (lo cual no implica que se vayan a resolver los problemas de otras Iteraciones).

La idea es que si caen menos de k observaciones de entrenamiento en la “nueva” rama optimizada R_{11}^* , entonces el algoritmo no debe partir el nodo Iteración 2, es decir, no se debe resolver el problema de la Iteración 2, y por tanto no se deben ni tan siquiera generar los nodos que nacen bajo el nodo Iteración 2 (a saber, los nodos Iteraciones 4, 5, 8, 9, 10, 11 etc). El razonamiento es analogo para el criterio de parada con R_{21}^*

Arbol tras la resolución del problema de la Iteración 1:

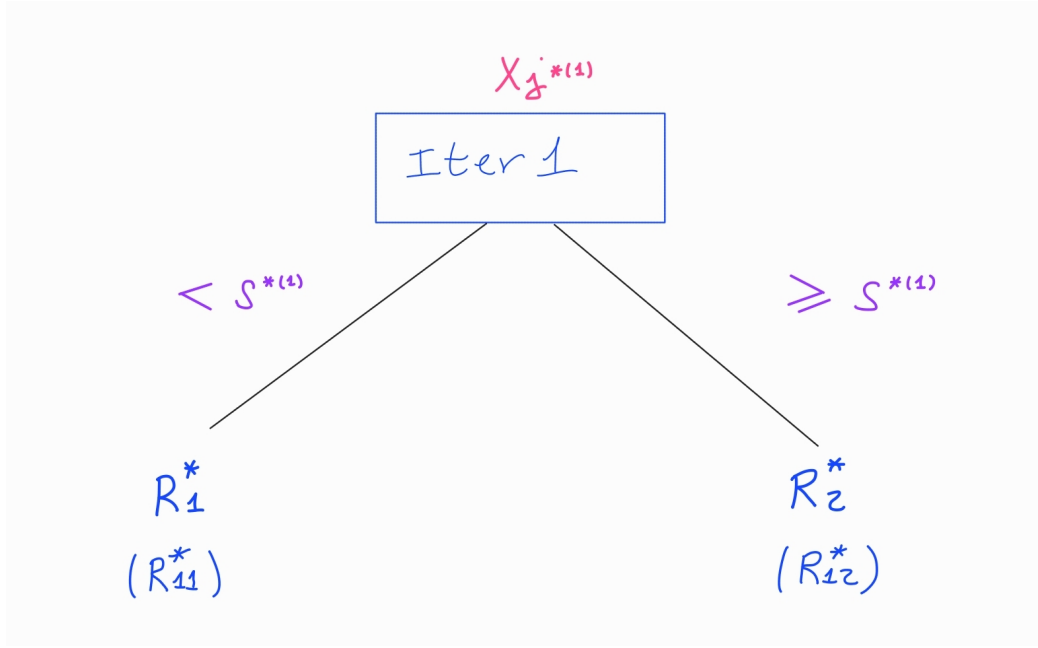


Figure 17: Arbol tras la resolución del problema de la Iteración 1

Observaciones relevantes del problema :

- $j \in \{1, 2, \dots, p\}$
- Si X_j es cuantitativa:

Ordenamos las observaciones de X_j y quitamos repeticiones, obtenemos X_j^{order} , entonces:

$$s_1 \in \left\{ \frac{x_{(1)j} + x_{(2)j}}{2}, \frac{x_{(2)j} + x_{(3)j}}{2}, \dots, \frac{x_{(n-1)j} + x_{(n)j}}{2} \right\}$$

Donde $x_{(i)j}$ es la observacion que ocupa la posicion i -esima en X_j^{order}

- Si X_j es categorica con c categorias:

$$s_1 \in Rango(X_j) = \{0, 1, \dots, c - 1\}$$

Notese que la eleccion de X_j determina el campo de variacion de s_1

Notar que:

- $R_{11} = \{(v_1, \dots, v_p)/v_j < s_1\} \Rightarrow [x_i = (x_{i1}, \dots, x_{ip}) \in R_{11} \Leftrightarrow x_{ij} < s_1]$
 $\Rightarrow \{i/x_i \in R_{11}\} = \{i/x_{ij} < s_1\}$

- $R_{21} = \{(v_1, \dots, v_p)/v_j \geq s_1\} \Rightarrow [x_i = (x_{i1}, \dots, x_{ip}) \in R_{21} \Leftrightarrow x_{ij} \geq s_1]$
 $\Rightarrow \{i/x_i \in R_{11}\} = \{i/x_{ij} \geq s_1\}$

Notese que determinar R_{11} y R_{21} es equivalente a determinar el predictor X_j (es decir j) y el punto de corte s_1 asociados a la Iteracion 1, ya que R_{11} y R_{21} quedan determinadas al fijar X_j y s_1

Notar también que:

- Fijado (j, s_1) puede calcularse $r_{R_{11}}^*$ como solucion al problema de maximizacion:

$$Max_r (f_{r,R_{11}}) = Max_r \left(\frac{\# \{i / x_i \in R_{11} \text{ y } y_i = r\}}{\# \{i / x_i \in R_{11}\}} \right) = Max_r \left(\frac{\# \{i / x_{ij} < s_1 \text{ y } y_i = r\}}{\# \{i / x_{ij} < s_1\}} \right)$$

- Fijado (j, s_2) puede calcularse $r_{R_{21}}^*$ como solucion al problema de maximizacion:

$$Max_r (f_{r,R_{21}}) = Max_r \left(\frac{\# \{i / x_i \in R_{21} \text{ y } y_i = r\}}{\# \{i / x_i \in R_{21}\}} \right) = Max_r \left(\frac{\# \{i / x_{ij} \geq s_1 \text{ y } y_i = r\}}{\# \{i / x_{ij} \geq s_1\}} \right)$$

Estos elementos no volveran a ser definidos ni comentados en los sucesivos problemas de iteracion para no pecar de ser repetitivos, puesto que pueden ser facilmente extrapolados a cualquier problema de iteración. Ademas las definiciones generales de estos elementos han sido expuestas ya anteriormente.

Problema de la Iteración 2

Si estamos en este problema es porque la rama R_{11}^* del arbol resultante del problema de la Iteracion 1 tiene k o más observaciones de entrenamiento.

Arbol en el problema de la Iteracion 2:

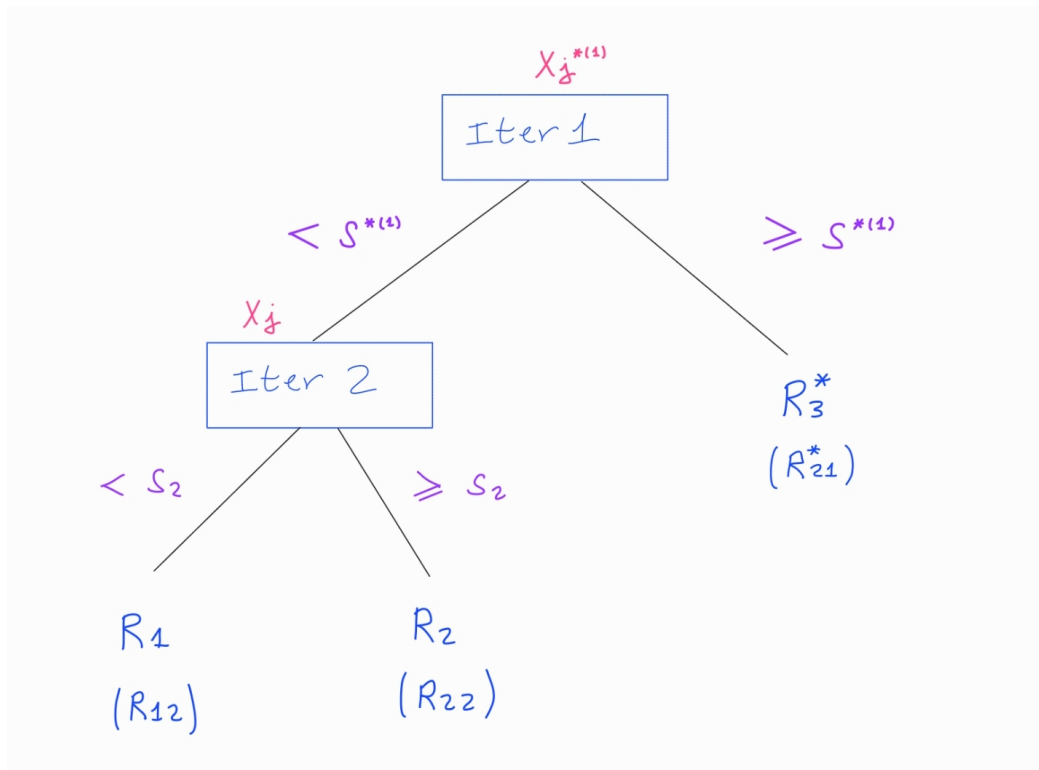


Figure 18: Arbol tras la resolución del problema de la Iteración 1

La idea ahora es determinar las regiones $R_1 = R_{12}$, $R_2 = R_{22}$ y $R_3 = R_{21}^*$ del arbol de la figura 18, (es decir, ya considerando la solución del problema de la Iteración 1), que minimizan el error de entrenamiento global de dicho arbol.

Notese que $R_3 = R_{21}^*$ ya esta determinada tras la resolución del problema anterior, por ello solo hay que determinar las regiones R_{12} y R_{22} óptimas (es decir, j y s_2 óptimos)

Mas formalmente el problema planteado es:

- Si utilizamos la **TEC** como metrica de error a minimizar:

$$\begin{aligned}
& \underset{R_{12}, R_{22}, R_{21}^*}{Min} \left\{ TEC(R_{12}) + TEC(R_{22}) + TEC(R_{21}^*) \right\} = \\
& = \underset{R_{12}, R_{22}, R_{21}^*}{Min} \left\{ \left(1 - f_{r_{R_{12}}^*, R_{12}} \right) + \left(1 - f_{r_{R_{22}}^*, R_{22}} \right) + \left(1 - f_{r_{R_{21}}^*, R_{21}^*} \right) \right\} \\
& = \underset{j, s_2}{Min} \left\{ 1 - \frac{\# \{i / x_i \in R_{12} \text{ y } y_i = r_{R_{12}}^*\}}{\# \{i / x_i \in R_{12}\}} + 1 - \frac{\# \{i / x_i \in R_{22} \text{ y } y_i = r_{R_{22}}^*\}}{\# \{i / x_i \in R_{22}\}} + \right. \\
& \quad \left. + 1 - \frac{\# \{i / x_i \in R_{21}^* \text{ y } y_i = r_{R_{21}}^*\}}{\# \{i / x_i \in R_{21}^*\}} \right\} \\
& = \underset{j, s_2}{Min} \left\{ 1 - \frac{\# \{i / x_{ij^{*(1)}} < s^{*(1)} \text{ y } x_{ij} < s_2 \text{ y } y_i = r_{R_{12}}^*\}}{\# \{i / x_{ij^{*(1)}} < s^{*(1)} \text{ y } x_{ij} < s_2\}} + \right. \\
& \quad 1 - \frac{\# \{i / x_{ij^{*(1)}} < s^{*(1)} \text{ y } x_{ij} \geq s_2 \text{ y } y_i = r_{R_{22}}^*\}}{\# \{i / x_{ij^{*(1)}} < s^{*(1)} \text{ y } x_{ij} \geq s_2\}} + \\
& \quad \left. 1 - \frac{\# \{i / x_{ij^{*(1)}} \geq s^{*(1)} \text{ y } y_i = r_{R_{32}}^*\}}{\# \{i / x_{ij^{*(1)}} \geq s^{*(1)}\}} \right\} \\
& = \underset{j, s_2}{Min} \left\{ 1 - \frac{\# \{i / x_{ij^{*(1)}} < s^{*(1)} \text{ y } x_{ij} < s_2 \text{ y } y_i = r_{R_{12}}^*\}}{\# \{i / x_{ij^{*(1)}} < s^{*(1)} \text{ y } x_{ij} < s_2\}} + \right. \\
& \quad \left. 1 - \frac{\# \{i / x_{ij^{*(1)}} < s^{*(1)} \text{ y } x_{ij} \geq s_2 \text{ y } y_i = r_{R_{22}}^*\}}{\# \{i / x_{ij^{*(1)}} < s^{*(1)} \text{ y } x_{ij} \geq s_2\}} \right\} \\
& = \underset{R_{12}, R_{22}}{Min} \left\{ \left(1 - f_{r_{R_{12}}^*, R_{12}} \right) + \left(1 - f_{r_{R_{22}}^*, R_{22}} \right) \right\} \\
& = \underset{R_{12}, R_{22}}{Min} \left\{ TEC(R_{12}) + TEC(R_{22}) \right\}
\end{aligned}$$

- Si utilizamos el **índice de Gini** como metrica de error a minimizar:

$$\begin{aligned}
& \underset{R_{12}, R_{22}, R_{21}^*}{Min} \left\{ G_{R_{12}} + G_{R_{22}} + G_{R_{21}^*} \right\} = \\
& = \underset{R_{12}, R_{22}, R_{21}^*}{Min} \left\{ \sum_{r=0,1,\dots,c-1} f_{r,R_{12}} \cdot (1 - f_{r,R_{12}}) + \sum_{r=0,1,\dots,c-1} f_{r,R_{22}} \cdot (1 - f_{r,R_{22}}) + \right. \\
& \quad \left. \sum_{r=0,1,\dots,c-1} f_{r,R_{21}^*} \cdot (1 - f_{r,R_{21}^*}) \right\} = \\
& = \underset{R_{12}, R_{22}, R_{21}^*}{Min} \left\{ \sum_{r=0,1,\dots,c-1} \frac{\# \{i / x_i \in R_{12} \text{ y } y_i = r\}}{\# \{i / x_i \in R_{12}\}} \cdot \left(1 - \frac{\# \{i / x_i \in R_{12} \text{ y } y_i = r\}}{\# \{i / x_i \in R_{12}\}}\right) \right. \\
& \quad + \sum_{r=0,1,\dots,c-1} \frac{\# \{i / x_i \in R_{22} \text{ y } y_i = r\}}{\# \{i / x_i \in R_{22}\}} \cdot \left(1 - \frac{\# \{i / x_i \in R_{22} \text{ y } y_i = r\}}{\# \{i / x_i \in R_{22}\}}\right) \\
& \quad \left. + \sum_{r=0,1,\dots,c-1} \frac{\# \{i / x_i \in R_{21}^* \text{ y } y_i = r\}}{\# \{i / x_i \in R_{21}^*\}} \cdot \left(1 - \frac{\# \{i / x_i \in R_{21}^* \text{ y } y_i = r\}}{\# \{i / x_i \in R_{21}^*\}}\right) \right\} = \\
& = \underset{j, s_2}{Min} \left\{ \sum_{r=0,1,\dots,c-1} \frac{\# \{i / x_{ij^*(1)} < s^{*(1)} \text{ y } x_{ij} < s_2 \text{ y } y_i = r\}}{\# \{i / x_{ij^*(1)} < s^{*(1)} \text{ y } x_{ij} < s_2\}} \cdot \left(1 - \frac{\# \{i / x_{ij^*(1)} < s^{*(1)} \text{ y } x_{ij} < s_2 \text{ y } y_i = r\}}{\# \{i / x_{ij^*(1)} < s^{*(1)} \text{ y } x_{ij} < s_2\}}\right) \right. \\
& \quad + \sum_{r=0,1,\dots,c-1} \frac{\# \{i / x_{ij^*(1)} < s^{*(1)} \text{ y } x_{ij} \geq s_2 \text{ y } y_i = r\}}{\# \{i / x_{ij^*(1)} < s^{*(1)} \text{ y } x_{ij} \geq s_2\}} \cdot \left(1 - \frac{\# \{i / x_{ij^*(1)} < s^{*(1)} \text{ y } x_{ij} \geq s_2 \text{ y } y_i = r\}}{\# \{i / x_{ij^*(1)} < s^{*(1)} \text{ y } x_{ij} \geq s_2\}}\right) \\
& \quad \left. + \sum_{r=0,1,\dots,c-1} \frac{\# \{i / x_{ij^*(1)} \geq s^{*(1)} \text{ y } y_i = r\}}{\# \{i / x_{ij^*(1)} \geq s^{*(1)}\}} \cdot \left(1 - \frac{\# \{i / x_{ij^*(1)} \geq s^{*(1)} \text{ y } y_i = r\}}{\# \{i / x_{ij^*(1)} \geq s^{*(1)}\}}\right) \right\} \\
& = \underset{j, s_2}{Min} \left\{ \sum_{r=0,1,\dots,c-1} \frac{\# \{i / x_{ij^*(1)} < s^{*(1)} \text{ y } x_{ij} < s_2 \text{ y } y_i = r\}}{\# \{i / x_{ij^*(1)} < s^{*(1)} \text{ y } x_{ij} < s_2\}} \cdot \left(1 - \frac{\# \{i / x_{ij^*(1)} < s^{*(1)} \text{ y } x_{ij} < s_2 \text{ y } y_i = r\}}{\# \{i / x_{ij^*(1)} < s^{*(1)} \text{ y } x_{ij} < s_2\}}\right) \right. \\
& \quad \left. + \sum_{r=0,1,\dots,c-1} \frac{\# \{i / x_{ij^*(1)} < s^{*(1)} \text{ y } x_{ij} \geq s_2 \text{ y } y_i = r\}}{\# \{i / x_{ij^*(1)} < s^{*(1)} \text{ y } x_{ij} \geq s_2\}} \cdot \left(1 - \frac{\# \{i / x_{ij^*(1)} < s^{*(1)} \text{ y } x_{ij} \geq s_2 \text{ y } y_i = r\}}{\# \{i / x_{ij^*(1)} < s^{*(1)} \text{ y } x_{ij} \geq s_2\}}\right) \right\} \\
& = \underset{R_{12}, R_{22}}{Min} \left\{ \sum_{r=0,1,\dots,c-1} f_{r,R_{12}} \cdot (1 - f_{r,R_{12}}) + \sum_{r=0,1,\dots,c-1} f_{r,R_{22}} \cdot (1 - f_{r,R_{22}}) \right\} \\
& = \underset{R_{12}, R_{22}}{Min} \left\{ G_{R_{12}} + G_{R_{22}} \right\}
\end{aligned}$$

- Criterio de parada: *hiperparámetro* k

Si $\#\{i = 1, \dots, n / x_i \in R_{12}^*\} < k \Rightarrow$ No se resuelve el problema de la Iteración 4 (ni por tanto los de aquellas que nazcan bajo la Iteración 4: Iteraciones 8, 9, 16, 17, 18, 19 etc)

Si $\#\{i = 1, \dots, n / x_i \in R_{11}^*\} \geq k \Rightarrow$ Si se resuelve el problema de la Iteración 4 (lo cual no implica que se vayan a resolver los problemas de otras Iteraciones).

Si $\#\{i = 1, \dots, n / x_i \in R_{22}^*\} < k \Rightarrow$ No se resuelve el problema de la Iteración 5 (ni por tanto los de aquellas que nazcan bajo la Iteración 5: Iteraciones 10, 11, 20, 21, 22, 23 etc)

Si $\#\{i = 1, \dots, n / x_i \in R_{22}^*\} \geq k \Rightarrow$ Si se resuelve el problema de la Iteración 5 (lo cual no implica que se vayan a resolver los problemas de otras Iteraciones).

Arbol tras la resolución del problema de la Iteración 2:

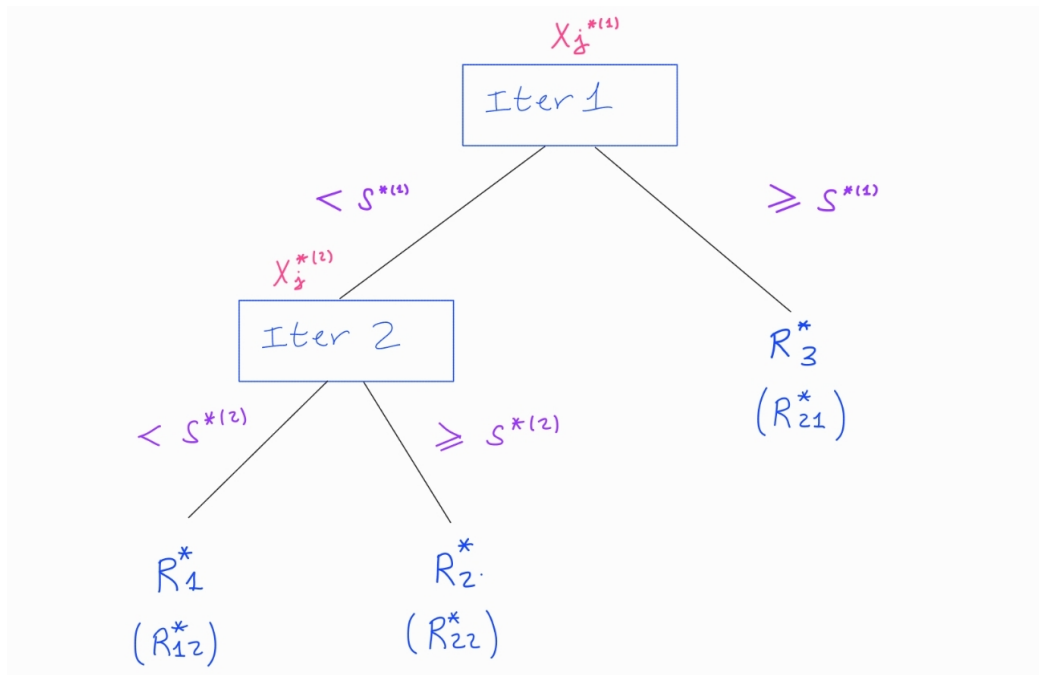


Figure 19: Arbol tras la resolución del problema de la Iteración 1

Observaciones al problema :

Notese que $TEC(R_{21}^*)$ y $G(R_{21}^*)$ no dependen de (j, s_2) , por lo que puede sacarse de la función objetivo de sus respectivos problemas de minimización sin que esto altere la solución del problema.

Fijado (j, s_2) puede calcularse $r_{R_{12}}^*$ como solución al problema de maximización:

$$Max_r (f_{r,R_{12}}) = Max_r \left(\frac{\# \{i / x_i \in R_{12} \text{ y } y_i = r\}}{\# \{i / x_i \in R_{12}\}} \right) =$$

$$Max_r \left(\frac{\# \{i / x_{ij^{*(1)}} < s^{*(1)} \text{ y } x_{ij} < s_2 \text{ y } y_i = r\}}{\# \{i / x_{ij^{*(1)}} < s^{*(1)} \text{ y } x_{ij} < s_2 \}} \right)$$

Fijado (j, s_2) puede calcularse $r_{R_{22}}^*$ como solucion al problema de maximizacion:

$$Max_r (f_{r,R_{22}}) = Max_r \left(\frac{\# \{i / x_i \in R_{22} \text{ y } y_i = r\}}{\# \{i / x_i \in R_{22}\}} \right) =$$

$$Max_r \left(\frac{\# \{i / x_{ij^{*(1)}} < s^{*(1)} \text{ y } x_{ij} \geq s_2 \text{ y } y_i = r\}}{\# \{i / x_{ij^{*(1)}} < s^{*(1)} \text{ y } x_{ij} \geq s_2 \}} \right)$$

Problema de la Iteración 3

Si estamos en este problema es porque la rama R_{21}^* del arbol resultante del problema de la Iteracion 1 tiene k o más observaciones de entrenamiento.

Arbol en el problema de la Iteracion 3 si no se cumplió el criterio de parada de la Iteración 2:

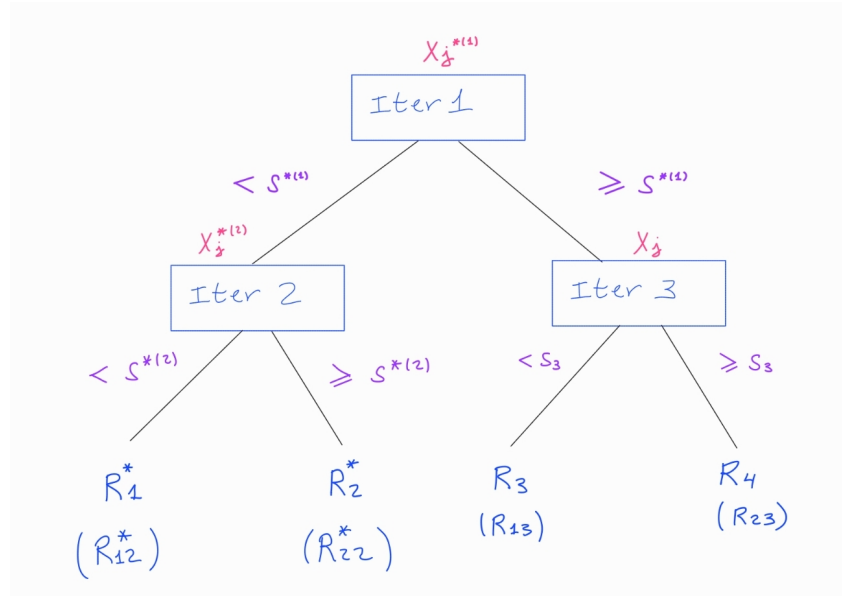


Figure 20: Arbol en el problema de la Iteración 3 si no se cumplió el criterio de parada de la Iteración 2

Arbol en el problema de la Iteracion 3 si se cumplió el criterio de parada de la Iteración 2:

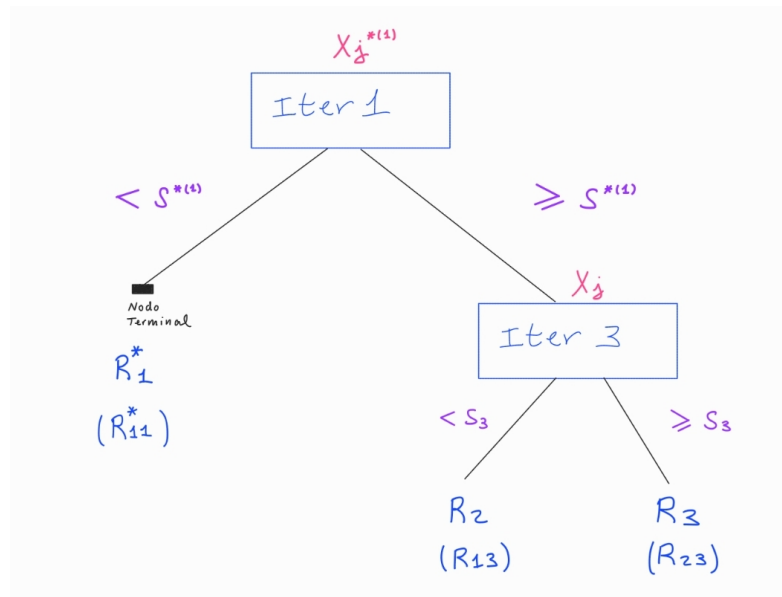


Figure 21: Arbol en el problema de la Iteración 3 si se cumplió el criterio de parada de la Iteración 2

La idea es:

Si no se cumplió el criterio de parada para la Iteración 2, entonces determinar las regiones del arbol resultante del problema de la Iteración 2 (arbol de la figura 20) que minimizan el error de entrenamiento global de dicho arbol.

Si se cumplió el criterio de parada para la Iteración 2, entonces determinar las regiones del arbol resultante del problema de la Iteración 1 (arbol de la figura 21) que minimizan el error de entrenamiento global de dicho arbol.

Notese que en el arbol de la figura 20 se cumple que $R_1 = R_{12}^*$ y $R_2 = R_{22}^*$ ya están determinadas tras la resolución del problema de la Iteración 2. Y en el arbol de la figura 21 se tiene que $R_1 = R_{11}^*$ también está determinada tras la resolución del problema de la Iteración 1.

Así que, tanto en el caso en el que se haya cumplido el criterio de parada para la Iteración 2 como en el caso de que no, en el problema de la Iteración 3 solo hay que determinar las regiones R_{13} y R_{23} óptimas (es decir, j y s_3 óptimos), las que minimizan el error de entrenamiento global.

Mas formalmente el problema se plantea como sigue:

- Usando TEC como métrica a optimizar
 - a) Si no se cumplió el criterio de parada para la Iteración 2:

$$\begin{aligned} \underset{R_{12}^*, R_{22}^*, R_{13}, R_{23}}{Min} \left\{ TEC(R_{12}^*) + TEC(R_{22}^*) + TEC(R_{13}) + TEC(R_{23}) \right\} = \\ = \underset{R_{13}, R_{23}}{Min} \left\{ TEC(R_{13}) + TEC(R_{23}) \right\} \end{aligned}$$

Puesto que $TEC(R_{12}^*)$ y $TEC(R_{22}^*)$ ya están fijadas (son constantes), al estar fijadas R_{12}^* y R_{22}^* , luego pueden sacarse del problema de optimización conservandose el resultado.

- b) Si se cumplió el criterio de parada para la Iteración 2:

$$\underset{R_{11}^*, R_{13}, R_{23}}{Min} \left\{ TEC(R_{11}^*) + TEC(R_{13}) + TEC(R_{23}) \right\} = \underset{R_{13}, R_{23}}{Min} \left\{ TEC(R_{13}) + TEC(R_{23}) \right\}$$

Puesto que $TEC(R_{11}^*)$ ya está fijada (es una constante), al estar fijada R_{11}^* , luego puede sacarse del problema de optimización conservandose el resultado.

Y en general se tiene que:

$$\begin{aligned} & \underset{R_{13}, R_{23}}{Min} \left\{ TEC(R_{13}) + TEC(R_{23}) \right\} = \\ & = \underset{R_{13}, R_{23}}{Min} \left\{ \left(1 - f_{r_{R_{13}^*}, R_{13}} \right) + \left(1 - f_{r_{R_{23}^*}, R_{23}} \right) \right\} \\ & = \underset{j, s_3}{Min} \left\{ 1 - \frac{\# \{i / x_i \in R_{13} \text{ y } y_i = r_{R_{13}^*}^*\}}{\# \{i / x_i \in R_{12}\}} + 1 - \frac{\# \{i / x_i \in R_{23} \text{ y } y_i = r_{R_{23}^*}^*\}}{\# \{i / x_i \in R_{23}\}} \right\} \\ & = \underset{j, s_3}{Min} \left\{ 1 - \frac{\# \{i / x_{ij^*(1)} \geq s^{*(1)} \text{ y } x_{ij} < s_3 \text{ y } y_i = r_{R_{33}^*}^*\}}{\# \{i / x_{ij^*(1)} < s^{*(1)} \text{ y } x_{ij} < s_3\}} + \right. \\ & \quad \left. 1 - \frac{\# \{i / x_{ij^*(1)} \geq s^{*(1)} \text{ y } x_{ij} \geq s_3 \text{ y } y_i = r_{R_{43}^*}^*\}}{\# \{i / x_{ij^*(1)} \geq s^{*(1)} \text{ y } x_{ij} \geq s_3\}} \right\} \end{aligned}$$

- Si utilizamos el **índice de Gini** como metrica de error a minimizar:

Problema facilmente deducible del problema anterior, solo hay que cambiar $G(\cdot)$ por $TEC(\cdot)$

- Criterio de parada: *hiperparámetro* k

Si $\#\{i = 1, \dots, n / x_i \in R_{13}^*\} < k \Rightarrow$ No se resuelve el problema de la Iteración 6 (ni por tanto los de aquellas que nazcan bajo la Iteración 6: Iteraciones 12,13,24,25,26,27 etc)

Si $\#\{i = 1, \dots, n / x_i \in R_{13}^*\} \geq k \Rightarrow$ Si se resuelve el problema de la Iteración 6 (lo cual no implica que se vayan a resolver los problemas de otras Iteraciones).

Si $\#\{i = 1, \dots, n / x_i \in R_{23}^*\} < k \Rightarrow$ No se resuelve el problema de la Iteración 7 (ni por tanto los de aquellas que nazcan bajo la Iteración 7: Iteraciones 14,15, 28,29,30,31 etc)

Si $\#\{i = 1, \dots, n / x_i \in R_{23}^*\} \geq k \Rightarrow$ Si se resuelve el problema de la Iteración 7 (lo cual no implica que se vayan a resolver los problemas de otras Iteraciones).

Arbol tras la resolución del problema de la Iteración 3 (si no se cumplió el criterio de parada de la Iteración 2):

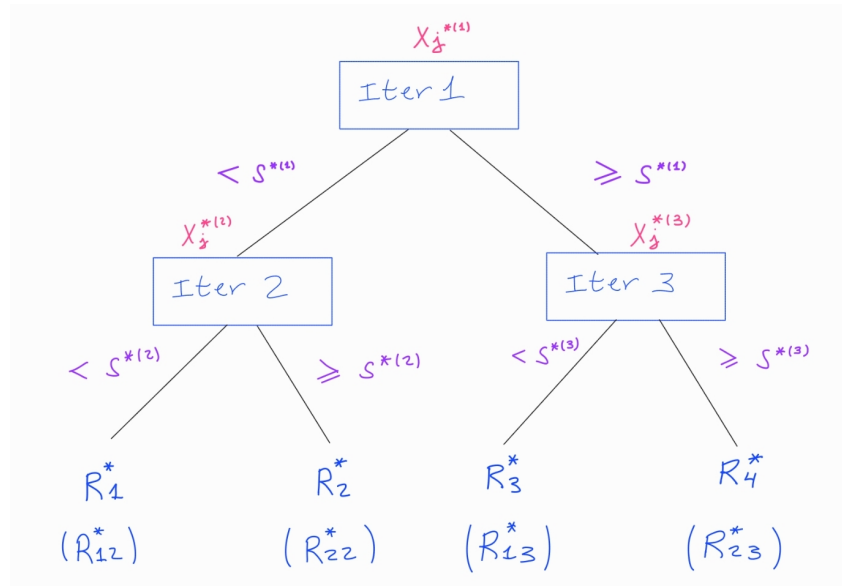


Figure 22: Arbol tras la resolución del problema de la Iteración 3 (si no se cumplió el criterio de parada de la Iteración 2)

Arbol tras la resolución del problema de la Iteración 3 (si se cumplió el criterio de parada de la Iteración 2):

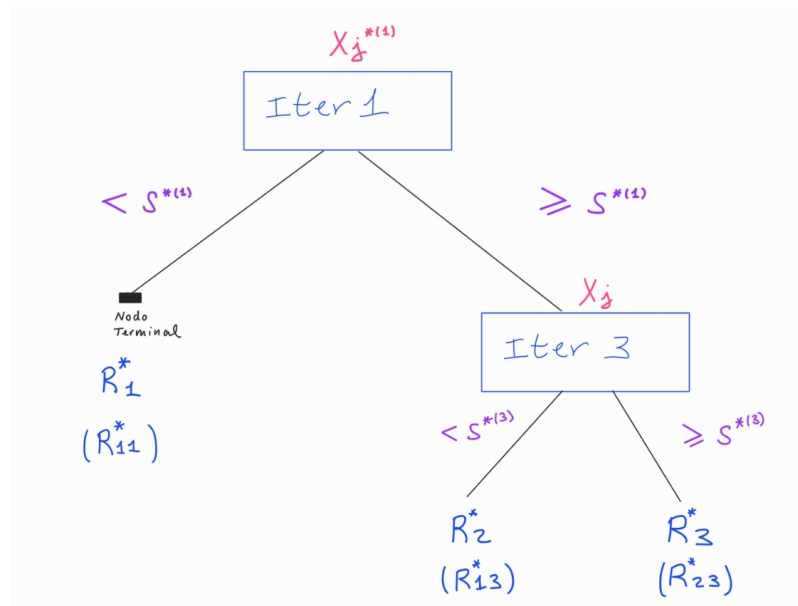


Figure 23: Arbol tras la resolución del problema de la Iteración 3 (si se cumplió el criterio de parada de la Iteración 2)

No expondremos los problemas de Iteraciones superiores puesto que son facilmente extrapolables de los ya expuestos (y además son infinitos). Hemos ilustrado simplemente tres de ellos para dar una idea del funcionamiento del algoritmo.

Propuesta *simplificada* de algoritmo para la resolución del problema

El siguiente algoritmo es una propuesta simplificada para “resolver” el problema planteado anteriormente. Realmente esta propuesta no resuelve el problema, ya que es una aproximación muy limitada, pero su simplicidad nos permitirá programarla en **Python** desde cero, lo que es un ejemplo útil de como programar un algoritmo relativamente complejo (en comparación con otros mas simples como KNN o regresión lineal).

Se fundamenta en la propuesta anterior, la diferencia es que es mucho mas simple, y esto es así para que no sea excesivamente compleja de programar.

Las principales diferencias son:

Solo se van a considerar los problemas asociados a las iteraciones 1,2,3 y 4 , por lo que a lo sumo se podría generar un árbol con esas cuatro iteraciones usando este algoritmo, es decir, un árbol muy pequeño en cualquier caso.

El criterio de parada es distinto, el cual favorece un tamaño del árbol aun si cabe mas reducido.

Problema de la Iteración 1

Árbol con 1 iteración:

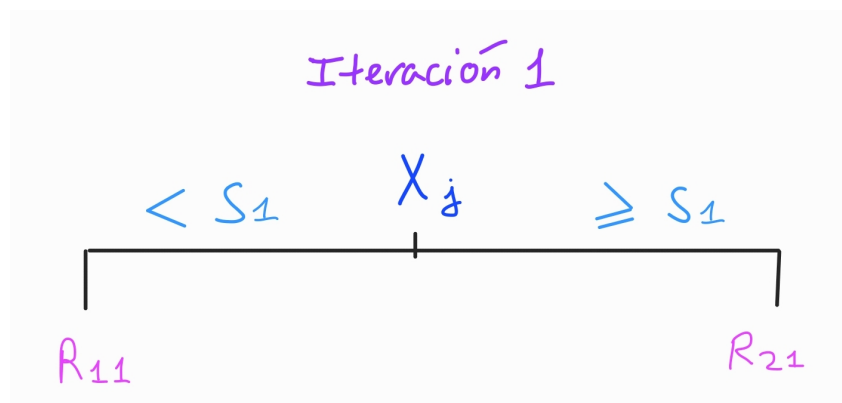


Figure 24: Árbol 1ª Iteración

La idea es, determinar las regiones R_{11} y R_{21} (es decir, j y s_1) del árbol con 1 iteración tal que minimizan el error de entrenamiento global de dicho árbol con 1 iteración.

Más formalmente el problema planteado es:

- Si utilizamos la **TEC** como métrica de error a minimizar:

$$\underset{R_{11}, R_{21}}{\text{Min}} \quad (\text{TEC}_1 = \text{TEC}(R_{11}) + \text{TEC}(R_{21}))$$

- Si utilizamos el **índice de Gini** como métrica de error a minimizar:

$$\underset{R_{11}, R_{21}}{\text{Min}} \quad (G_1 = G_{R_{11}} + G_{R_{21}})$$

Arbol obtenido tras resolver el problema de la Iteracion 1:

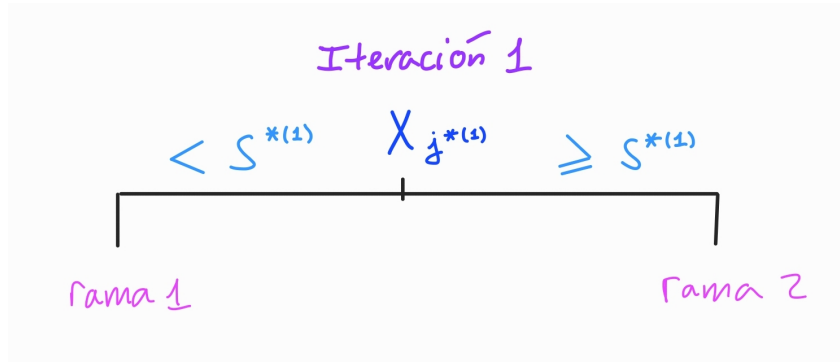


Figure 25: Arbol óptimo tras resolver el problema de la 1ª Iteración

Nuevo criterio de parada: (diferente al del algoritmo clásico)

- Si alguna de las ramas del arbol resultante de resolver el problema la iteracion 1 tiene menos de k observaciones de train \Rightarrow se para el algoritmo
- Si todas las ramas tienen k o mas observaciones de train \Rightarrow el algoritmo continua, se pasa a resolver el problema de la iteracion siguiente, en este caso el de la iteracion 2

Notese que k será un *hiperparametro* del algoritmo.

Problema de la Iteracion 2

Arbol con 2 iteraciones tras resolver el problema anterior:

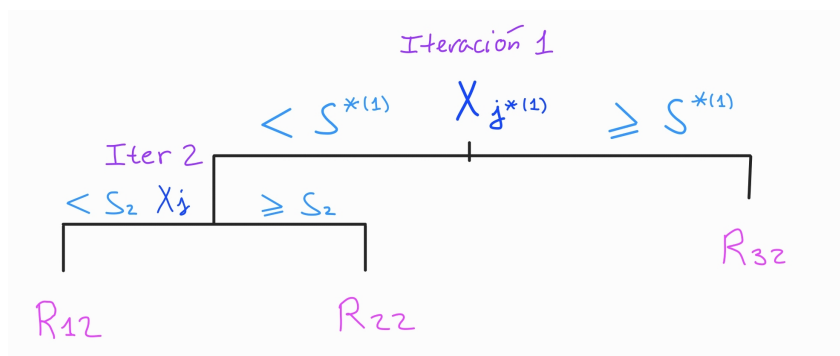


Figure 26: Arbol con 2 Iteraciones tras resolver el problema de la 1ª Iteración

Si estamos en este problema es porque ninguna rama del arbol resultante del problema de la Iteracion 1 tiene menos de k observaciones

La idea es, determinar las regiones R_{12} , R_{22} y R_{32} del arbol con 2 iteraciones (es decir, j y s_2), considerando la solucion del problema de la iteracion 1 (arbol de arriba), que minimizan el error de entrenamiento global de dicho arbol.

Notese que R_{32} ya esta determinada tras la resolusion del problema anterior, por ello realmente solo hay que determinar las regiones R_{12} y R_{22} óptimas (a saber, j y s_2 óptimos)

Mas formalmente el problema planteado es:

- Si utilizamos la **TEC** como metrica de error a minimizar:

$$\underset{R_{12}, R_{22}}{\text{Min}} \left\{ TEC_2 = TEC(R_{12}) + TEC(R_{22}) \right\}$$

- Si utilizamos el **índice de Gini** como metrica de error a minimizar:

$$\underset{R_{12}, R_{22}}{\text{Min}} \left\{ G_1 = G_{R_{12}} + G_{R_{22}} \right\}$$

Arbol tras resolver el problema de la Iteración 2:

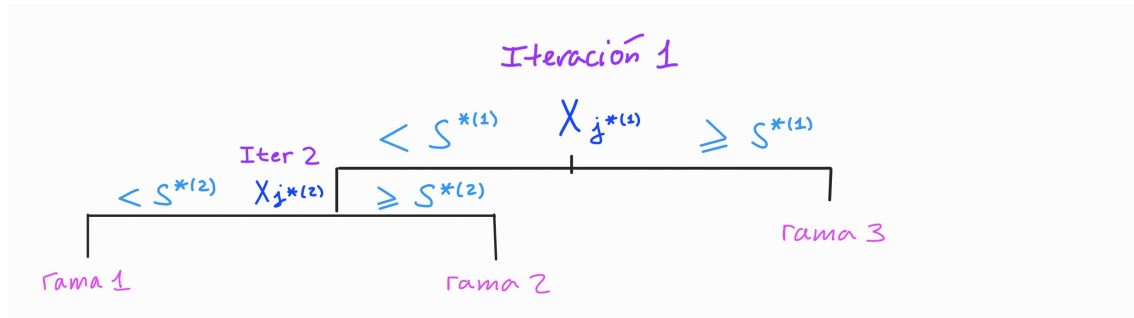


Figure 27: Arbol óptimo tras resolver el problema de la 2ª Iteración

- Si alguna de las ramas tiene menos de k observaciones de train \Rightarrow se para el algoritmo
- Si todas las ramas tienen k o mas observaciones de train \Rightarrow el algoritmo continua, se pasa a resolver el problema de la iteracion siguiente, en este caso el de la iteracion 2

Problema de la Iteración 3

Arbol con 3 iteraciones tras resolver el problema anterior:

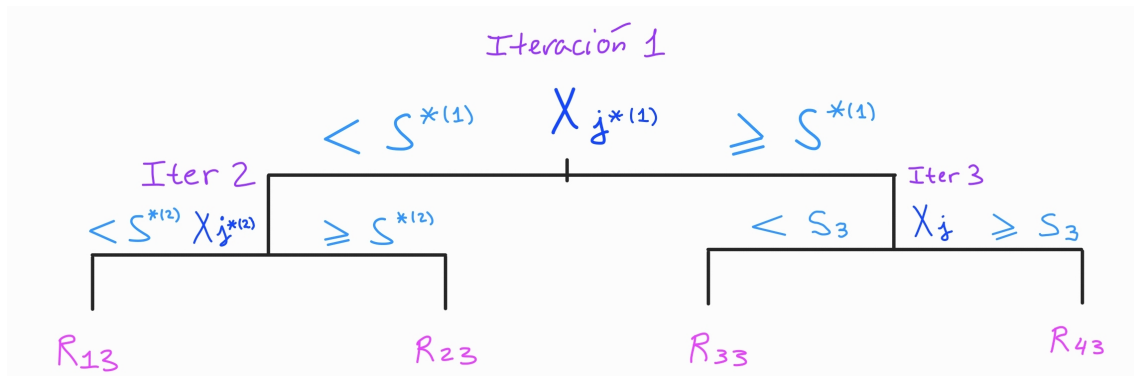


Figure 28: Arbol con 3 Iteraciones tras resolver el problema de la 2^a Iteración

Si estamos en este problema es porque ninguna rama del arbol resultante del problema de la Iteración 2 tiene menos de k observaciones

La idea es, determinar las regiones R_{13} , R_{23} , R_{33} y R_{43} del arbol con 3 iteraciones (es decir, j y s_3), considerando la solución del problema de la iteración 2 (arbol de arriba), que minimizan el error de entrenamiento global de dicho arbol.

Notese que R_{13} y R_{23} ya están determinadas tras la resolución del problema anterior, por ello realmente solo hay que determinar las regiones R_{33} y R_{43} óptimas (a saber, j y s_3 óptimos)

Mas formalmente el problema se plantea como sigue:

- Usando TEC como métrica a optimizar

$$\begin{aligned}
& \underset{R_{13}, R_{23}, R_{33}, R_{43}}{Min} \left\{ TEC_3 = TEC(R_{13}) + TEC(R_{23}) + TEC(R_{33}) + TEC(R_{43}) \right\} = \\
& = \underset{R_{13}, R_{23}, R_{33}, R_{43}}{Min} \left\{ \left(1 - f_{r_{R_{13}}^*, R_{13}}\right) + \left(1 - f_{r_{R_{23}}^*, R_{23}}\right) + \left(1 - f_{r_{R_{33}}^*, R_{33}}\right) + \left(1 - f_{r_{R_{43}}^*, R_{43}}\right) \right\} \\
& = \underset{j, s_3}{Min} \left\{ 1 - \frac{\# \{i / x_i \in R_{13} \text{ y } y_i = r_{R_{13}}^*\}}{\# \{i / x_i \in R_{12}\}} + 1 - \frac{\# \{i / x_i \in R_{23} \text{ y } y_i = r_{R_{23}}^*\}}{\# \{i / x_i \in R_{23}\}} + \right. \\
& \quad \left. 1 - \frac{\# \{i / x_i \in R_{33} \text{ y } y_i = r_{R_{33}}^*\}}{\# \{i / x_i \in R_{33}\}} + 1 - \frac{\# \{i / x_i \in R_{43} \text{ y } y_i = r_{R_{43}}^*\}}{\# \{i / x_i \in R_{43}\}} \right\} \\
& = \underset{j, s_3}{Min} \left\{ 1 - \frac{\# \{i / x_{ij^{*(1)}} < s^{*(1)} \text{ y } x_{ij^{*(2)}} < s^{*(2)} \text{ y } y_i = r_{R_{13}}^*\}}{\# \{i / x_{ij^{*(1)}} < s^{*(1)} \text{ y } x_{ij} < s^{*(2)}\}} + \right. \\
& \quad \left. 1 - \frac{\# \{i / x_{ij^{*(1)}} < s^{*(1)} \text{ y } x_{ij} \geq s^{*(2)} \text{ y } y_i = r_{R_{23}}^*\}}{\# \{i / x_{ij^{*(1)}} < s^{*(1)} \text{ y } x_{ij} \geq s^{*(2)}\}} + \right. \\
& \quad \left. 1 - \frac{\# \{i / x_{ij^{*(1)}} \geq s^{*(1)} \text{ y } x_{ij} < s_3 \text{ y } y_i = r_{R_{33}}^*\}}{\# \{i / x_{ij^{*(1)}} < s^{*(1)} \text{ y } x_{ij} < s_3\}} + \right. \\
& \quad \left. 1 - \frac{\# \{i / x_{ij^{*(1)}} \geq s^{*(1)} \text{ y } x_{ij} \geq s_3 \text{ y } y_i = r_{R_{43}}^*\}}{\# \{i / x_{ij^{*(1)}} < s^{*(1)} \text{ y } x_{ij} \geq s_3\}} \right\} \\
& = \underset{j, s_3}{Min} \left\{ 1 - \frac{\# \{i / x_{ij^{*(1)}} \geq s^{*(1)} \text{ y } x_{ij} < s_3 \text{ y } y_i = r_{R_{33}}^*\}}{\# \{i / x_{ij^{*(1)}} < s^{*(1)} \text{ y } x_{ij} < s_3\}} + \right. \\
& \quad \left. 1 - \frac{\# \{i / x_{ij^{*(1)}} \geq s^{*(1)} \text{ y } x_{ij} \geq s_3 \text{ y } y_i = r_{R_{43}}^*\}}{\# \{i / x_{ij^{*(1)}} < s^{*(1)} \text{ y } x_{ij} \geq s_3\}} \right\} \\
& = \underset{j, s_3}{Min} \left\{ \left(1 - f_{r_{R_{33}}^*, R_{33}}\right) + \left(1 - f_{r_{R_{43}}^*, R_{43}}\right) \right\} \\
& = \underset{R_{33}, R_{43}}{Min} \left\{ TEC(R_{33}) + TEC(R_{43}) \right\}
\end{aligned}$$

Arbol tras resolver el problema de la Iteración 3:

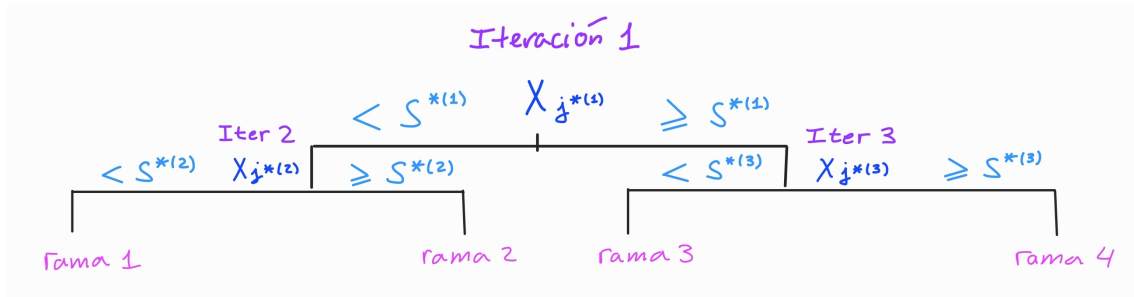


Figure 29: Arbol tras resolver el problema de la 3ª Iteración

- Si alguna de las ramas tiene menos de k observaciones de train \Rightarrow se para el algoritmo
- Si todas las ramas tienen k o mas observaciones de train \Rightarrow el algoritmo continua, se pasa a resolver el problema de la iteracion siguiente, en este caso el de la iteracion 2

Siempre que no se cumpla la condicion de parada se seguiria haciendo crecer el arbol generando nuevas iteraciones.

No seguiremos exponiendo mas iteraciones del algoritmo, puesto que es facilmente extrapolable lo expuesto a cualquier iteracion superior.

4.5.2 Árboles de Clasificación Penalizados

La idea es esencialmente la misma la ya comentada en la sección de árboles de regresión penalizados.

Los árboles de clasificación penalizados son esencialmente iguales que los árboles de clasificación ordinarios pero tienen una modificación en el problema de optimización tal que permiten penalizar los árboles con muchas ramas.

El problema de optimización a resolver en los árboles de regresión ordinarios (usando Gini como métrica, sin pérdida de generalidad) era:

$$\underset{R_1, \dots, R_m}{Min} \sum_{h=1}^m G_{R_h}$$

En los árboles de regresión penalizados el problema a resolver es:

$$\underset{R_1, \dots, R_m}{Min} \sum_{h=1}^m G_{R_h} + \alpha \cdot m$$

Donde m es el número de ramas del árbol

De este modo, si $\alpha = 0$ estamos en el caso de árboles de clasificación ordinarios.

Si $\alpha > 0$, entonces se penaliza el número de ramas del árbol (m).

Dado un $\alpha > 0$, cuanto mayor sea el tamaño del árbol (m) más difícil será que sea óptimo en el sentido de que resuelva el problema de minimización. Y viceversa.

Cuanto mayor sea α más se estará penalizando a los árboles de tamaño grande.

Con $\alpha > 0$ (y especialmente $\alpha \gg 0$ (relativamente grande)) tienden a salir como óptimos árboles que son más pequeños que los que salen usando el algoritmo ordinario (sin penalización).

En el algoritmo ordinario se prioriza que el árbol se ajuste a los datos de entrenamiento, lo que suele provocar overfitting (sobreajuste). Esto es un problema porque hace que el árbol funcione muy bien (prediga bien) en la muestra de entrenamiento (cuando usa los datos que ya ha “visto”), pero bastante peor en la muestra de test. Estos modelos tendrán poco sesgo pero mucha varianza a nivel predictivo, lo cual es negativo.

El algoritmo penalizado permite obtener un equilibrio entre sesgo y varianza a través del parámetro de penalización α

La idea es seleccionar un α que nos genere un modelo con quizá un poco más de sesgo pero con considerable menos varianza que el ordinario, lo cual conduzca a un error de predicción menor que en el caso ordinario.

¿ Cómo escoger α en la práctica ?

Una idea razonable es entrenar un árbol con los mismos datos de entrenamiento pero con B distintos α

Calcular con una muestra de test el error de cada uno de los B modelos.

Quedarse con el α asociado al modelo con menor error de test.

Una cuestión relevante aquí es cómo definir el conjunto de B valores de α que se van a tener en consideración.

No entraremos aquí en esta cuestión.

4.5.3 Árboles de clasificación: algoritmo de creación propia en Python

Algoritmo de creacion propia con TEC

```
def classification_tree(Data_set, iterations_vector, k, Y_categories) :  
  
    # POR AHORA SOLO GENERA 4 ITERACIONES EN EL ARBOL --> iterations_vector =  
    ↪ range(1,5) como mucho ([1,2,3,4])  
  
    # Data_set tiene que ser tal que, su columna 0 sea Y, y la j-esima sea la  
    ↪ variable Xj , para j=1,...,p  
  
    # Si se quiere que el arbol tenga como mucho 3 iteraciones -->  
    ↪ iterations_vector = range(1,4) = [1,2,3]  
  
    # Si Y tiene como categorias 0,1,2 --> Y_categories = range(0,3)  
  
    # k = numero de obsrevaciones minimas por rama del arbol --> criterio de  
    ↪ parada  
  
    #####  
  
    def s_values(j, Data_set):  
  
        s_values = []  
  
        if (Data_set.dtypes[j] != 'float64') & (Data_set.dtypes[j] !=  
        ↪ 'int64') : # Para las variables categoricas s_value sera  
        ↪ simplemente su rango.  
  
            s_values = Data_set.sort_values(by=[Data_set.columns[j]],  
            ↪ axis=0, ascending=True, ignore_index=True).iloc[:, j].unique()  
  
        elif (Data_set.dtypes[j] == 'float64') | (Data_set.dtypes[j] ==  
        ↪ 'int64') :  
  
            Xj_sorted = Data_set.sort_values(by=[Data_set.columns[j]],  
            ↪ axis=0, ascending=True, ignore_index=True).iloc[:, j].unique()  
  
            for i in range(0, len(Xj_sorted)-1):  
  
                s_values.append( (Xj_sorted[i] + Xj_sorted[i+1] ) / 2 )  
  
        return s_values  
  
    #####  
  
    ## ITERACION 1
```

```

if iterations_vector[0] == 1 : # nacimiento del arbol

#####

def f_R11(j, s, r, Data_set):

    # Verificando si se cumplen las siguientes dos condiciones
    ↪ conjuntamente nos garantizamos que todas las ramas tienen
    ↪ observaciones de train.
    # Es decir, no habra ninguna rama sin observaciones de train
    ↪ que caigan en ella.

    cond_R11 = len(Data_set.loc[ (Data_set.iloc[:, j] < s) , : ] )

    if cond_R11 != 0 :

        f_R11 = len( Data_set.loc[ (Data_set.iloc[:, j] < s) &
↪ (Data_set.loc[:, 'Y'] == r) , : ] ) / len( Data_set.loc[
↪ (Data_set.iloc[:, j] < s) , : ] )

        elif cond_R11 == 0 :

            f_R11 = 0

    return f_R11

#####

def f_R21(j, s, r, Data_set):

    cond_R21 = len(Data_set.loc[ (Data_set.iloc[:, j] >= s) , : ]
↪ )

    if cond_R21 != 0 :

        f_R21 = len( Data_set.loc[ (Data_set.iloc[:, j] >= s) &
↪ (Data_set.loc[:, 'Y'] == r) , : ] ) / len( Data_set.loc[
↪ (Data_set.iloc[:, j] >= s) , : ] )

        elif cond_R21 == 0 :

            f_R21 = 0

    return f_R21

#####

TEC_vector = []

```

```

j_vector = []
s_vector = []

j_star_vector = []
s_star_vector = []
TEC_star_vector = []

for j in range(1, Data_set.shape[1]) :

    for s in s_values(j, Data_set) :

        # Búsqueda de r_star_R11 :

        f_R11_r_vector = []

        for r in Y_categories: # Si Y tiene como categorias 0,1,2
            ↪ --> Y_categories = range(0,3)

            f_R11_r_vector.append( f_R11(j, s, r , Data_set) )

            f_R11_df = pd.DataFrame({'r':Y_categories ,
            ↪ 'f_R11':f_R11_r_vector })

            f_R11_df_sorted = f_R11_df.sort_values(by=['f_R11'],
            ↪ axis=0, ascending=False, ignore_index=True)

            r_star_R11 = f_R11_df_sorted.loc[0, 'r']

        # Búsqueda de r_star_R21 :

        f_R21_r_vector = []

        for r in Y_categories: # Si Y tiene como categorias 0,1,2
            ↪ --> Y_categories = range(0,3)

            f_R21_r_vector.append( f_R21(j, s, r , Data_set) )

            f_R21_df = pd.DataFrame({'r':Y_categories ,
            ↪ 'f_R21':f_R21_r_vector })

            f_R21_df_sorted = f_R21_df.sort_values(by=['f_R21'],
            ↪ axis=0, ascending=False, ignore_index=True)

            r_star_R21 = f_R21_df_sorted.loc[0, 'r']

        # Calculo de TEC_1 para la combinacion (j, s) dada:

        TEC_1 = 1- f_R11(j, s, r_star_R11, Data_set) + 1- f_R21(j,
        ↪ s, r_star_R21, Data_set)

        TEC_vector.append(TEC_1)

```

```

        j_vector.append(j)
        s_vector.append(s)

# Búsqueda de j_star y s_star de la iteración 1:

    TEC_df = pd.DataFrame({'TEC':TEC_vector, 'j':j_vector,
↪  's':s_vector})

    TEC_df_sorted = TEC_df.sort_values(by=['TEC'], axis=0,
↪  ascending=True, ignore_index=True)

    s_star_vector.append( TEC_df_sorted.loc[0, 's'] )
    j_star_vector.append( TEC_df_sorted.loc[0, 'j'] )
    TEC_star_vector.append(TEC_df_sorted.loc[0, 'TEC'])

# OJO: s_star_vector[i] sera el s_star de la iteración i+1 , para
↪ i=0,1,...
# OJO: j_star_vector[i] sera el j_star de la iteración i+1 , para
↪ i=0,1,...

#####

# Condición de parada:

    obs_r11 = len( Data_set.loc[ Data_set.iloc[:, j_star_vector[0] ] <
↪  s_star_vector[0] , : ] )
    obs_r21 = len( Data_set.loc[ Data_set.iloc[:, j_star_vector[0] ]
↪  >= s_star_vector[0] , : ] )

    if(obs_r11 < k) | (obs_r21 < k) : # Si se cumple el criterio de
↪ parada

        print('El árbol final es el árbol con 1 Iteración. Se ha
↪  cumplido el criterio de parada basado en número mínimo', k
↪  , 'de observaciones por rama')

        number_iterations=1

        obs_ramas = [obs_r11 , obs_r21]

#####

    return(number_iterations, j_star_vector, s_star_vector,
↪  TEC_star_vector, obs_ramas )

#####

elif (obs_r11 >= k) & (obs_r21 >= k) : # No se cumple el criterio
↪ de parada

```



```

pass

#####

## ITERACION 2 ..... POR MODIFICAR !! .....

if iterations_vector[1] == 2 : # Desarrollar nodo R1 de la 1ª
    ↪ iteracion

#####

def f_R12(j, s, r, Data_set):

    # Verificando si se cumplen las siguientes dos condiciones
    ↪ conjuntamente nos garantizamos que todas las ramas tienen
    ↪ observaciones de train.
    # Es decir, no habra ninguna rama sin observaciones de train
    ↪ que caigan en ella.

    cond_R12 = len( Data_set.loc[ (Data_set.iloc[:,
↪ j_star_vector[0]] < s_star_vector[0]) & (Data_set.iloc[:, j] < s) , :
↪ ] )

    if cond_R12 != 0 :

        f_R12 = len( Data_set.loc[ (Data_set.iloc[:,
↪ j_star_vector[0]] < s_star_vector[0]) & (Data_set.iloc[:, j] < s) &
↪ (Data_set.loc[:, 'Y'] == r) , : ] ) / cond_R12

    elif cond_R12 == 0 :

        f_R12 = 0

    return f_R12

#####

def f_R22(j, s, r, Data_set):

    # Verificando si se cumplen las siguientes dos condiciones
    ↪ conjuntamente nos garantizamos que todas las ramas tienen
    ↪ observaciones de train.
    # Es decir, no habra ninguna rama sin observaciones de train
    ↪ que caigan en ella.

    cond_R22 = len( Data_set.loc[ (Data_set.iloc[:,
↪ j_star_vector[0]] < s_star_vector[0]) & (Data_set.iloc[:, j] >= s) , :
↪ ] )

```

```

        if cond_R22 != 0 :

            f_R22 = len( Data_set.loc[ (Data_set.iloc[:,
↪ j_star_vector[0]] < s_star_vector[0]) & (Data_set.iloc[:, j] >= s) &
↪ (Data_set.loc[:, 'Y'] == r) , : ] ) / cond_R22

        elif cond_R22 == 0 :

            f_R22 = 0

        return f_R22

#####

TEC_vector = []
j_vector = []
s_vector = []

for j in range(1, Data_set.shape[1]) :

    for s in s_values(j, Data_set) :

        # Búsqueda de r_star_R12 :

        f_R12_r_vector = []

        for r in Y_categories : # Si Y tiene como categorias
↪ 0,1,2 --> Y_categories = range(0,3)

            f_R12_r_vector.append( f_R12(j, s, r , Data_set) )

        f_R12_df = pd.DataFrame({'r':Y_categories ,
↪ 'f_R12':f_R11_r_vector })

        f_R12_df_sorted = f_R12_df.sort_values(by=['f_R12'],
↪ axis=0, ascending=False, ignore_index=True)

        r_star_R12 = f_R11_df_sorted.loc[0, 'r']

        # Búsqueda de r_star_R22 :

        f_R22_r_vector = []

        for r in Y_categories: # Si Y tiene como categorias 0,1,2
↪ --> Y_categories = range(0,3)

            f_R22_r_vector.append( f_R22(j, s, r , Data_set) )

```

```

        f_R22_df = pd.DataFrame({'r':Y_categories ,
↪ 'f_R22':f_R22_r_vector })

        f_R22_df_sorted = f_R22_df.sort_values(by=['f_R22'],
↪ axis=0, ascending=False, ignore_index=True)

        r_star_R22 = f_R22_df_sorted.loc[0, 'r']

        # Calculo de TEC_1 para la combinacion (j, s) dada:

        TEC_2 = 1- f_R12(j, s, r_star_R12, Data_set) + 1- f_R22(j,
↪ s, r_star_R22, Data_set)

        TEC_vector.append(TEC_2)
        j_vector.append(j)
        s_vector.append(s)

        # Búsqueda de j_star y s_star de la itracion 1:

        TEC_df = pd.DataFrame({'TEC':TEC_vector, 'j':j_vector,
↪ 's':s_vector})

        TEC_df_sorted = TEC_df.sort_values(by=['TEC'], axis=0,
↪ ascending=True, ignore_index=True)

        s_star_vector.append( TEC_df_sorted.loc[0, 's'] )
        j_star_vector.append( TEC_df_sorted.loc[0, 'j'] )
        TEC_star_vector.append(TEC_df_sorted.loc[0, 'TEC'])

        # OJO: s_star_vector[i] sera el s_star de la iteracion i+1 , para
↪ i=0,1,...
        # OJO: j_star_vector[i] sera el j_star de la iteracion i+1 , para
↪ i=0,1,...

#####

        # Condicion de parada:

        obs_r12 = len( Data_set.loc[ (Data_set.iloc[:, j_star_vector[0] ]
↪ < s_star_vector[0]) & (Data_set.iloc[:, j_star_vector[1]] <
↪ s_star_vector[1]) , : ] )
        obs_r22 = len( Data_set.loc[ (Data_set.iloc[:, j_star_vector[0] ]
↪ < s_star_vector[0]) & (Data_set.iloc[:, j_star_vector[1]] >=
↪ s_star_vector[1]) , : ] )
        obs_r32 = len( Data_set.loc[ (Data_set.iloc[:, j_star_vector[0] ]
↪ >= s_star_vector[0]) , : ] )

        if(obs_r12 < k) | (obs_r22 < k) : # Si se cumple el criterio de
↪ parada

```

```

print('El arbol final es el arbol con 2 Iteracion. Se ha
↳ cumplido el criterio de parada basado en numero minimo', k
↳ , 'de observaciones por rama')

number_iterations=2

obs_ramas = [obs_r12 , obs_r22, obs_r32]

#####

return(number_iterations, j_star_vector, s_star_vector,
↳ TEC_star_vector, obs_ramas )

#####

elif (obs_r12 >= k) & (obs_r22 >= k) : # No se cumple el criterio
↳ de parada

pass

#####

## ITERACION 3

if iterations_vector[2] == 3 : # Desarrollar nodo R2 de la 1ª
↳ iteracion --> considerar j_star_vector[0] y s_star_vector[0] (1ª
↳ iteracion) y >= (R2)

#####

def f_R33(j, s, r, Data_set):

    # Verificando si se cumplen las siguientes dos condiciones
    ↳ conjuntamente nos garantizamos que todas las ramas tienen
    ↳ observaciones de train.
    # Es decir, no habra ninguna rama sin observaciones de train
    ↳ que caigan en ella.

    cond_R33 = len( Data_set.loc[ (Data_set.iloc[:,
↳ j_star_vector[0]] >= s_star_vector[0]) & (Data_set.iloc[:, j] < s) , :
↳ ] )

    if cond_R33 != 0 :

        f_R33 = len( Data_set.loc[ (Data_set.iloc[:,
↳ j_star_vector[0]] >= s_star_vector[0]) & (Data_set.iloc[:, j] < s) &
↳ (Data_set.loc[:, 'Y'] == r) , : ] ) / cond_R33

```

```

        elif cond_R33 == 0 :

            f_R33 = 0

        return f_R33

#####

def f_R43(j, s, r, Data_set):

    # Verificando si se cumplen las siguientes dos condiciones
    ↪ conjuntamente nos garantizamos que todas las ramas tienen
    ↪ observaciones de train.
    # Es decir, no habrá ninguna rama sin observaciones de train
    ↪ que caigan en ella.

    cond_R43 = len( Data_set.loc[ (Data_set.iloc[:,
↪ j_star_vector[0]] >= s_star_vector[0]) & (Data_set.iloc[:, j] >= s) ,
↪ : ] )

    if cond_R43 != 0 :

        f_R43 = len( Data_set.loc[ (Data_set.iloc[:,
↪ j_star_vector[0]] >= s_star_vector[0]) & (Data_set.iloc[:, j] >= s) &
↪ (Data_set.loc[:, 'Y'] == r) , : ] ) / cond_R43

    elif cond_R43 == 0 :

        f_R43 = 0

    return f_R43

#####

TEC_vector = []
j_vector = []
s_vector = []

for j in range(1, Data_set.shape[1]) :

    for s in s_values(j, Data_set) :

        # Búsqueda de r_star_R11 :

        f_R33_r_vector = []

        for r in Y_categories : # Si Y tiene como categorías
            ↪ 0,1,2 --> Y_categories = range(0,3)

```

```

        f_R33_r_vector.append( f_R33(j, s, r , Data_set) )

        f_R33_df = pd.DataFrame({'r':Y_categories ,
↪ 'f_R33':f_R11_r_vector })

        f_R33_df_sorted = f_R33_df.sort_values(by=['f_R33'],
↪ axis=0, ascending=False, ignore_index=True)

        r_star_R33 = f_R11_df_sorted.loc[0, 'r']

        # Búsqueda de r_star_R21 :

        f_R43_r_vector = []

        for r in Y_categories: # Si Y tiene como categorias 0,1,2
↪ --> Y_categories = range(0,3)

            f_R43_r_vector.append( f_R43(j, s, r , Data_set) )

            f_R43_df = pd.DataFrame({'r':Y_categories ,
↪ 'f_R43':f_R21_r_vector })

            f_R43_df_sorted = f_R43_df.sort_values(by=['f_R43'],
↪ axis=0, ascending=False, ignore_index=True)

            r_star_R43 = f_R43_df_sorted.loc[0, 'r']

            # Calculo de TEC_1 para la combinacion (j, s) dada:

            TEC_1 = 1- f_R33(j, s, r_star_R33, Data_set) + 1- f_R43(j,
↪ s, r_star_R43, Data_set)

            TEC_vector.append(TEC_1)
            j_vector.append(j)
            s_vector.append(s)

        # Búsqueda de j_star y s_star de la itracion 1:

        TEC_df = pd.DataFrame({'TEC':TEC_vector, 'j':j_vector,
↪ 's':s_vector})

        TEC_df_sorted = TEC_df.sort_values(by=['TEC'], axis=0,
↪ ascending=True, ignore_index=True)

        s_star_vector.append( TEC_df_sorted.loc[0, 's'] )
        j_star_vector.append( TEC_df_sorted.loc[0, 'j'] )
        TEC_star_vector.append(TEC_df_sorted.loc[0, 'TEC'])

        # OJO: s_star_vector[i] sera el s_star de la iteracion i+1 , para
↪ i=0,1,...

```

```

# OJO: j_star_vector[i] sera el j_star de la iteracion i+1 , para
↳ i=0,1,...

#####

# Condicion de parada:

obs_r13 = len( Data_set.loc[ (Data_set.iloc[:, j_star_vector[0] ]
↳ < s_star_vector[0]) & (Data_set.iloc[:, j_star_vector[1]] <
↳ s_star_vector[1]) , : ] )
obs_r23 = len( Data_set.loc[ (Data_set.iloc[:, j_star_vector[0] ]
↳ < s_star_vector[0]) & (Data_set.iloc[:, j_star_vector[1]] >=
↳ s_star_vector[1]) , : ] )

obs_r33 = len( Data_set.loc[ (Data_set.iloc[:, j_star_vector[0] ]
↳ >= s_star_vector[0]) & (Data_set.iloc[:, j_star_vector[2]] <
↳ s_star_vector[2]) , : ] )
obs_r43 = len( Data_set.loc[ (Data_set.iloc[:, j_star_vector[0] ]
↳ >= s_star_vector[0]) & (Data_set.iloc[:, j_star_vector[2]] >=
↳ s_star_vector[2]) , : ] )

if(obs_r33 < k) | (obs_r43 < k) : # Si se cumple el criterio de
↳ parada

print('El arbol final es el arbol con 3 Iteracion. Se ha
↳ cumplido el criterio de parada basado en numero minimo', k
↳ , 'de observaciones por rama')

number_iterations = 3

obs_ramas = [obs_r13, obs_r23, obs_r33 , obs_r43]

#####

return(number_iterations, j_star_vector, s_star_vector,
↳ TEC_star_vector, obs_ramas )

#####

elif (obs_r33 >= k) & (obs_r43 >= k) : # No se cumple el criterio
↳ de parada

pass

#####

## ITERACION 4

```

```

if iterations_vector[3] == 4 :

#####

#####

def f_R14(j, s, r, Data_set):

    # Verificando si se cumplen las siguientes dos condiciones
    ↪ conjuntamente nos garantizamos que todas las ramas tienes
    ↪ observaciones de train.
    # Es decir, no habra ninguna rama sin observaciones de train
    ↪ que caigan en ella.

    cond_R14 = len( Data_set.loc[ (Data_set.iloc[:,
↪ j_star_vector[0]] < s_star_vector[0]) & (Data_set.iloc[:,
↪ j_star_vector[1]] < s_star_vector[1]) & (Data_set.iloc[:, j] < s) , :
↪ ] )

    if cond_R14 != 0 :

        f_R14 = len( Data_set.loc[ (Data_set.iloc[:,
↪ j_star_vector[0]] < s_star_vector[0]) & (Data_set.iloc[:,
↪ j_star_vector[1]] < s_star_vector[1]) & (Data_set.iloc[:, j] < s) &
↪ (Data_set.loc[:, 'Y'] == r) , : ] ) / cond_R14

    elif cond_R14 == 0 :

        f_R14 = 0

    return f_R14

#####

def f_R24(j, s, r, Data_set):

    # Verificando si se cumplen las siguientes dos condiciones
    ↪ conjuntamente nos garantizamos que todas las ramas tienes
    ↪ observaciones de train.
    # Es decir, no habra ninguna rama sin observaciones de train
    ↪ que caigan en ella.

    cond_R24 = len( Data_set.loc[ (Data_set.iloc[:,
↪ j_star_vector[0]] < s_star_vector[0]) & (Data_set.iloc[:,
↪ j_star_vector[1]] < s_star_vector[1]) & (Data_set.iloc[:, j] >= s) , :
↪ ] )

    if cond_R24 != 0 :

        f_R24 = len( Data_set.loc[ (Data_set.iloc[:,
↪ j_star_vector[0]] < s_star_vector[0]) & (Data_set.iloc[:,
↪ j_star_vector[1]] < s_star_vector[1]) & (Data_set.iloc[:, j] >= s) &
↪ (Data_set.loc[:, 'Y'] == r) , : ] ) / cond_R24

```



```

elif cond_R24 == 0 :

    f_R24 = 0

return f_R24

#####

TEC_vector = []
j_vector = []
s_vector = []

for j in range(1, Data_set.shape[1]) :

    for s in s_values(j, Data_set) :

        # Búsqueda de r_star_R11 :

        f_R14_r_vector = []

        for r in Y_categories : # Si Y tiene como categorias
            ↪ 0,1,2 --> Y_categories = range(0,3)

            f_R14_r_vector.append( f_R14(j, s, r , Data_set) )

        f_R14_df = pd.DataFrame({'r':Y_categories ,
            ↪ 'f_R14':f_R11_r_vector })

        f_R14_df_sorted = f_R14_df.sort_values(by=['f_R14'],
            ↪ axis=0, ascending=False, ignore_index=True)

        r_star_R14 = f_R11_df_sorted.loc[0, 'r']

        # Búsqueda de r_star_R21 :

        f_R24_r_vector = []

        for r in Y_categories: # Si Y tiene como categorias 0,1,2
            ↪ --> Y_categories = range(0,3)

            f_R24_r_vector.append( f_R24(j, s, r , Data_set) )

        f_R24_df = pd.DataFrame({'r':Y_categories ,
            ↪ 'f_R24':f_R21_r_vector })

        f_R24_df_sorted = f_R24_df.sort_values(by=['f_R24'],
            ↪ axis=0, ascending=False, ignore_index=True)

```

```

r_star_R24 = f_R24_df_sorted.loc[0, 'r']

# Calculo de TEC_1 para la combinacion (j, s) dada:

TEC_1 = 1- f_R14(j, s, r_star_R14, Data_set) + 1- f_R24(j,
↪ s, r_star_R24, Data_set)

TEC_vector.append(TEC_1)
j_vector.append(j)
s_vector.append(s)

# Búsqueda de j_star y s_star de la itracion 1:

TEC_df = pd.DataFrame({'TEC':TEC_vector, 'j':j_vector,
↪ 's':s_vector})

TEC_df_sorted = TEC_df.sort_values(by=['TEC'], axis=0,
↪ ascending=True, ignore_index=True)

s_star_vector.append( TEC_df_sorted.loc[0, 's'] )
j_star_vector.append( TEC_df_sorted.loc[0, 'j'] )
TEC_star_vector.append(TEC_df_sorted.loc[0, 'TEC'])

# OJO: s_star_vector[i] sera el s_star de la iteracion i+1 , para
↪ i=0,1,...
# OJO: j_star_vector[i] sera el j_star de la iteracion i+1 , para
↪ i=0,1,...

#####

# Condicion de parada:

obs_r14 = len( Data_set.loc[ (Data_set.iloc[:, j_star_vector[0] ]
↪ < s_star_vector[0]) & (Data_set.iloc[:, j_star_vector[1]] <
↪ s_star_vector[1]) & (Data_set.iloc[:, j_star_vector[3]] <
↪ s_star_vector[3]) , : ] )
obs_r24 = len( Data_set.loc[ (Data_set.iloc[:, j_star_vector[0] ]
↪ < s_star_vector[0]) & (Data_set.iloc[:, j_star_vector[1]] <
↪ s_star_vector[1]) & (Data_set.iloc[:, j_star_vector[3]] >=
↪ s_star_vector[3]) , : ] )

obs_r34 = len( Data_set.loc[ (Data_set.iloc[:, j_star_vector[0] ]
↪ < s_star_vector[0]) & (Data_set.iloc[:, j_star_vector[1]] >=
↪ s_star_vector[1]) , : ] )
obs_r44 = len( Data_set.loc[ (Data_set.iloc[:, j_star_vector[0] ]
↪ >= s_star_vector[0]) & (Data_set.iloc[:, j_star_vector[2]] <
↪ s_star_vector[2]) , : ] )
obs_r54 = len( Data_set.loc[ (Data_set.iloc[:, j_star_vector[0] ]
↪ >= s_star_vector[0]) & (Data_set.iloc[:, j_star_vector[2]] >=
↪ s_star_vector[2]) , : ] )

```

```

if(obs_r14 < k) | (obs_r24 < k) : # Si se cumple el criterio de
↳ parada

    print('El arbol final es el arbol con 3 Iteracion. Se ha
↳ cumplido el criterio de parada basado en numero minimo', k
↳ , 'de observaciones por rama')

    number_iterations = 4

    obs_ramas = [obs_r14, obs_r24, obs_r34 , obs_r44, obs_r54]

    #####

    return(number_iterations, j_star_vector, s_star_vector,
↳ TEC_star_vector, obs_ramas )

    #####

elif (obs_r14 >= k) & (obs_r24 >= k) : # No se cumple el criterio
↳ de parada

    print('Se ha generado el arbol mas grande permitido por el
↳ algoritmo (arbol con 4 Iteraciones)')

    # Aunque no se haya cummplido el criterio de parada como esta es
↳ la ultima Iteracion contemplada por el algoritmo,
    # debemos calcular las metricas finales para que sean escupidas
↳ por el algoritmo.

    number_iterations=4

    obs_ramas = [obs_r14, obs_r24, obs_r34, obs_r44, obs_r54]

    pass

    #####

return( number_iterations, j_star_vector, s_star_vector,
↳ TEC_star_vector, obs_ramas )

```

Definimos una funcion para obtener predicciones de la respuesta:

```
def classification_tree_PREDICTIONS(Data_set, Y_categories,
    ↪ number_iterations, j_star_vector, s_star_vector, obs_ramas, x_new):

    if number_iterations == 1 :

        obs_r11 = obs_ramas[0]
        obs_r21 = obs_ramas[1]

        ### Prediccion:

        # Si x_new cae en R11

        if x_new[j_star_vector[0] - 1] < s_star_vector[0] : # Ojo: el
            ↪ elemento j-1 de x_new es el valor de X_{j} , con
            ↪ j=1,2,...

            def f_R11(r, Data_set):

                cond_R11 = len(Data_set.loc[ (Data_set.iloc[:,
    ↪ j_star_vector[0]] < s_star_vector[0]) , : ] )

                if cond_R11 != 0 :

                    f_R11 = len( Data_set.loc[ (Data_set.iloc[:,
    ↪ j_star_vector[0]] < s_star_vector[0]) & (Data_set.loc[:, 'Y'] == r) ,
    ↪ : ] ) / cond_R11

                elif cond_R11 == 0 :

                    f_R11 = 0

                return f_R11

            # Busqueda de r_star_R11 :

            f_R11_r_vector = []

            for r in Y_categories : # Si Y tiene como categorias
                ↪ 0,1,2 --> Y_categories = range(0,3)

                f_R11_r_vector.append( f_R11(r , Data_set) )

            f_R11_df = pd.DataFrame({'r':Y_categories ,
    ↪ 'f_R11':f_R11_r_vector })
```

```

        f_R11_df_sorted = f_R11_df.sort_values(by=['f_R11'],
↪ axis=0, ascending=False, ignore_index=True)

        r_star_R11 = f_R11_df_sorted.loc[0, 'r']

        y_new_predict = r_star_R11


# Si x_new cae en r21

        elif x_new[j_star_vector[0] - 1] >= s_star_vector[0] :


            def f_R21(r, Data_set):

                cond_R21 = len(Data_set.loc[ (Data_set.iloc[:,
↪ j_star_vector[0]] >= s_star_vector[0]) , : ] )

                if cond_R21 != 0 :

                    f_R21 = len( Data_set.loc[ (Data_set.iloc[:,
↪ j_star_vector[0]] >= s_star_vector[0]) & (Data_set.loc[:, 'Y'] == r) ,
↪ : ] ) / cond_R21

                    elif cond_R21 == 0 :

                        f_R21 = 0

                    return f_R21


# Búsqueda de r_star_R21 :

        f_R21_r_vector = []

        for r in Y_categories : # Si Y tiene como categorias
↪ 0,1,2 --> Y_categories = range(0,3)

            f_R21_r_vector.append( f_R21(r , Data_set) )

        f_R21_df = pd.DataFrame({'r':Y_categories ,
↪ 'f_R21':f_R21_r_vector })

        f_R21_df_sorted = f_R21_df.sort_values(by=['f_R21'],
↪ axis=0, ascending=False, ignore_index=True)

        r_star_R21 = f_R21_df_sorted.loc[0, 'r']

        y_new_predict = r_star_R21


#####

```

```

if number_iterations == 2 :

    obs_r12 = obs_ramas[0]
    obs_r22 = obs_ramas[1]
    obs_r32 = obs_ramas[2]

### Prediccion:

# Si x_new cae en R12

if (x_new[j_star_vector[0] - 1] < s_star_vector[0]) &
↪ (x_new[j_star_vector[1] - 1] < s_star_vector[1]) : # Ojo:
↪ el elemento j-1 de x_new es el valor de X_{j} , con
↪ j=1,2,...

def f_R12(r, Data_set):

    cond_R12 = len( Data_set.loc[ (Data_set.iloc[:,
↪ j_star_vector[0]] < s_star_vector[0]) & (Data_set.iloc[:,
↪ j_star_vector[1]] < s_star_vector[1]) , : ] )

    if cond_R12 != 0 :

        f_R12 = len( Data_set.loc[ (Data_set.iloc[:,
↪ j_star_vector[0]] < s_star_vector[0]) & (Data_set.iloc[:,
↪ j_star_vector[1]] < s_star_vector[1]) & (Data_set.loc[:, 'Y'] == r) ,
↪ : ] ) / cond_R12

    elif cond_R12 == 0 :

        f_R12 = 0

# Busqueda de r_star_R12 :

f_R12_r_vector = []

for r in Y_categories : # Si Y tiene como categorias
↪ 0,1,2 --> Y_categories = range(0,3)

    f_R12_r_vector.append( f_R12(r , Data_set) )

f_R12_df = pd.DataFrame({'r':Y_categories ,
↪ 'f_R12':f_R12_r_vector })

f_R12_df_sorted = f_R12_df.sort_values(by=['f_R12'],
↪ axis=0, ascending=False, ignore_index=True)

```

```

r_star_R12 = f_R12_df_sorted.loc[0, 'r']

y_new_predict = r_star_R12

# Si x_new cae en R22

elif (x_new[j_star_vector[0] - 1] < s_star_vector[0]) &
↳ (x_new[j_star_vector[1] - 1] >= s_star_vector[1]) :

    def f_R22(r, Data_set):

        cond_R22 = len( Data_set.loc[ (Data_set.iloc[:,
↳ j_star_vector[0]] < s_star_vector[0]) & (Data_set.iloc[:,
↳ j_star_vector[1]] >= s_star_vector[1]) , : ] )

        if cond_R22 != 0 :

            f_R22 = len( Data_set.loc[ (Data_set.iloc[:,
↳ j_star_vector[0]] < s_star_vector[0]) & (Data_set.iloc[:,
↳ j_star_vector[1]] >= s_star_vector[1]) & (Data_set.loc[:, 'Y'] == r) ,
↳ : ] ) / cond_R22

        elif cond_R22 == 0 :

            f_R22 = 0

        return f_R22

# Búsqueda de r_star_R22 :

f_R22_r_vector = []

for r in Y_categories : # Si Y tiene como categorias
↳ 0,1,2 --> Y_categories = range(0,3)

    f_R22_r_vector.append( f_R22(r , Data_set) )

f_R22_df = pd.DataFrame({'r':Y_categories ,
↳ 'f_R22':f_R22_r_vector })

f_R22_df_sorted = f_R22_df.sort_values(by=['f_R22'],
↳ axis=0, ascending=False, ignore_index=True)

r_star_R22 = f_R22_df_sorted.loc[0, 'r']

```

```

y_new_predict = r_star_R22

# Si x_new cae en R32

elif (x_new[j_star_vector[0] - 1] >= s_star_vector[0]) :

    def f_R32(r, Data_set):

        cond_R32 = len( Data_set.loc[ (Data_set.iloc[:,
↪ j_star_vector[0]] >= s_star_vector[0]) , : ] )

        if cond_R32 != 0 :

            f_R32 = len( Data_set.loc[ (Data_set.iloc[:,
↪ j_star_vector[0]] >= s_star_vector[0]) & (Data_set.loc[:, 'Y'] == r) ,
↪ : ] ) / cond_R32

        elif cond_R32 == 0 :

            f_R32 = 0

        return f_R32

# Búsqueda de r_star_R32 :

f_R32_r_vector = []

for r in Y_categories : # Si Y tiene como categorias
↪ 0,1,2 --> Y_categories = range(0,3)

    f_R32_r_vector.append( f_R32(r , Data_set) )

    f_R32_df = pd.DataFrame({'r':Y_categories ,
↪ 'f_R32':f_R32_r_vector })

    f_R32_df_sorted = f_R22_df.sort_values(by=['f_R32'],
↪ axis=0, ascending=False, ignore_index=True)

    r_star_R32 = f_R32_df_sorted.loc[0, 'r']

y_new_predict = r_star_R32

if number_iterations == 3:

```



```

obs_r13 = obs_ramas[0]
obs_r23 = obs_ramas[1]
obs_r33 = obs_ramas[2]
obs_r43 = obs_ramas[3]

### Prediccion:

# Si x_new cae en R13

if (x_new[j_star_vector[0] - 1] < s_star_vector[0]) &
↪ (x_new[j_star_vector[1] - 1] < s_star_vector[1]) : # Ojo:
↪ el elemento j-1 de x_new es el valor de X_{j} , con
↪ j=1,2,...

def f_R13(r, Data_set):

    cond_R13 = len( Data_set.loc[ (Data_set.iloc[:,
↪ j_star_vector[0]] < s_star_vector[0]) & (Data_set.iloc[:,
↪ j_star_vector[1]] < s_star_vector[1]) , : ] )

    if cond_R13 != 0 :

        f_R13 = len( Data_set.loc[ (Data_set.iloc[:,
↪ j_star_vector[0]] >= s_star_vector[0]) & (Data_set.iloc[:,
↪ j_star_vector[1]] < s_star_vector[1]) & (Data_set.loc[:, 'Y'] == r) ,
↪ : ] ) / cond_R13

    elif cond_R13 == 0 :

        f_R13 = 0

    return f_R13

# Busqueda de r_star_R13

f_R13_r_vector = []

for r in Y_categories : # Si Y tiene como categorias
↪ 0,1,2 --> Y_categories = range(0,3)

    f_R13_r_vector.append( f_R13(r , Data_set) )

    f_R13_df = pd.DataFrame({'r':Y_categories ,
↪ 'f_R13':f_R13_r_vector })

    f_R13_df_sorted = f_R13_df.sort_values(by=['f_R13'],
↪ axis=0, ascending=False, ignore_index=True)

    r_star_R13 = f_R13_df_sorted.loc[0, 'r']

y_new_predict = r_star_R13

```

```

# Si x_new cae en R23

if (x_new[j_star_vector[0] - 1] < s_star_vector[0]) &
↳ (x_new[j_star_vector[1] - 1] >= s_star_vector[1]) : #
↳ Ojo: el elemento j-1 de x_new es el valor de X_{j} , con
↳ j=1,2,...

def f_R23(r, Data_set):

    cond_R23 = len( Data_set.loc[ (Data_set.iloc[:,
↳ j_star_vector[0]] < s_star_vector[0]) & (Data_set.iloc[:,
↳ j_star_vector[1]] >= s_star_vector[1]) , : ] )

    if cond_R23 != 0 :

        f_R23 = len( Data_set.loc[ (Data_set.iloc[:,
↳ j_star_vector[0]] < s_star_vector[0]) & (Data_set.iloc[:,
↳ j_star_vector[1]] >= s_star_vector[1]) & (Data_set.loc[:, 'Y'] == r) ,
↳ : ] ) / cond_R23

    elif cond_R23 == 0 :

        f_R23 = 0

    return f_R23

# Búsqueda de r_star_R23

f_R23_r_vector = []

for r in Y_categories : # Si Y tiene como categorias
↳ 0,1,2 --> Y_categories = range(0,3)

    f_R23_r_vector.append( f_R23( r , Data_set) )

f_R23_df = pd.DataFrame({'r':Y_categories ,
↳ 'f_R23':f_R23_r_vector })

f_R23_df_sorted = f_R23_df.sort_values(by=['f_R23'],
↳ axis=0, ascending=False, ignore_index=True)

r_star_R23 = f_R23_df_sorted.loc[0, 'r']

y_new_predict = r_star_R23

```

```

# Si x_new cae en R33

if (x_new[j_star_vector[0] - 1] >= s_star_vector[0]) &
↳ (x_new[j_star_vector[2] - 1] < s_star_vector[2]) : # Ojo:
↳ el elemento j-1 de x_new es el valor de X_{j} , con
↳ j=1,2,...

def f_R33(r, Data_set):

    cond_R33 = len( Data_set.loc[ (Data_set.iloc[:,
↳ j_star_vector[0]] >= s_star_vector[0]) & (Data_set.iloc[:,
↳ j_star_vector[2]] < s_star_vector[2]) , : ] )

    if cond_R33 != 0 :

        f_R33 = len( Data_set.loc[ (Data_set.iloc[:,
↳ j_star_vector[0]] >= s_star_vector[0]) & (Data_set.iloc[:,
↳ j_star_vector[2]] < s_star_vector[2]) & (Data_set.loc[:, 'Y'] == r) ,
↳ : ] ) / cond_R33

    elif cond_R33 == 0 :

        f_R33 = 0

    return f_R33

# Búsqueda de r_star_R33

f_R33_r_vector = []

for r in Y_categories : # Si Y tiene como categorias
↳ 0,1,2 --> Y_categories = range(0,3)

    f_R33_r_vector.append( f_R33( r , Data_set) )

f_R33_df = pd.DataFrame({'r':Y_categories ,
↳ 'f_R33':f_R33_r_vector })

f_R33_df_sorted = f_R33_df.sort_values(by=['f_R33'],
↳ axis=0, ascending=False, ignore_index=True)

r_star_R33 = f_R33_df_sorted.loc[0, 'r']

y_new_predict = r_star_R33

# Si x_new cae en R43

elif (x_new[j_star_vector[0] - 1] >= s_star_vector[0]) &
↳ (x_new[j_star_vector[2] - 1] >= s_star_vector[2]) :

```

```

def f_R43(r, Data_set):

    cond_R43 = len( Data_set.loc[ (Data_set.iloc[:,
↪ j_star_vector[0]] >= s_star_vector[0]) & (Data_set.iloc[:,
↪ j_star_vector[2]] >= s_star_vector[2]) , : ] )

    if cond_R43 != 0 :

        f_R43 = len( Data_set.loc[ (Data_set.iloc[:,
↪ j_star_vector[0]] >= s_star_vector[0]) & (Data_set.iloc[:,
↪ j_star_vector[2]] >= s_star_vector[2]) & (Data_set.loc[:, 'Y'] == r) ,
↪ : ] ) / cond_R43

    elif cond_R43 == 0 :

        f_R43 = 0

    return f_R43

# Búsqueda de r_star_R33

f_R43_r_vector = []

for r in Y_categories : # Si Y tiene como categorias
↪ 0,1,2 --> Y_categories = range(0,3)

    f_R43_r_vector.append( f_R43( r , Data_set) )

    f_R43_df = pd.DataFrame({'r':Y_categories ,
↪ 'f_R43':f_R43_r_vector })

    f_R43_df_sorted = f_R43_df.sort_values(by=['f_R43'],
↪ axis=0, ascending=False, ignore_index=True)

    r_star_R43 = f_R43_df_sorted.loc[0, 'r']

    y_new_predict = r_star_R43

if number_iterations == 4 :

    obs_r14 = obs_ramas[0]
    obs_r24 = obs_ramas[1]
    obs_r34 = obs_ramas[2]
    obs_r44 = obs_ramas[3]
    obs_r54 = obs_ramas[4]

```

```

### Prediccion:

# Si x_new cae en R14

if (x_new[j_star_vector[0] - 1] < s_star_vector[0]) &
  ↪ (x_new[j_star_vector[1] - 1] < s_star_vector[1]) &
  ↪ (x_new[j_star_vector[3] - 1] < s_star_vector[3]) : # Ojo:
  ↪ el elemento j-1 de x_new es el valor de X_{j} , con
  ↪ j=1,2,...

def f_R14(r, Data_set):

    cond_R14 = len( Data_set.loc[ (Data_set.iloc[:,
  ↪ j_star_vector[0]] < s_star_vector[0]) & (Data_set.iloc[:,
  ↪ j_star_vector[1]] < s_star_vector[1]) & (Data_set.iloc[:,
  ↪ j_star_vector[3]] < s_star_vector[3]) , : ] )

    if cond_R14 != 0 :

        f_R14 = len( Data_set.loc[ (Data_set.iloc[:,
  ↪ j_star_vector[0]] < s_star_vector[0]) & (Data_set.iloc[:,
  ↪ j_star_vector[1]] < s_star_vector[1]) & (Data_set.iloc[:,
  ↪ j_star_vector[3]] < s_star_vector[3]) & (Data_set.loc[:, 'Y'] == r) ,
  ↪ : ] ) / cond_R14

    elif cond_R14 == 0 :

        f_R14 = 0

    return f_R14

# Busqueda de r_star_R14

f_R14_r_vector = []

for r in Y_categories : # Si Y tiene como categorias
  ↪ 0,1,2 --> Y_categories = range(0,3)

    f_R14_r_vector.append( f_R14(r , Data_set) )

f_R14_df = pd.DataFrame({'r':Y_categories ,
  ↪ 'f_R14':f_R14_r_vector })

f_R14_df_sorted = f_R14_df.sort_values(by=['f_R14'],
  ↪ axis=0, ascending=False, ignore_index=True)

r_star_R14 = f_R14_df_sorted.loc[0, 'r']

y_new_predict = r_star_R14

```

```

# Si x_new cae en R24

if (x_new[j_star_vector[0] - 1] < s_star_vector[0]) &
↪ (x_new[j_star_vector[1] - 1] < s_star_vector[1]) &
↪ (x_new[j_star_vector[3] - 1] >= s_star_vector[3]) : #
↪ Ojo: el elemento j-1 de x_new es el valor de X_{j} , con
↪ j=1,2,...

def f_R24(r, Data_set):

    cond_R24 = len( Data_set.loc[ (Data_set.iloc[:,
↪ j_star_vector[0]] < s_star_vector[0]) & (Data_set.iloc[:,
↪ j_star_vector[1]] < s_star_vector[1]) & (Data_set.iloc[:,
↪ j_star_vector[3]] >= s_star_vector[3]) , : ] )

    if cond_R24 != 0 :

        f_R24 = len( Data_set.loc[ (Data_set.iloc[:,
↪ j_star_vector[0]] < s_star_vector[0]) & (Data_set.iloc[:,
↪ j_star_vector[1]] < s_star_vector[1]) & (Data_set.iloc[:,
↪ j_star_vector[3]] >= s_star_vector[3]) & (Data_set.loc[:, 'Y'] == r) ,
↪ : ] ) / cond_R24

    elif cond_R24 == 0 :

        f_R24 = 0

    return f_R24

# Búsqueda de r_star_R24

f_R24_r_vector = []

for r in Y_categories : # Si Y tiene como categorias
↪ 0,1,2 --> Y_categories = range(0,3)

    f_R24_r_vector.append( f_R24(r , Data_set) )

f_R24_df = pd.DataFrame({'r':Y_categories ,
↪ 'f_R24':f_R24_r_vector })

f_R24_df_sorted = f_R24_df.sort_values(by=['f_R24'],
↪ axis=0, ascending=False, ignore_index=True)

r_star_R24 = f_R24_df_sorted.loc[0, 'r']

y_new_predict = r_star_R24

```

```

# Si x_new cae en R34

if (x_new[j_star_vector[0] - 1] < s_star_vector[0]) &
  ↪ (x_new[j_star_vector[1] - 1] >= s_star_vector[1]) : #
  ↪ Ojo: el elemento j-1 de x_new es el valor de X_{j} , con
  ↪ j=1,2,...

def f_R34(r, Data_set):

    cond_R34 = len( Data_set.loc[ (Data_set.iloc[:,
  ↪ j_star_vector[0]] < s_star_vector[0]) & (Data_set.iloc[:,
  ↪ j_star_vector[1]] >= s_star_vector[1]) , : ] )

    if cond_R34 != 0 :

        f_R34 = len( Data_set.loc[ (Data_set.iloc[:,
  ↪ j_star_vector[0]] < s_star_vector[0]) & (Data_set.iloc[:,
  ↪ j_star_vector[1]] >= s_star_vector[1]) & (Data_set.loc[:, 'Y'] == r) ,
  ↪ : ] ) / cond_R34

    elif cond_R34 == 0 :

        f_R34 = 0

    return f_R34

# Búsqueda de r_star_R34

f_R34_r_vector = []

for r in Y_categories : # Si Y tiene como categorias
  ↪ 0,1,2 --> Y_categories = range(0,3)

    f_R34_r_vector.append( f_R34(r , Data_set) )

    f_R34_df = pd.DataFrame({'r':Y_categories ,
  ↪ 'f_R34':f_R34_r_vector })

    f_R34_df_sorted = f_R34_df.sort_values(by=['f_R34'],
  ↪ axis=0, ascending=False, ignore_index=True)

    r_star_R34 = f_R34_df_sorted.loc[0, 'r']

    y_new_predict = r_star_R34

# Si x_new cae en R44

```

```

elif (x_new[j_star_vector[0] - 1] >= s_star_vector[0]) &
↳ (x_new[j_star_vector[2] - 1] < s_star_vector[2]) :

def f_R44(r, Data_set):

    cond_R44 = len( Data_set.loc[ (Data_set.iloc[:,
↳ j_star_vector[0]] >= s_star_vector[0]) & (Data_set.iloc[:,
↳ j_star_vector[2]] < s_star_vector[2]) , : ] )

    if cond_R44 != 0 :

        f_R44 = len( Data_set.loc[ (Data_set.iloc[:,
↳ j_star_vector[0]] >= s_star_vector[0]) & (Data_set.iloc[:,
↳ j_star_vector[2]] < s_star_vector[2]) & (Data_set.loc[:, 'Y'] == r) ,
↳ : ] ) / cond_R44

    elif cond_R44 == 0 :

        f_R44 = 0

    return f_R44

# Búsqueda de r_star_R44

f_R44_r_vector = []

for r in Y_categories : # Si Y tiene como categorias
↳ 0,1,2 --> Y_categories = range(0,3)

    f_R44_r_vector.append( f_R44(r , Data_set) )

f_R44_df = pd.DataFrame({'r':Y_categories ,
↳ 'f_R44':f_R44_r_vector })

f_R44_df_sorted = f_R44_df.sort_values(by=['f_R44'],
↳ axis=0, ascending=False, ignore_index=True)

r_star_R44 = f_R44_df_sorted.loc[0, 'r']

y_new_predict = r_star_R44

# Si x_new cae en R54

elif (x_new[j_star_vector[0] - 1] >= s_star_vector[0]) &
↳ (x_new[j_star_vector[2] - 1] >= s_star_vector[2]) :

def f_R54(r, Data_set):

```



```

        cond_R54 = len( Data_set.loc[ (Data_set.iloc[:,
→ j_star_vector[0]] >= s_star_vector[0]) & (Data_set.iloc[:,
→ j_star_vector[2]] >= s_star_vector[2]) , : ] )

        if cond_R54 != 0 :

            f_R54 = len( Data_set.loc[ (Data_set.iloc[:,
→ j_star_vector[0]] >= s_star_vector[0]) & (Data_set.iloc[:,
→ j_star_vector[2]] >= s_star_vector[2]) & (Data_set.loc[:, 'Y'] == r) ,
→ : ] ) / cond_R44

            elif cond_R54 == 0 :

                f_R54 = 0

            return f_R54

# Búsqueda de r_star_R54

f_R54_r_vector = []

for r in Y_categories : # Si Y tiene como categorias
→ 0,1,2 --> Y_categories = range(0,3)

    f_R54_r_vector.append( f_R54(r , Data_set) )

    f_R54_df = pd.DataFrame({'r':Y_categories ,
→ 'f_R54':f_R54_r_vector })

    f_R54_df_sorted = f_R54_df.sort_values(by=['f_R54'],
→ axis=0, ascending=False, ignore_index=True)

    r_star_R54 = f_R54_df_sorted.loc[0, 'r']

    y_new_predict = r_star_R54

return(y_new_predict)

```

4.5.4 Testeo del algoritmo de arbol de clasificacion creado en Python

```
import numpy as np
import pandas as pd
```

```
Data_Python = Data_Python.iloc[:, 0:11]
```

```
Data_Python.head()
```

	Age	Gender	Total_Bilirubin	Direct_Bilirubin	Alkaline_Phosphotase	\
0	65	0.0	0.7	0.1	187	
1	62	1.0	10.9	5.5	699	
2	62	1.0	7.3	4.1	490	
3	58	1.0	1.0	0.4	182	
4	72	1.0	3.9	2.0	195	

	Alamine_Aminotransferase	Aspartate_Aminotransferase	Total_Protiens	\
0	16	18	6.8	
1	64	100	7.5	
2	60	68	7.0	
3	14	20	6.8	
4	27	59	7.3	

	Albumin	Albumin_and_Globulin_Ratio	Diseased
0	3.3	0.90	0.0
1	3.2	0.74	0.0
2	3.3	0.89	0.0
3	3.4	1.00	0.0
4	2.4	0.40	0.0

Transformaciones necesarias para poder aplicar sobre este data-set nuestro algoritmo:

- Tranformar las variables categoricas a type=Object en Python (ya hecho en la parte de EDA)
- Llamar 'Y' a la variable respuesta (y hacer que sea la primera columna del data-set)
- La variable respuesta tiene que ser la primera columna (columna cero en Python)

Renombramos la variable respuesta y la ponemos como primera columna:

```
Data_Python.insert(0, 'Y', Data_Python['Diseased'])
```

```
Data_Python = Data_Python.drop(['Diseased'], axis=1)
```

```
Data_Python.head()
```

	Y	Age	Gender	Total_Bilirubin	Direct_Bilirubin	Alkaline_Phosphotase
0	0.0	65	0.0	0.7	0.1	187
1	0.0	62	1.0	10.9	5.5	699
2	0.0	62	1.0	7.3	4.1	490
3	0.0	58	1.0	1.0	0.4	182
4	0.0	72	1.0	3.9	2.0	195

	Alamine_Aminotransferase	Aspartate_Aminotransferase	Total_Protiens
0	16	18	6.8
1	64	100	7.5
2	60	68	7.0
3	14	20	6.8
4	27	59	7.3

	Albumin	Albumin_and_Globulin_Ratio
0	3.3	0.90
1	3.2	0.74
2	3.3	0.89
3	3.4	1.00
4	2.4	0.40

Ahora dividimos el data-set en train y test :

```
Data_Python_Train = Data_Python.sample(frac=0.8, replace=False,
→ weights=None, random_state=666, axis=None, ignore_index=False)
```

```
Data_Python_Test = Data_Python.drop( Data_Python_Train.index , )
```

```
## TEST
```

```
X_test = Data_Python_Test.loc[: , Data_Python_Test.columns != 'Y']
Y_test = Data_Python_Test.loc[: , 'Y']
```

```
Data_Test = pd.concat([Y_test , X_test], axis=1)
```

```
#####
```

```
## TRAIN
```

```
X_train = Data_Python_Train.loc[: , Data_Python_Train.columns != 'Y']
Y_train = Data_Python_Train.loc[: , 'Y']
```

```
Data_Train = pd.concat([Y_train , X_train], axis=1)
```

Testeamos la funcion creada `classification_tree`

```
number_iterations, j_star_vector, s_star_vector, TEC_star_vector,  
↪ obs_ramas = classification_tree(Data_set=Data_Train,  
↪ iterations_vector=range(1,5), k=20, Y_categories=range(0,2))
```

El arbol final es el arbol con 1 Iteracion. Se ha cumplido el criterio de parada basado e

Los predictores seleccionados en cada iteración son:

```
j_star_vector
```

```
[1]
```

Los puntos de corte seleccionados en cada iteración son:

```
s_star_vector
```

```
[6.5]
```

El TEC óptimo obtenido en cada iteración es:

```
TEC_star_vector
```

```
[0.2764578833693304]
```

El número de observaciones por rama es:

```
obs_ramas
```

```
[3, 463]
```

4.5.5 Validacion Simple con funcion de validación propia y funcion Classification Tree propia

```
def Simple_Validation_Classification(Data_Test, X_train, Y_train, Y_test)
↪ :

#####

from joblib import Parallel, delayed
import multiprocessing

n_jobs = multiprocessing.cpu_count()

#####

number_iterations, j_star_vector, s_star_vector, TEC_star_vector,
↪ obs_ramas = classification_tree(Data_set=Data_Train,
↪ iterations_vector=range(1,5), k=20, Y_categories=range(0,2))

Y_categories = range(0,2)

def prediction(i, Data_Test, X_train, Y_train ):

    x_new = Data_Test.iloc[ i , range(1, Data_Test.shape[1])]

    y_new_predict = classification_tree_PREDICTIONS(Data_Test,
↪ Y_categories ,number_iterations, j_star_vector, s_star_vector,
↪ obs_ramas, x_new)

    return(y_new_predict)

#####

y_predictions_vector = []

# Paralelizamos el siguiente bucle for :

# for i in range(0, len(Data_Test)):

    # y_new_predict = prediction(i, Data_Test, X_train, Y_train )

    # y_predictions_vector.append( y_new_predict )

y_predictions_vector = Parallel(n_jobs=n_jobs)( delayed(prediction)(
↪ i, Data_Test, X_train, Y_train) for i in range(0, len(Data_Test)) )

#####

TEC = ( y_predictions_vector != Y_test ).sum() / len(Y_test)
```

```
return(y_predictions_vector , TEC)
```

```
y_predictions_vector , TEC_classification_tree_own_function =  
↪ Simple_Validation_Classification(Data_Test, X_train, Y_train, Y_test)
```

El arbol final es el arbol con 1 Iteracion. Se ha cumplido el criterio de parada basado e

```
TEC_classification_tree_own_function
```

```
0.3076923076923077
```

4.5.6 Algoritmo de creacion propia con Gini

```
def classification_tree_Gini(Data_set, iterations_vector, k, Y_categories)
    ↪ :

    # POR AHORA SOLO GENERA 4 ITERACIONES EN EL ARBOL --> iterations_vector =
    ↪ range(1,5) como mucho ([1,2,3,4])

    # Data_set tiene que ser tal que, su columna 0 sea Y, y la j-esima sea la
    ↪ variable Xj , para j=1,...,p

    # Si se quiere que el arbol tenga como mucho 3 iteraciones -->
    ↪ iterations_vector = range(1,4) = [1,2,3]

    # Si Y tiene como categorias 0,1,2 --> Y_categories = range(0,3)

    # k = numero de observaciones minimas por rama del arbol --> criterio de
    ↪ parada

    #####

    def s_values(j, Data_set):

        s_values = []

        if (Data_set.dtypes[j] != 'float64') & (Data_set.dtypes[j] !=
            ↪ 'int64') : # Para las variables categoricas s_value sera
            ↪ simplemente su rango.

            s_values = Data_set.sort_values(by=[Data_set.columns[j]],
            ↪ axis=0, ascending=True, ignore_index=True).iloc[:, j].unique()

        elif (Data_set.dtypes[j] == 'float64') | (Data_set.dtypes[j] ==
            ↪ 'int64') :

            Xj_sorted = Data_set.sort_values(by=[Data_set.columns[j]],
            ↪ axis=0, ascending=True, ignore_index=True).iloc[:, j].unique()

            for i in range(0, len(Xj_sorted)-1):

                s_values.append( (Xj_sorted[i] + Xj_sorted[i+1] ) / 2 )

        return s_values

    #####

    ## ITERACION 1

    if iterations_vector[0] == 1 : # nacimiento del arbol
```

```
#####

def f_R11(j, s, r, Data_set):

    # Verificando si se cumplen las siguientes dos condiciones
    ↪ conjuntamente nos garantizamos que todas las ramas tienen
    ↪ observaciones de train.
    # Es decir, no habrá ninguna rama sin observaciones de train
    ↪ que caigan en ella.

    cond_R11 = len(Data_set.loc[ (Data_set.iloc[:, j] < s) , : ] )

    if cond_R11 != 0 :

        f_R11 = len( Data_set.loc[ (Data_set.iloc[:, j] < s) &
    ↪ (Data_set.loc[:, 'Y'] == r) , : ] ) / len( Data_set.loc[
    ↪ (Data_set.iloc[:, j] < s) , : ] )

    elif cond_R11 == 0 :

        f_R11 = 0

    return f_R11

#####

def f_R21(j, s, r, Data_set):

    cond_R21 = len(Data_set.loc[ (Data_set.iloc[:, j] >= s) , : ]
    ↪ )

    if cond_R21 != 0 :

        f_R21 = len( Data_set.loc[ (Data_set.iloc[:, j] >= s) &
    ↪ (Data_set.loc[:, 'Y'] == r) , : ] ) / len( Data_set.loc[
    ↪ (Data_set.iloc[:, j] >= s) , : ] )

    elif cond_R21 == 0 :

        f_R21 = 0

    return f_R21

#####

G_vector = []
j_vector = []
```



```

s_vector = []

j_star_vector = []
s_star_vector = []
G_star_vector = []

for j in range(1, Data_set.shape[1]) :

    for s in s_values(j, Data_set) :

        f_R11_r_vector = []
        f_R21_r_vector = []

        for r in Y_categories: # Si Y tiene como categorias 0,1,2
            ↪ --> Y_categories = range(0,3)

            f_R11_r_vector.append( f_R11(j, s, r , Data_set)*(1 -
↪ f_R11(j, s, r , Data_set)) )

            f_R21_r_vector.append( f_R21(j, s, r , Data_set)*(1 -
↪ f_R21(j, s, r , Data_set)) )

        # Calculo de G_1 para la combinacion (j, s) dada:

        G_R11 = sum(f_R11_r_vector)
        G_R21 = sum(f_R21_r_vector)

        G_1 = G_R11 + G_R21

        G_vector.append(G_1)
        j_vector.append(j)
        s_vector.append(s)

    # Búsqueda de j_star y s_star de la itracion 1:

    G_df = pd.DataFrame({'G':G_vector, 'j':j_vector, 's':s_vector})

    G_df_sorted = G_df.sort_values(by=['G'], axis=0, ascending=True,
↪ ignore_index=True)

    s_star_vector.append( G_df_sorted.loc[0, 's'] )
    j_star_vector.append( G_df_sorted.loc[0, 'j'] )
    G_star_vector.append(G_df_sorted.loc[0, 'G'])

    # OJO: s_star_vector[i] sera el s_star de la iteracion i+1 , para
    ↪ i=0,1,...
    # OJO: j_star_vector[i] sera el j_star de la iteracion i+1 , para
    ↪ i=0,1,...

#####

```

```

    # Condicion de parada:

    obs_r11 = len( Data_set.loc[ Data_set.iloc[:, j_star_vector[0] ] <
↪ s_star_vector[0] , : ] )
    obs_r21 = len( Data_set.loc[ Data_set.iloc[:, j_star_vector[0] ]
↪ >= s_star_vector[0] , : ] )

    if(obs_r11 < k) | (obs_r21 < k) : # Si se cumple el criterio de
↪ parada

        print('El arbol final es el arbol con 1 Iteracion. Se ha
↪ cumplido el criterio de parada basado en numero minimo', k
↪ , 'de observaciones por rama')

        number_iterations=1

        obs_ramas = [obs_r11 , obs_r21]

        #####

        return(number_iterations, j_star_vector, s_star_vector,
↪ G_star_vector, obs_ramas )

        #####

    elif (obs_r11 >= k) & (obs_r21 >= k) : # No se cumple el criterio
↪ de parada

        pass

#####

## ITERACION 2 ..... POR MODIFICAR !! .....

    if iterations_vector[1] == 2 : # Desarrollar nodo R1 de la 1ª
↪ iteracion

        #####

        def f_R12(j, s, r, Data_set):

            # Verificando si se cumplen las siguientes dos condiciones
↪ conjuntamente nos garantizamos que todas las ramas tienen
↪ observaciones de train.
            # Es decir, no habra ninguna rama sin observaciones de train
↪ que caigan en ella.

            cond_R12 = len( Data_set.loc[ (Data_set.iloc[:,
↪ j_star_vector[0]] < s_star_vector[0]) & (Data_set.iloc[:, j] < s) , :
↪ ] )

```

```

        if cond_R12 != 0 :

            f_R12 = len( Data_set.loc[ (Data_set.iloc[:,
↪ j_star_vector[0]] < s_star_vector[0]) & (Data_set.iloc[:, j] < s) &
↪ (Data_set.loc[:, 'Y'] == r) , : ] ) / cond_R12

        elif cond_R12 == 0 :

            f_R12 = 0

        return f_R12

#####

def f_R22(j, s, r, Data_set):

    # Verificando si se cumplen las siguientes dos condiciones
    ↪ conjuntamente nos garantizamos que todas las ramas tienen
    ↪ observaciones de train.
    # Es decir, no habra ninguna rama sin observaciones de train
    ↪ que caigan en ella.

    cond_R22 = len( Data_set.loc[ (Data_set.iloc[:,
↪ j_star_vector[0]] < s_star_vector[0]) & (Data_set.iloc[:, j] >= s) , :
↪ ] )

    if cond_R22 != 0 :

        f_R22 = len( Data_set.loc[ (Data_set.iloc[:,
↪ j_star_vector[0]] < s_star_vector[0]) & (Data_set.iloc[:, j] >= s) &
↪ (Data_set.loc[:, 'Y'] == r) , : ] ) / cond_R22

    elif cond_R22 == 0 :

        f_R22 = 0

    return f_R22

#####

G_vector = []
j_vector = []
s_vector = []

for j in range(1, Data_set.shape[1]) :

```

```

for s in s_values(j, Data_set) :

    # Búsqueda de r_star_R11 :

    f_R12_r_vector = []
    f_R22_r_vector = []

    for r in Y_categories : # Si Y tiene como categorias
        ↪ 0,1,2 --> Y_categories = range(0,3)

        f_R12_r_vector.append( f_R12(j, s, r , Data_set)*(1 -
↪ f_R12(j, s, r , Data_set)) )

        f_R22_r_vector.append( f_R22(j, s, r , Data_set)*(1 -
↪ f_R22(j, s, r , Data_set)))

    # Calculo de G_2 para la combinacion (j, s) dada:

    G_R12 = sum(f_R12_r_vector)
    G_R22 = sum(f_R22_r_vector)

    G_2 = G_R12 + G_R22

    G_vector.append(G_2)
    j_vector.append(j)
    s_vector.append(s)

    # Búsqueda de j_star y s_star de la itracion 1:

    G_df = pd.DataFrame({'G':G_vector, 'j':j_vector, 's':s_vector})

    G_df_sorted = G_df.sort_values(by=['G'], axis=0, ascending=True,
↪ ignore_index=True)

    s_star_vector.append( G_df_sorted.loc[0, 's'] )
    j_star_vector.append( G_df_sorted.loc[0, 'j'] )
    G_star_vector.append(G_df_sorted.loc[0, 'G'])

    # OJO: s_star_vector[i] sera el s_star de la iteracion i+1 , para
    ↪ i=0,1,...
    # OJO: j_star_vector[i] sera el j_star de la iteracion i+1 , para
    ↪ i=0,1,...

    #####

    # Condicion de parada:

    obs_r12 = len( Data_set.loc[ (Data_set.iloc[:, j_star_vector[0] ]
↪ < s_star_vector[0]) & (Data_set.iloc[:, j_star_vector[1]] <
↪ s_star_vector[1]) , : ] )

```

```

        obs_r22 = len( Data_set.loc[ (Data_set.iloc[:, j_star_vector[0] ]
↪ < s_star_vector[0]) & (Data_set.iloc[:, j_star_vector[1]] >=
↪ s_star_vector[1]) , : ] )
        obs_r32 = len( Data_set.loc[ (Data_set.iloc[:, j_star_vector[0] ]
↪ >= s_star_vector[0]) , : ] )

        if(obs_r12 < k) | (obs_r22 < k) : # Si se cumple el criterio de
↪ parada

        print('El arbol final es el arbol con 2 Iteracion. Se ha
↪ cumplido el criterio de parada basado en numero minimo', k
↪ , 'de observaciones por rama')

        number_iterations=2

        obs_ramas = [obs_r12 , obs_r22, obs_r32]

        #####

        return(number_iterations, j_star_vector, s_star_vector,
↪ G_star_vector, obs_ramas )

        #####

    elif (obs_r12 >= k) & (obs_r22 >= k) : # No se cumple el criterio
↪ de parada

        pass

#####

## ITERACION 3

if iterations_vector[2] == 3 : # Desarrollar nodo R2 de la 1ª
↪ iteracion --> considerar j_star_vector[0] y s_star_vector[0] (1ª
↪ iteracion) y >= (R2)

        #####

        def f_R33(j, s, r, Data_set):

            # Verificando si se cumplen las siguientes dos condiciones
            ↪ conjuntamente nos garantizamos que todas las ramas tienen
            ↪ observaciones de train.
            # Es decir, no habra ninguna rama sin observaciones de train
            ↪ que caigan en ella.

            cond_R33 = len( Data_set.loc[ (Data_set.iloc[:,
↪ j_star_vector[0]] >= s_star_vector[0]) & (Data_set.iloc[:, j] < s) , :
↪ ] )

```

```

        if cond_R33 != 0 :

            f_R33 = len( Data_set.loc[ (Data_set.iloc[:,
↪ j_star_vector[0]] >= s_star_vector[0]) & (Data_set.iloc[:, j] < s) &
↪ (Data_set.loc[:, 'Y'] == r) , : ] ) / cond_R33

        elif cond_R33 == 0 :

            f_R33 = 0

        return f_R33

#####

def f_R43(j, s, r, Data_set):

    # Verificando si se cumplen las siguientes dos condiciones
    ↪ conjuntamente nos garantizamos que todas las ramas tienen
    ↪ observaciones de train.
    # Es decir, no habra ninguna rama sin observaciones de train
    ↪ que caigan en ella.

    cond_R43 = len( Data_set.loc[ (Data_set.iloc[:,
↪ j_star_vector[0]] >= s_star_vector[0]) & (Data_set.iloc[:, j] >= s) ,
↪ : ] )

    if cond_R43 != 0 :

        f_R43 = len( Data_set.loc[ (Data_set.iloc[:,
↪ j_star_vector[0]] >= s_star_vector[0]) & (Data_set.iloc[:, j] >= s) &
↪ (Data_set.loc[:, 'Y'] == r) , : ] ) / cond_R43

    elif cond_R43 == 0 :

        f_R43 = 0

    return f_R43

#####

G_vector = []
j_vector = []
s_vector = []

for j in range(1, Data_set.shape[1]) :

```

```

        for s in s_values(j, Data_set) :

            f_R33_r_vector = []
            f_R43_r_vector = []

            for r in Y_categories : # Si Y tiene como categorias
                ↪ 0,1,2 --> Y_categories = range(0,3)

                f_R33_r_vector.append( f_R33(j, s, r , Data_set)*(1 -
↪ f_R33(j, s, r , Data_set)) )

                f_R43_r_vector.append( f_R43(j, s, r , Data_set)*(1 -
↪ f_R43(j, s, r , Data_set)) )

            # Calculo de G_3 para la combinacion (j, s) dada:

            G_R33 = sum(f_R33_r_vector)
            G_R43 = sum(f_R43_r_vector)

            G_3 = G_R33 + G_R43

            G_vector.append(G_3)
            j_vector.append(j)
            s_vector.append(s)

        # Búsqueda de j_star y s_star de la itracion 1:

        G_df = pd.DataFrame({'G':G_vector, 'j':j_vector, 's':s_vector})

        G_df_sorted = G_df.sort_values(by=['G'], axis=0, ascending=True,
↪ ignore_index=True)

        s_star_vector.append( G_df_sorted.loc[0, 's'] )
        j_star_vector.append( G_df_sorted.loc[0, 'j'] )
        G_star_vector.append(G_df_sorted.loc[0, 'G'])

        # OJO: s_star_vector[i] sera el s_star de la iteracion i+1 , para
        ↪ i=0,1,...
        # OJO: j_star_vector[i] sera el j_star de la iteracion i+1 , para
        ↪ i=0,1,...

        #####

        # Condicion de parada:

        obs_r13 = len( Data_set.loc[ (Data_set.iloc[:, j_star_vector[0] ]
↪ < s_star_vector[0]) & (Data_set.iloc[:, j_star_vector[1]] <
↪ s_star_vector[1]) , : ] )

```

```

        obs_r23 = len( Data_set.loc[ (Data_set.iloc[:, j_star_vector[0] ]
↪ < s_star_vector[0]) & (Data_set.iloc[:, j_star_vector[1]] >=
↪ s_star_vector[1]) , : ] )

        obs_r33 = len( Data_set.loc[ (Data_set.iloc[:, j_star_vector[0] ]
↪ >= s_star_vector[0]) & (Data_set.iloc[:, j_star_vector[2]] <
↪ s_star_vector[2]) , : ] )
        obs_r43 = len( Data_set.loc[ (Data_set.iloc[:, j_star_vector[0] ]
↪ >= s_star_vector[0]) & (Data_set.iloc[:, j_star_vector[2]] >=
↪ s_star_vector[2]) , : ] )

    if(obs_r33 < k) | (obs_r43 < k) : # Si se cumple el criterio de
↪ parada

        print('El arbol final es el arbol con 3 Iteracion. Se ha
↪ cumplido el criterio de parada basado en numero minimo', k
↪ , 'de observaciones por rama')

        number_iterations = 3

        obs_ramas = [obs_r13, obs_r23, obs_r33 , obs_r43]

        #####

        return(number_iterations, j_star_vector, s_star_vector,
↪ G_star_vector, obs_ramas )

        #####

    elif (obs_r33 >= k) & (obs_r43 >= k) : # No se cumple el criterio
↪ de parada

        pass

    #####

    ## ITERACION 4

    if iterations_vector[3] == 4 :

        #####

        #####

        def f_R14(j, s, r, Data_set):

            # Verificando si se cumplen las siguientes dos condiciones
            ↪ conjuntamente nos garantizamos que todas las ramas tienes
            ↪ observaciones de train.

```



```

        # Es decir, no habra ninguna rama sin observaciones de train
        ↪ que caigan en ella.

        cond_R14 = len( Data_set.loc[ (Data_set.iloc[:,
↪ j_star_vector[0]] < s_star_vector[0]) & (Data_set.iloc[:,
↪ j_star_vector[1]] < s_star_vector[1]) & (Data_set.iloc[:, j] < s) , :
↪ ] )

        if cond_R14 != 0 :

            f_R14 = len( Data_set.loc[ (Data_set.iloc[:,
↪ j_star_vector[0]] < s_star_vector[0]) & (Data_set.iloc[:,
↪ j_star_vector[1]] < s_star_vector[1]) & (Data_set.iloc[:, j] < s) &
↪ (Data_set.loc[:, 'Y'] == r) , : ] ) / cond_R14

        elif cond_R14 == 0 :

            f_R14 = 0

        return f_R14

#####

def f_R24(j, s, r, Data_set):

    # Verificando si se cumplen las siguientes dos condiciones
    ↪ conjuntamente nos garantizamos que todas las ramas tienes
    ↪ observaciones de train.
    # Es decir, no habra ninguna rama sin observaciones de train
    ↪ que caigan en ella.

    cond_R24 = len( Data_set.loc[ (Data_set.iloc[:,
↪ j_star_vector[0]] < s_star_vector[0]) & (Data_set.iloc[:,
↪ j_star_vector[1]] < s_star_vector[1]) & (Data_set.iloc[:, j] >= s) , :
↪ ] )

    if cond_R24 != 0 :

        f_R24 = len( Data_set.loc[ (Data_set.iloc[:,
↪ j_star_vector[0]] < s_star_vector[0]) & (Data_set.iloc[:,
↪ j_star_vector[1]] < s_star_vector[1]) & (Data_set.iloc[:, j] >= s) &
↪ (Data_set.loc[:, 'Y'] == r) , : ] ) / cond_R24

    elif cond_R24 == 0 :

        f_R24 = 0

    return f_R24

```

```
#####

G_vector = []
j_vector = []
s_vector = []

for j in range(1, Data_set.shape[1]) :

    for s in s_values(j, Data_set) :

        f_R14_r_vector = []
        f_R24_r_vector = []

        for r in Y_categories : # Si Y tiene como categorias
            ↪ 0,1,2 --> Y_categories = range(0,3)

            f_R14_r_vector.append( f_R14(j, s, r , Data_set)*(1 -
↪ f_R14(j, s, r , Data_set)) )

            f_R24_r_vector.append( f_R24(j, s, r , Data_set)*(1 -
↪ f_R24(j, s, r , Data_set)) )

        # Calculo de G_4 para la combinacion (j, s) dada:

        G_R33 = sum(f_R33_r_vector)
        G_R43 = sum(f_R43_r_vector)

        G_3 = G_R33 + G_R43

        G_vector.append(G_3)
        j_vector.append(j)
        s_vector.append(s)

    # Búsqueda de j_star y s_star de la itracion 1:

    G_df = pd.DataFrame({'G':G_vector, 'j':j_vector, 's':s_vector})

    G_df_sorted = G_df.sort_values(by=['G'], axis=0, ascending=True,
↪ ignore_index=True)

    s_star_vector.append( G_df_sorted.loc[0, 's'] )
    j_star_vector.append( G_df_sorted.loc[0, 'j'] )
    G_star_vector.append(G_df_sorted.loc[0, 'G'])

    # OJO: s_star_vector[i] sera el s_star de la iteracion i+1 , para
    ↪ i=0,1,...
    # OJO: j_star_vector[i] sera el j_star de la iteracion i+1 , para
    ↪ i=0,1,...
```

```

#####

# Condicion de parada:

    obs_r14 = len( Data_set.loc[ (Data_set.iloc[:, j_star_vector[0] ]
↪ < s_star_vector[0]) & (Data_set.iloc[:, j_star_vector[1]] <
↪ s_star_vector[1]) & (Data_set.iloc[:, j_star_vector[3]] <
↪ s_star_vector[3]) , : ] )
    obs_r24 = len( Data_set.loc[ (Data_set.iloc[:, j_star_vector[0] ]
↪ < s_star_vector[0]) & (Data_set.iloc[:, j_star_vector[1]] <
↪ s_star_vector[1]) & (Data_set.iloc[:, j_star_vector[3]] >=
↪ s_star_vector[3]) , : ] )

    obs_r34 = len( Data_set.loc[ (Data_set.iloc[:, j_star_vector[0] ]
↪ < s_star_vector[0]) & (Data_set.iloc[:, j_star_vector[1]] >=
↪ s_star_vector[1]) , : ] )
    obs_r44 = len( Data_set.loc[ (Data_set.iloc[:, j_star_vector[0] ]
↪ >= s_star_vector[0]) & (Data_set.iloc[:, j_star_vector[2]] <
↪ s_star_vector[2]) , : ] )
    obs_r54 = len( Data_set.loc[ (Data_set.iloc[:, j_star_vector[0] ]
↪ >= s_star_vector[0]) & (Data_set.iloc[:, j_star_vector[2]] >=
↪ s_star_vector[2]) , : ] )

if(obs_r14 < k) | (obs_r24 < k) : # Si se cumple el criterio de
↪ parada

    print('El arbol final es el arbol con 3 Iteracion. Se ha
↪ cumplido el criterio de parada basado en numero minimo', k
↪ , 'de observaciones por rama')

    number_iterations = 4

    obs_ramas = [obs_r14, obs_r24, obs_r34 , obs_r44, obs_r54]

#####

return(number_iterations, j_star_vector, s_star_vector,
↪ G_star_vector, obs_ramas )

#####

elif (obs_r14 >= k) & (obs_r24 >= k) : # No se cumple el criterio
↪ de parada

    print('Se ha generado el arbol mas grande permitido por el
↪ algoritmo (arbol con 4 Iteraciones)')

```

```

# Aunque no se haya cumplido el criterio de parada como esta es
↳ la ultima Iteracion contemplada por el algoritmo,
# debemos calcular las metricas finales para que sean escupidas
↳ por el algoritmo.

number_iterations=4

obs_ramas = [obs_r14, obs_r24, obs_r34, obs_r44, obs_r54]

pass

#####

return( number_iterations, j_star_vector, s_star_vector,
↳ G_star_vector, obs_ramas )

```

4.5.7 Testeo del algoritmo

```

number_iterations, j_star_vector, s_star_vector, G_star_vector, obs_ramas
↳ = classification_tree_Gini(Data_set=Data_Train,
↳ iterations_vector=range(1,5), k=20 , Y_categories=range(0,2))

```

El arbol final es el arbol con 1 Iteracion. Se ha cumplido el criterio de parada basado e

```
number_iterations
```

```
1
```

```
j_star_vector
```

```
[6]
```

```
s_star_vector
```

```
[11.5]
```

```
G_star_vector
```

```
[0.40005784418456025]
```

```
obs_ramas
```

```
[3, 463]
```

4.5.8 Validacion Simple con funcion de validación propia y funcion Regression Tree Gini propia

```
def Simple_Validation_Classification(Data_Test, X_train, Y_train, Y_test)
↪ :

#####

from joblib import Parallel, delayed
import multiprocessing

n_jobs = multiprocessing.cpu_count()

#####

number_iterations, j_star_vector, s_star_vector, G_star_vector,
↪ obs_ramas = classification_tree_Gini(Data_set=Data_Train,
↪ iterations_vector=range(1,5), k=20 , Y_categories=range(0,2))

Y_categories = range(0,2)

def prediction(i, Data_Test, X_train, Y_train ):

    x_new = Data_Test.iloc[ i , range(1, Data_Test.shape[1])]

    y_new_predict = classification_tree_PREDICTIONS(Data_Test,
↪ Y_categories ,number_iterations, j_star_vector, s_star_vector,
↪ obs_ramas, x_new)

    return(y_new_predict)

#####

y_predictions_vector = []

# Paralelizamos el siguiente bucle for :

# for i in range(0, len(Data_Test)):

    # y_new_predict = prediction(i, Data_Test, X_train, Y_train )

    # y_predictions_vector.append( y_new_predict )

y_predictions_vector = Parallel(n_jobs=n_jobs)( delayed(prediction)(
↪ i, Data_Test, X_train, Y_train) for i in range(0, len(Data_Test)) )

#####

TEC = ( y_predictions_vector != Y_test ).sum() / len(Y_test)
```

```
return(y_predictions_vector , TEC)
```

```
y_predictions_vector , TEC_classification_tree_Gini_own_function =  
↪ Simple_Validation_Classification(Data_Test, X_train, Y_train, Y_test)
```

El arbol final es el arbol con 1 Iteracion.

Se ha cumplido el criterio de parada basado en numero minimo 20 de observaciones por rama.

```
TEC_classification_tree_Gini_own_function
```

```
0.28205128205128205
```

4.5.9 Árboles de clasificación en Python con Sklearn

La función de `sklearn` para árboles de clasificación es la siguiente :

```
sklearn.tree.DecisionTreeClassifier(criterion='gini', splitter='best', max_depth=None,
min_samples_split=2, min_samples_leaf=1, min_weight_fraction_leaf=0.0,
max_features=None, random_state=None, max_leaf_nodes=None,
min_impurity_decrease=0.0, class_weight=None, ccp_alpha=0.0)
```

Donde algunos de los parámetros más importantes son:

- `criterion`{“gini”, “entropy”, “log_loss”}, default=“gini”
- `splitter`{“best”, “random”}, default=“best”

The strategy used to choose the split at each node. Supported strategies are “best” to choose the best split and “random” to choose the best random split.

- `max_depth`int, default=None

Es la profundidad maxima del arbol (la distancia maxima entre el nodo raiz y alguno de los nodos terminales)

- `min_samples_split` int or float, default=2

Es el numero minimo de observaciones que tienen que tener un nodo para separarlo/dividirlo (split) en dos nuevos cuadrados/nodos. Si cierto nodo tiene menos de `min_samples_split` observaciones, el algoritmo ya no lo dividirá.

If int, then consider `min_samples_split` as the minimum number.

If float, then `min_samples_split` is a fraction and `ceil(min_samples_split * n_samples)` are the minimum number of samples for each split.

- `min_samples_leaf`

Es el numero minimo de observaciones que tienen que tener cada rama del arbol. Para que un nodo sea dividido en dos nuevos nodos (generando dos nuevas ramas) es necesario (aunque no suficiente) que el numero de observaciones que tendrían las dos nuevas ramas (los dos nuevos nodos) sea mayor que `min_samples_leaf`.

- `ccp_alpha` non-negative float, default=0.0

Complexity parameter used for Minimal Cost-Complexity Pruning. The subtree with the largest cost complexity that is smaller than `ccp_alpha` will be chosen. By default, no pruning is performed. See Minimal Cost-Complexity Pruning for details

Probamos la funcion de sklearn :

```
import sklearn

from sklearn.tree import DecisionTreeClassifier
```

```
x_new = X_test.iloc[ 8 , :]
```

```
Classification_Tree_sklearn =
→ sklearn.tree.DecisionTreeClassifier(criterion='gini', splitter='best',
→ min_samples_split=40, min_samples_leaf=50, max_depth=None,
→ ccp_alpha=0, random_state=666)
```

Para poder ajustar el modelo con el metodo fit de sklearn la respuesta tiene que ser type = int o float

```
Y_train = Y_train.astype('int')
Y_test = Y_test.astype('int')
```

```
Classification_Tree_sklearn.fit(X_train, Y_train)
```

```
DecisionTreeClassifier(ccp_alpha=0, min_samples_leaf=50, min_samples_split=40,
                        random_state=666)
```

Predecir la respuesta para un vector de predictores :

```
Classification_Tree_sklearn.predict( [x_new] )
```

```
array([0])
```

Obtener la profundidad del arbol generado :

```
Classification_Tree_sklearn.get_depth()
```

```
4
```

Obtener el numero de ramas del arbol generado:

```
Classification_Tree_sklearn.get_n_leaves()
```

```
8
```

nº de iteraciones (nodos que se han dividido en otros dos nodos) = nº ramas - 1

Plotear el arbol :

```
from sklearn import tree

import graphviz

import os
os.environ["PATH"] += os.pathsep + 'C:/Program Files
↳ (x86)/graphviz/Graphviz/bin'

fit = Classification_Tree_sklearn.fit(X_train, Y_train)

dot_data = tree.export_graphviz( fit , out_file=None)
graph = graphviz.Source(dot_data)
graph.render("plot")

dot_data = tree.export_graphviz(fit, out_file=None,
                                feature_names=X_train.columns,
                                filled=True, rounded=True,
                                special_characters=True)

graph = graphviz.Source(dot_data)
```

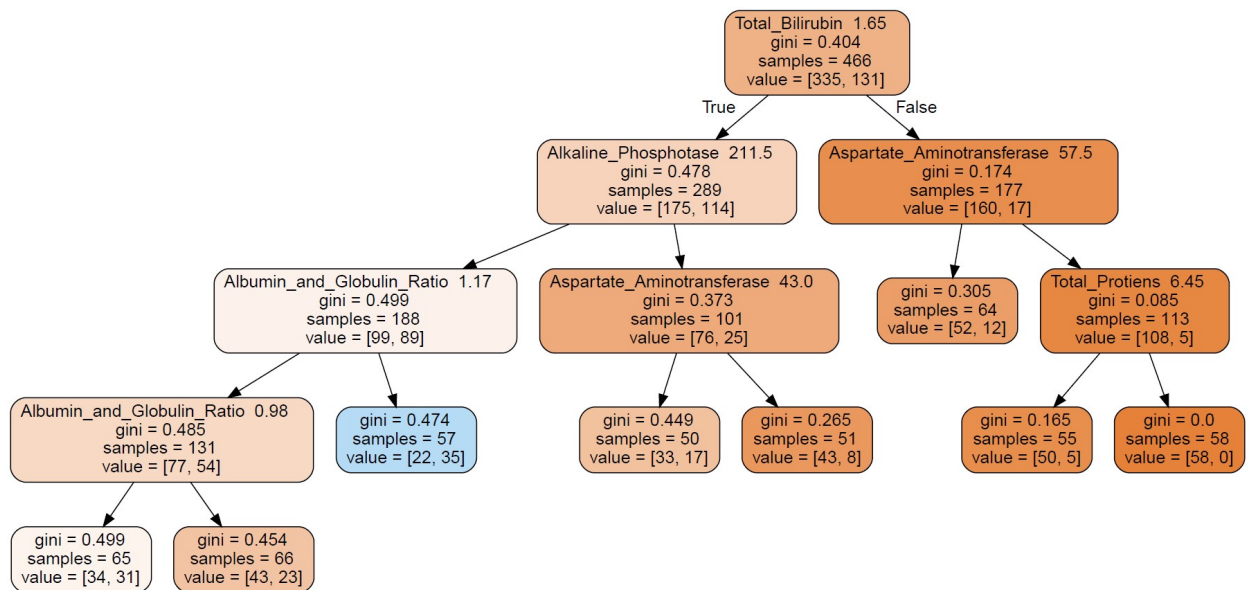


Figure 30: Arbol sklearn (criterion='gini', splitter='best', min_samples_split=40, min_samples_leaf=50, max_depth=None, ccp_alpha=0)

Para demostrar que entendemos los parametros que vienen en cada nodo (en cada recuadro) los vamos a calcular “manualmente” para el nodo que se deriva de True en el nodo raiz, el que tiene como parametros: $\text{gini} = 0.478$, $\text{samples} = 289$, $\text{value} = [175, 114]$

$\text{samples} = 289$

```
df = Data_Train.loc[Data_Python['Total_Bilirubin']<=1.65 , :]
```

```
len(df)
```

289

Por tanto, dado un nodo, su parametro *samples* indica el numero de observaciones de entrenamiento que caerian en la rama que contiene a ese nodo, si este nodo fuera el nodo terminal de la rama. En el caso escogido seria la rama definida por $\text{Total_Bilirubin} \leq 1.65$.

$\text{value} = [175, 114]$

```
len(df.loc[df['Y'] == 0 , ])
```

175

```
len(df.loc[df['Y'] == 1 , ])
```

114

Por tanto, dado un nodo, su parametro *value* es un vector con las frecuencias de las categorias de la variable respuesta (Y) para las observaciones de train que caerian en la rama que contiene a ese nodo, si este nodo fuera el nodo terminal de la rama.

$\text{gini} = 0.478$

```
p0 = len(df.loc[df['Y'] == 0 , ])/len(df)
p1 = len(df.loc[df['Y'] == 1 , ])/len(df)
```

```
p0*(1-p0) + p1*(1-p1)
```

0.4777241651800146

Por tanto, dado un nodo del arbol, el parametro *gini* indica el indice de gini para las observaciones de train que caerian en rama que contiene a dicho nodo, si este nodo fuera el nodo terminal de dicha rama.

4.5.10 Validación simple con función de validacion propia y funcion Classification Tree de sklearn

```
def Simple_Validation_Classification(Data_Test, X_train, Y_train, Y_test)
→ :

#####

from joblib import Parallel, delayed
import multiprocessing

n_jobs = multiprocessing.cpu_count()

#####

Classification_Tree_sklearn =
→ sklearn.tree.DecisionTreeClassifier(criterion='gini', splitter='best',
→ min_samples_split=40, min_samples_leaf=50, max_depth=None,
→ ccp_alpha=0, random_state=666)
#####

def prediction(i, Data_Test, X_train, Y_train ):

    x_new = Data_Test.iloc[ i , range(1, Data_Test.shape[1])]

    Classification_Tree_sklearn.fit(X_train, Y_train)

    y_new_predict = Classification_Tree_sklearn.predict( [x_new] )

    return(y_new_predict)

#####

y_predictions_vector = []

# Paralelizamos el siguiente bucle for :

# for i in range(0, len(Data_Test)):

    # y_new_predict = prediction(i, Data_Test, X_train, Y_train )

    # y_predictions_vector.append( y_new_predict )

y_predictions_vector = Parallel(n_jobs=n_jobs)( delayed(prediction)(
→ i, Data_Test, X_train, Y_train) for i in range(0, len(Data_Test)) )

#####

from itertools import chain

y_predictions_vector = list(chain(*y_predictions_vector))
```

```
TEC = sum(y_predictions_vector != Y_test)/len(Y_test)
```

```
return(y_predictions_vector , TEC)
```

```
y_predictions_vector , TEC_classification_tree_sklearn =  
→ Simple_Validation_Classification(Data_Test, X_train, Y_train, Y_test)
```

```
TEC_classification_tree_sklearn
```

```
0.3418803418803419
```

4.5.11 4.5.4. Árboles de clasificación penalizados en sklearn : α óptimo

Vamos a obtener para los datos dados el α óptimo para un árbol de clasificación del tipo `sklearn.tree.DecisionTreeClassifier(criterion='gini', splitter='best', random_state=222)`

Es decir para un árbol de clasificación en el que por defecto `ccp_alpha=0`, `min_samples_split=2`, `min_samples_leaf=2`

```
Classification_Tree_sklearn =  
→ sklearn.tree.DecisionTreeClassifier(criterion='gini', splitter='best',  
→ ccp_alpha=0, random_state=222)  
  
path = Classification_Tree_sklearn.cost_complexity_pruning_path(X_train,  
→ Y_train)  
path
```

```
{'ccp_alphas': array([0.          , 0.00190749, 0.00190749, 0.00198085, 0.00199264,  
0.00204838, 0.00204838, 0.00208281, 0.00208792, 0.00214592,  
0.00256706, 0.00286123, 0.00286123, 0.00286123, 0.00286123,  
0.00321888, 0.00321888, 0.00321888, 0.00330839, 0.0033381 ,  
0.0033632 , 0.00339575, 0.00343348, 0.00357654, 0.00367872,  
0.00367872, 0.00375536, 0.00375687, 0.00381497, 0.00390878,  
0.00393419, 0.00394962, 0.00398529, 0.00422372, 0.00429185,  
0.0046785 , 0.00525751, 0.00530546, 0.00554939, 0.00566861,  
0.00578789, 0.00579405, 0.00633117, 0.00718679, 0.00983335,  
0.01012134, 0.01438729, 0.0419547 ]),  
'impurities': array([0.          , 0.00381497, 0.00762995, 0.01159165, 0.01557694,  
0.0196737 , 0.02786722, 0.03203284, 0.03620869, 0.03835461,  
0.04862283, 0.05148406, 0.05720652, 0.06006775, 0.06292898,  
0.06614787, 0.06936675, 0.07258564, 0.0891276 , 0.09580381,  
0.10589341, 0.10928915, 0.11272263, 0.11629917, 0.11997789,  
0.12365662, 0.12741198, 0.13116885, 0.1387988 , 0.14661635,  
0.15055054, 0.15844978, 0.16243507, 0.17088251, 0.1794662 ,  
0.19818019, 0.2034377 , 0.21404863, 0.21959801, 0.2762841 ,  
0.28207199, 0.29366009, 0.30632242, 0.3278828 , 0.33771614,  
0.34783749, 0.36222478, 0.40417948])}]
```

```
ccp_alphas, impurities = path.ccp_alphas, path.impurities
```

```
Classification_Tree_sklearn_vector = []  
  
for ccp_alpha in ccp_alphas:  
  
    Classification_Tree_sklearn =  
→ DecisionTreeClassifier(ccp_alpha=ccp_alpha, criterion='gini',  
→ splitter='best', random_state=222)  
  
    Classification_Tree_sklearn.fit(X_train, Y_train)  
  
    Classification_Tree_sklearn_vector.append(Classification_Tree_sklearn)
```

```
from sklearn.metrics import accuracy_score
```

```
acc_scores = [accuracy_score(Y_test,
    ↳ Classification_Tree_sklearn.predict(X_test)) for
    ↳ Classification_Tree_sklearn in Classification_Tree_sklearn_vector]

ramas = [Classification_Tree_sklearn.get_n_leaves() for
    ↳ Classification_Tree_sklearn in Classification_Tree_sklearn_vector]
```

```
import matplotlib.pyplot as plt
```

```
plt.figure(figsize=(9, 9))
plt.grid()
plt.plot(ccp_alphas[:-1], acc_scores[:-1], color='red')
plt.xlabel("alpha")
plt.ylabel("score (TAC = 1 - TEC)")
```

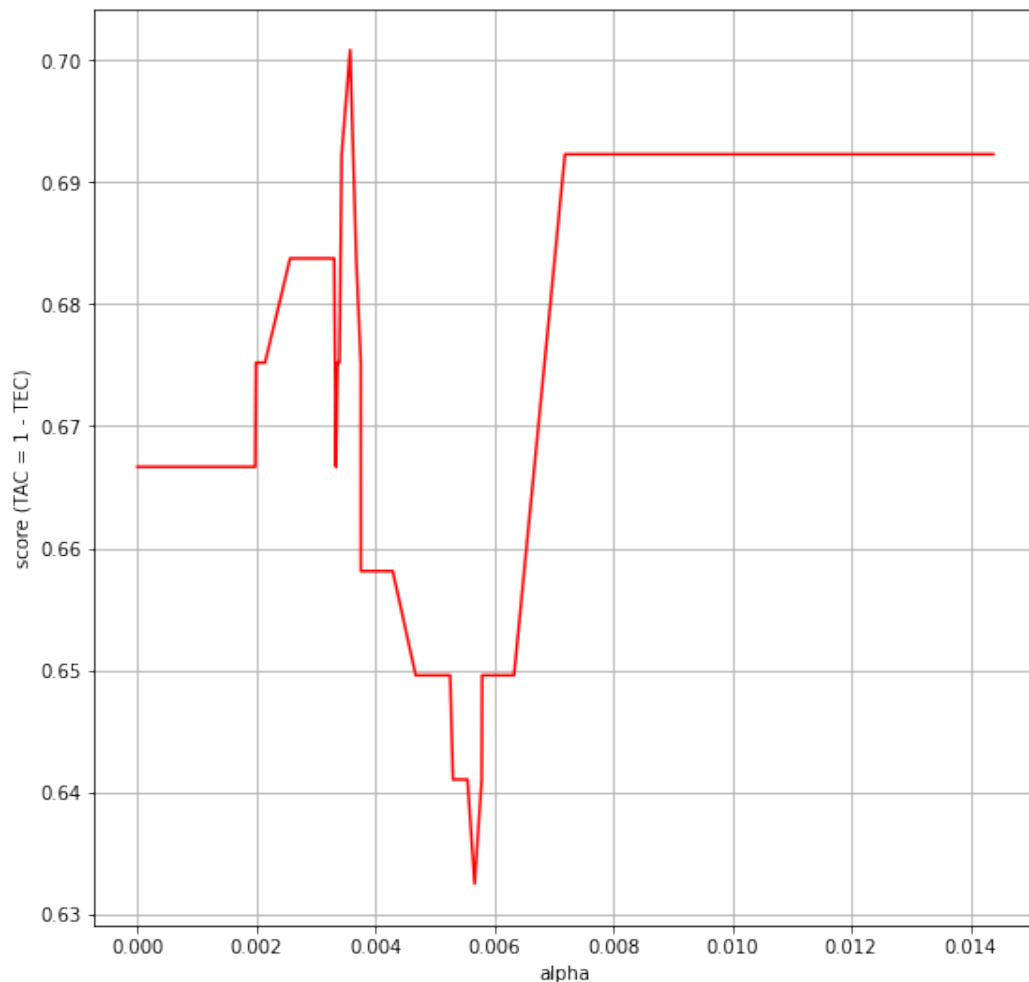


Figure 31: TAC vs α

```
alpha_score_df = pd.DataFrame({'alpha':ccp_alphas, 'score (TAC = 1-TEC)':
↪ acc_scores , 'ramas': ramas})
```

```
alpha_score_df_sorted = alpha_score_df.sort_values(by=["score (TAC =
↪ 1-TEC)"], ascending=False).reset_index(drop=False)
alpha_score_df_sorted['TEC'] = 1 - alpha_score_df_sorted['score (TAC =
↪ 1-TEC)']
```

```
alpha_score_df_sorted.head(7)
```

	index	alpha	score (TAC = 1-TEC)	ramas	TEC
0	23	0.003577	0.700855	47	0.299145
1	47	0.041955	0.692308	1	0.307692
2	46	0.014387	0.692308	2	0.307692
3	45	0.010121	0.692308	3	0.307692
4	44	0.009833	0.692308	4	0.307692
5	43	0.007187	0.692308	5	0.307692
6	22	0.003433	0.692308	48	0.307692

Validacion simple con α óptimo:

```
def Simple_Validation_Classification(Data_Test, X_train, Y_train, Y_test)
↪ :

    #####

    from joblib import Parallel, delayed
    import multiprocessing

    n_jobs = multiprocessing.cpu_count()

    #####

    Classification_Tree_penalized_star =
↪ sklearn.tree.DecisionTreeClassifier(ccp_alpha=alpha_score_df_sorted['alpha'][0],
↪ criterion='gini', splitter='best', random_state=222)
    #####

    def prediction(i, Data_Test, X_train, Y_train ):

        x_new = Data_Test.iloc[ i , range(1, Data_Test.shape[1])]

        Classification_Tree_penalized_star.fit(X_train, Y_train)

        y_new_predict = Classification_Tree_penalized_star.predict( [x_new] )
↪

    return(y_new_predict)

    #####
```

```

y_predictions_vector = []

# Paralelizamos el siguiente bucle for :

# for i in range(0, len(Data_Test)):

    # y_new_predict = prediction(i, Data_Test, X_train, Y_train )

    # y_predictions_vector.append( y_new_predict )

y_predictions_vector = Parallel(n_jobs=n_jobs)( delayed(prediction)(
↪ i, Data_Test, X_train, Y_train) for i in range(0, len(Data_Test)) )

#####

from itertools import chain

y_predictions_vector = list(chain(*y_predictions_vector))

TEC = sum(y_predictions_vector != Y_test)/len(Y_test)

return(y_predictions_vector , TEC)

```

```

y_predictions_vector , TEC_classification_tree_penalized_star =
↪ Simple_Validation_Classification(Data_Test, X_train, Y_train, Y_test)

```

```
TEC_classification_tree_penalized_star
```

```
0.29914529914529914
```


4.5.12 Comparación final entre árboles de clasificación por validación simple

```
[TEC_classification_tree_penalized_star , TEC_classification_tree_sklearn,  
↪ TEC_classification_tree_own_function,  
↪ TEC_classification_tree_Gini_own_function,]
```

```
[0.29914529914529914,  
 0.3418803418803419,  
 0.3076923076923077,  
 0.28205128205128205]
```

El ranking de modelos segun validacion simple sería :

1. TEC_classification_tree_Gini_own_function
2. TEC_classification_tree_penalized_star(ccp_alpha=alpha_score_df_sorted['alpha'][0], criterion='gini', splitter='best', random_state=222))
3. TEC_classification_tree_own_function
4. TEC_classification_tree_sklearn (DecisionTreeRegressor(criterion='gini', splitter='best', min_samples_split=40, min_samples_leaf=50, max_depth=None, ccp_alpha=0, random_state=222))

4.6 KNN para clasificación en Python

4.6.1 KNN para clasificación: teoría

- Tenemos p variables $X = (X_1, \dots, X_p)$ medidas en un n muestra de tamaño.
- También tenemos una variable de respuesta **categorica** Y con g categorías que indica el grupo al que cada elemento de la muestra pertenece ($Range(Y) = \{c_0, \dots, c_{g-1}\}$)
- Los grupos generados por Y se denotan como $\Omega_0, \dots, \Omega_{g-1}$ ($y_i = c_r \Leftrightarrow i \in \Omega_r$)

El problema de clasificación supervisada consiste en, para una nueva observación de las variables X_1, \dots, X_p , $x_{new} = (x_{new,1}, x_{new,2}, \dots, x_{new,p})$, predecir es Y valor (y_{new}) usando la información disponible de X_1, \dots, X_p y Y

Entonces, el problema es clasificar un nuevo elemento/individuo en uno de los g grupos generados por Y usando la información disponible de X_1, \dots, X_p y Y , y también $x_{new} = (x_{new,1}, x_{new,2}, \dots, x_{new,p})$

Tengase en cuenta que si no tenemos información sobre Y , esto sería un problema de clasificación no supervisado.

El algoritmo KNN (K-vecinos más cercanos) para la clasificación supervisada tiene los siguientes pasos:

1. Define una medida de **distancia** entre las observaciones de la muestra original respecto a las variables $X_1, \dots, X_p \Rightarrow \delta$
2. Calcula las distancias entre x_{new} y las observaciones iniciales $\{x_1, \dots, x_n\} \Rightarrow \{\delta(x_{nuevo}, x_i) / i = 1, \dots, n\}$
3. Seleccione la k observación más cercana a x_{nuevo} basado en δ (k vecinos más cercanos de x_{nuevo}) \Rightarrow El conjunto de estas observaciones será denotar por $KNN(x_{new})$
4. Calcular la proporción de estas observaciones (vecinos) que pertenecen a cada grupo : La proporción de KNN que pertenece al grupo Ω_r ($Y = c_r$) será denotado por f_r^{knn}

$$f_r^{KNN(x_{new})} = \frac{\# \{i \in KNN(x_{new}) / i \in \Omega_r\}}{\# KNN(x_{new}) = k} = \frac{\# \{i \in KNN / y_i = r\}}{k}$$

5. Clasifica x_{new} en ese grupo/clase (definido por Y) más frecuente en KNN:

$$\text{If } \underbrace{f_s^{KNN(x_{new})} \geq f_r^{KNN(x_{new})}, \forall r = 0, \dots, g-1}_{s \text{ es la clase más frecuente en KNN}} \Rightarrow x_{new} \text{ se clasifica en } \Omega_s \\ \Rightarrow \hat{y}_{new} = s$$

En otras palabras:

$$\text{If } s^* = \arg \underset{s}{\text{Máx.}} \left(f_s^{KNN(x_{new})} \right) \Rightarrow \hat{y}_{new} = s^*$$

4.6.2 4.6.2. Algoritmo de creación proia en Python

Vamos a desarrollar nuestro propio algoritmo para no depender de sklearn

```
def KNN_classification( X , Y , x_new, k, distance = "Minkowski" , q = 0,
    ↪ p1=0, p2=0, p3=0 ):

    ## Para paralelizar el algoritmo

    from joblib import Parallel, delayed
    import multiprocessing

    n_jobs = multiprocessing.cpu_count()

    #####

    # Y, X y x_new deben ser objetos Pandas ya que luego seran convertidos
    ↪ a objetos Numpy automaticamente por el algoritmo

    # Y tiene que ser un Pandas data frame con la variable respuesta (que
    ↪ en este caso debe ser categorica y con categorias estandar
    ↪ {0,1,2,...})

    # X tiene que ser un Pandas data frame con los predictores
    ↪ (X1,...,Xp).

    # x_new tiene que ser un vector con una nueva observacion de los
    ↪ predictores.

    #####

    Y = Y.to_numpy()

    X = X.to_numpy()

    x_new = x_new.to_numpy()

    X = np.concatenate((X, [x_new]), axis=0)

    distances = []

    groups_knn = []

    #####

    def a(Binary_Data) :

        X = Binary_Data

        a = X @ X.T
```

```

        return(a)

#####

def d(Binary_Data):

    X = Binary_Data

    ones_matrix = np.ones(( X.shape[0] , X.shape[1]))

    d = (ones_matrix - X) @ (ones_matrix - X).T

    return(d)

#####

def alpha_py(i,j, Multiple_Categorical_Data):

    X = Multiple_Categorical_Data

    alpha = np.repeat(0, X.shape[1])

    for k in range(0, X.shape[1]) :

        if X[i-1, k] == X[j-1, k] :

            alpha[k] = 1

        else :

            alpha[k] = 0

    alpha = alpha.sum()

    return(alpha)

#####

if distance == "Euclidean":

    def Dist_Euclidea_Python(i, j, Quantitative_Data_set):

        Dist_Euclidea = ( ( Quantitative_Data_set[i-1, :] -
↪ Quantitative_Data_set[j-1, :] )**2 ).sum()

        Dist_Euclidea = np.sqrt(Dist_Euclidea)

        return Dist_Euclidea

#####

## PARTE DEL CODIGO A PARALELIZAR

```

```

        #for j in range(1, len(X)):

        # distances.append( Dist_Euclidea_Python( len(X), i , X ) )

    n_jobs = multiprocessing.cpu_count()

    distances = Parallel(n_jobs=n_jobs)(
    ↪ delayed(Dist_Euclidea_Python)( len(X), s , X ) for s in range(1,
    ↪ len(X)) )

#####

    if distance == "Minkowski":

        def Dist_Minkowski_Python(i,j, q , Quantitative_Data_set):

            Dist_Minkowski = ( ( abs( Quantitative_Data_set[i-1, :] -
    ↪ Quantitative_Data_set[j-1, :] ) )**q ).sum() )**(1/q)

            return Dist_Minkowski

#####

    ## PARTE DEL CODIGO A PARALELIZAR

    # for i in range(1, len(X)):

        # distances.append( Dist_Minkowski_Python( len(X), i , q , X)
        ↪ )

    n_jobs = multiprocessing.cpu_count()

    distances = Parallel(n_jobs=n_jobs)(
    ↪ delayed(Dist_Minkowski_Python)( len(X), s , q , X) for s in range(1,
    ↪ len(X)) )

#####

    if distance == "Canberra":

        def Dist_Canberra_Python(i,j, Quantitative_Data_set):

            numerator = abs( Quantitative_Data_set[i-1, :] -
    ↪ Quantitative_Data_set[j-1, :] )

            denominator = ( abs(Quantitative_Data_set[i-1, :]) +
    ↪ abs(Quantitative_Data_set[j-1, :]) )

            numerator=np.array([numerator], dtype=float)

            denominator=np.array([denominator], dtype=float)

```

```

        Dist_Canberra = ( np.divide( numerator , denominator ,
→ out=np.zeros_like(numerator), where=denominator!=0) ).sum()

        return Dist_Canberra

#####

    ## PARTE DEL CODIGO A PARALELIZAR

    # for i in range(1, len(X)):

        # distances.append( Dist_Canberra_Python( len(X), i , X) )

    n_jobs = multiprocessing.cpu_count()

    distances = Parallel(n_jobs=n_jobs)(
→ delayed(Dist_Canberra_Python)( len(X), s , X) for s in range(1,
→ len(X)) )

#####

    if distance == "Pearson":

        def Dist_Pearson_Python(i, j, Quantitative_Data_set):

            Dist_Pearson = ( ( Quantitative_Data_set[i-1, ] -
→ Quantitative_Data_set[j-1, ] )**2 / Quantitative_Data_set.var()
→ ).sum()

            Dist_Pearson = np.sqrt(Dist_Pearson)

            return Dist_Pearson

#####

    ## PARTE DEL CODIGO A PARALELIZAR

    # for i in range(1, len(X)):

        # distances.append( Dist_Pearson_Python( len(X), i , X) )

    n_jobs = multiprocessing.cpu_count()

    distances = Parallel(n_jobs=n_jobs)( delayed(Dist_Pearson_Python)(
→ len(X), s , X) for s in range(1, len(X)) )

#####

    if distance == "Mahalanobis":

        def Dist_Mahalanobis_Python(i, j, Quantitative_Data_set):

```

```

        # All the columns of Quantitative_Data_set must be type =
        ↪ 'float' or 'int' (specially not 'object'), in other case
        ↪ we will find
        # dimensional problems when Python compute  $x @ S_{inv} @ x.T$ 

        x = (Quantitative_Data_set[i-1, :] -
        ↪ Quantitative_Data_set[j-1, :])

        x = np.array([x]) # necessary step to transpose a 1D array

        S_inv = np.linalg.inv( np.cov(Quantitative_Data_set ,
        ↪ rowvar=False) ) # inverse of covariance matrix

        Dist_Maha = np.sqrt( x @ S_inv @ x.T ) #  $x @ S_{inv} @ x.T =$ 
        ↪  $np.matmul( np.matmul(x , S_{inv}) , x.T )$ 

        return Dist_Maha

#####

## PARTE DEL CODIGO A PARALELIZAR

    # for i in range(1, len(X)):

        # distances.append( Dist_Mahalanobis_Python( len(X), i , X) )

        n_jobs = multiprocessing.cpu_count()

        distances = Parallel(n_jobs=n_jobs)(
        ↪ delayed(Dist_Mahalanobis_Python)( len(X), s , X) for s in range(1,
        ↪ len(X)) )

#####

    if distance == "Sokal":

        a = X @ X.T
        n = X.shape[0]
        p = X.shape[1]
        ones_matrix = np.ones((n, p))
        b = (ones_matrix - X) @ X.T
        c = b.T
        d = (ones_matrix - X) @ (ones_matrix - X).T

        def Sokal_Similarity_Py(i, j):

            Sokal_Similarity = ( a[i-1 , j-1] + d[i-1 , j-1] ) / p

```

```

        return Sokal_Similarity

def Dist_Sokal_Python(i, j, Binary_Data_set):

    dist_Sokal = np.sqrt( 2 - 2*Sokal_Similarity_Py(i,j,
↪ Binary_Data_set) )

    return dist_Sokal

#####

## PARTE DEL CODIGO A PARALELIZAR

    # for i in range(1, len(X)):

        # distances.append( Dist_Sokal_Python( len(X), i , X) )

    n_jobs = multiprocessing.cpu_count()

    distances = Parallel(n_jobs=n_jobs)( delayed(Dist_Sokal_Python)(
↪ len(X), s , X) for s in range(1, len(X)) )

#####

    if distance == "Jaccard":

        a = X @ X.T
        n = X.shape[0]
        p = X.shape[1]
        ones_matrix = np.ones((n, p))
        b = (ones_matrix - X) @ X.T
        c = b.T
        d = (ones_matrix - X) @ (ones_matrix - X).T

    def Jaccard_Similarity_Py(i, j):

        Jaccard_Similarity = a[i-1,j-1] / (a[i-1,j-1] + b[i-1,j-1] +
↪ c[i-1,j-1])

        return Jaccard_Similarity

    def Dist_Jaccard_Python(i, j):

        dist_Jaccard = np.sqrt( Jaccard_Similarity_Py(i,i) +
↪ Jaccard_Similarity_Py(i,i) - 2*Jaccard_Similarity_Py(i,j) )

        return dist_Jaccard

```



```
#####

## PARTE DEL CODIGO A PARALELIZAR

    # for i in range(1, len(X)):

        # distances.append( Dist_Jaccard_Python( len(X), i , X) )

    n_jobs = multiprocessing.cpu_count()

    distances = Parallel(n_jobs=n_jobs)( delayed(Dist_Jaccard_Python)(
↪ len(X), s , X) for s in range(1, len(X)) )

#####

    if distance == "Matches":

        def matches_similarity_py(i, j, Multiple_Categorical_Data):

            p = Multiple_Categorical_Data.shape[1]

            matches_similarity = alpha_py(i,j, Multiple_Categorical_Data)
↪ / p

            return(matches_similarity)

        def Dist_Matches_Py(i,j, Multiple_Categorical_Data):

            Dist_Matches = np.sqrt( matches_similarity_py(i, i,
↪ Multiple_Categorical_Data) + matches_similarity_py(j, j,
↪ Multiple_Categorical_Data) - 2*matches_similarity_py(i, j,
↪ Multiple_Categorical_Data) )

            return( Dist_Matches )

#####

    # for i in range(1, len(X)):

        # distances.append( Dist_Matches_Py( len(X), i , X) )

    n_jobs = multiprocessing.cpu_count()

    distances = Parallel(n_jobs=n_jobs)( delayed(Dist_Matches_Py)(
↪ len(X), s , X) for s in range(1, len(X)) )

#####

    if distance == "Gower":

        # The data matrix X have to be order in the following way:
        # The p1 first are quantitative, the following p2 are binary
        ↪ categorical, and the following p3 are multiple categorical.
```

```
#####

def Gower_Similarity_Python(i,j, Mixed_Data_Set, p1, p2, p3):

    X = Mixed_Data_Set

    # The data matrix X have to be order in the following way:
    # The p1 first are quantitative, the following p2 are binary
    ↪ categorical, and the following p3 are multiple categorical.

#####

    def G(k, X):

        range = X[:,k].max() - X[:,k].min()

        return(range)

    G_vector = np.repeat(0.5, p1)

    for r in range(0, p1):

        G_vector[r] = G(r, X)

#####

    ones = np.repeat(1, p1)

    Quantitative_Data = X[:, 0:p1]

    Binary_Data = X[:, (p1):(p1+p2)]

    Multiple_Categorical_Data = X[:, (p1+p2):(p1+p2+p3) ]

#####

    numerator_part_1 = ( ones - ( abs(Quantitative_Data[i-1,:] -
    ↪ Quantitative_Data[j-1,:]) / G_vector ) ).sum()

    numerator_part_2 = a(Binary_Data)[i-1,j-1] + alpha_py(i,j,
    ↪ Multiple_Categorical_Data)

    numerator = numerator_part_1 + numerator_part_2

    denominator = p1 + (p2 - d(Binary_Data)[i-1,j-1]) + p3

    Similarity_Gower = numerator / denominator

    return(Similarity_Gower)

```

```

#####

def Dist_Gower_Py(i, j, Mixed_Data , p1, p2, p3):

    Dist_Gower = np.sqrt( 1 - Gower_Similarity_Python(i, j,
↪ Mixed_Data , p1, p2, p3) )

    return(Dist_Gower)

#####

# for i in range(1, len(X)):

    # distances.append( Dist_Gower_Py( len(X), i , X, p1, p2, p3)
↪ )

n_jobs = multiprocessing.cpu_count()

distances = Parallel(n_jobs=n_jobs)( delayed(Dist_Gower_Py)(
↪ len(X), s , X, p1, p2, p3) for s in range(1, len(X)) )

#####

if distance == "Gower-BM" :

    def GowerBM_Similarity_Python(i,j, BM_Data_Set, p2, p3):

        X = BM_Data_Set

        # The data matrix X have to be order in the following way:
        # The p2 first are binary categorical, and the following p3 are
        ↪ multiple categorical.

#####

        Binary_Data = X[: , 0:p2]

        Multiple_Categorical_Data = X[: , (p2):(p2+p3)]

#####

        numerator_part_2 = a(Binary_Data)[i-1,j-1] + alpha_py(i,j,
↪ Multiple_Categorical_Data)

        numerator = numerator_part_2

        denominator = (p2 - d(Binary_Data)[i-1,j-1]) + p3

        Similarity_Gower = numerator / denominator

    return(Similarity_Gower)

```

```
#####

def Dist_GowerBM_Py(i, j, BM_Data , p2, p3):

    Dist_Gower = np.sqrt( 1 - GowerBM_Similarity_Python(i, j,
↪ BM_Data , p2, p3) )

    return(Dist_Gower)

#####

# for i in range(1, len(X)):

    # distances.append( Dist_GowerBM_Py( len(X), i , X, p2, p3) )

n_jobs = multiprocessing.cpu_count()

distances = Parallel(n_jobs=n_jobs)( delayed(Dist_GowerBM_Py)(
↪ len(X), s , X, p2, p3) for s in range(1, len(X)) )

#####

if distance == "Gower-BQ" :

    def GowerBQ_Similarity_Python(i,j, BQ_Data_Set, p1, p2):

        X = BQ_Data_Set

        # The data matrix X have to be order in the following way:
        # The p1 first are quantitative, the following p2 are binary
        ↪ categorical

    #####

    def G(k, X):

        range = X[:,k].max() - X[:,k].min()

        return(range)

    G_vector = np.repeat(0.5, p1)

    for r in range(0, p1):

        G_vector[r] = G(r, X)

    #####

    ones = np.repeat(1, p1)

    Quantitative_Data = X[:, 0:p1]
```

```

        Binary_Data = X[:, (p1):(p1+p2)]

#####

        numerator_part_1 = ( ones - ( abs(Quantitative_Data[i-1,:] -
↪ Quantitative_Data[j-1,:]) / G_vector ) ).sum()

        numerator_part_2 = a(Binary_Data)[i-1,j-1]

        numerator = numerator_part_1 + numerator_part_2

        denominator = p1 + (p2 - d(Binary_Data)[i-1,j-1])

        Similarity_Gower = numerator / denominator

        return(Similarity_Gower)

#####

    def Dist_GowerBQ_Py(i, j, BQ_Data , p1, p2):

        Dist_Gower = np.sqrt( 1 - GowerBQ_Similarity_Python(i, j,
↪ BQ_Data , p1, p2) )

        return(Dist_Gower)

#####

    # for i in range(1, len(X)):

    # distances.append( Dist_GowerBQ_Py( len(X), i , X, p1, p2) )

    n_jobs = multiprocessing.cpu_count()

    distances = Parallel(n_jobs=n_jobs)( delayed(Dist_GowerBQ_Py)(
↪ len(X), s , X, p1, p2) for s in range(1, len(X)) )

#####

    if distance == "Gower-MQ" :

        def GowerMQ_Similarity_Python(i,j, MQ_Data_Set, p1, p3):

            X = MQ_Data_Set

            # The data matrix X have to be order in the following way:
            # The p1 first are quantitative, the following p2 are binary
            ↪ categorical, and the following p3 are multiple categorical.

#####

```

```

def G(k, X):

    range = X[:,k].max() - X[:,k].min()

    return(range)

G_vector = np.repeat(0.5, p1)

for r in range(0, p1):

    G_vector[r] = G(r, X)

#####

ones = np.repeat(1, p1)

Quantitative_Data = X[:, 0:p1]

Multiple_Categorical_Data = X[:, (p1):(p1+p3)]

#####

    numerator_part_1 = ( ones - ( abs(Quantitative_Data[i-1,:] -
↪ Quantitative_Data[j-1,:]) / G_vector ) ).sum()

    numerator_part_2 = alpha_py(i,j, Multiple_Categorical_Data)

    numerator = numerator_part_1 + numerator_part_2

    denominator = p1 + p3

    Similarity_Gower = numerator / denominator

    return(Similarity_Gower)

#####

def Dist_GowerMQ_Py(i, j, MQ_Data , p1, p3):

    Dist_Gower = np.sqrt( 1 - GowerMQ_Similarity_Python(i, j,
↪ MQ_Data , p1, p3) )

    return(Dist_Gower)

#####

    # for i in range(1, len(X)):

```

```

        # distances.append( Dist_GowerMQ_Py( len(X), i , X, p1, p3) )

    n_jobs = multiprocessing.cpu_count()

    distances = Parallel(n_jobs=n_jobs)( delayed(Dist_GowerMQ_Py)(
→ len(X), s , X, p1, p3) for s in range(1, len(X)) )

#####

#####

    distances = pd.DataFrame({'distances': distances})

    distances =
→ distances.sort_values(by=["distances"]).reset_index(drop=False)

    knn = distances.iloc[0:k , :]

    for i in knn.iloc[:,0]:

        groups_knn.append(Y[i])

    unique, counts = np.unique(groups_knn , return_counts=True)

    unique_Y , counts_Y = np.unique(Y , return_counts=True)

    if len(unique) == len(unique_Y) :

        proportions_groups_knn = pd.DataFrame({'proportions_groups':
→ counts/k, 'groups': unique_Y })

    elif len(unique) < len(unique_Y) :

        proportions_groups_knn = pd.DataFrame({'proportions_groups':
→ counts/k, 'groups': unique })

    prediction_group =
→ proportions_groups_knn.sort_values(by=["proportions_groups"],
→ ascending=False).iloc[0,:]['groups']

    return prediction_group, proportions_groups_knn

```

Probamos el algoritmo con un ejemplo:

```
prediction_group, proportions_groups_knn = KNN_classification( X_train ,  
↪ Y_train , x_new, 10 , distance = "Euclidean" )
```

```
prediction_group
```

```
0.0
```

```
proportions_groups_knn
```

	proportions_groups	groups
0	0.8	0
1	0.2	1

Validación simple con función de validación propia y función de clasificación KNN propia

```
def Simple_Validation_Classification(distance, Data_Test, X_train,
    ↪ Y_train, Y_test) :

    #####

    from joblib import Parallel, delayed
    import multiprocessing

    n_jobs = multiprocessing.cpu_count()

    #####

    #####

    def prediction(i, Data_Test, X_train, Y_train ):

        x_new = Data_Test.iloc[ i , range(1, Data_Test.shape[1])]

        prediction_group, proportions_groups_knn = KNN_classification(
    ↪ X_train , Y_train , x_new, 10 , distance = distance )

        y_new_predict = prediction_group

        return(y_new_predict)

    #####

    y_predictions_vector = []

    # Paralelizamos el siguiente bucle for :

    # for i in range(0, len(Data_Test)):

        # y_new_predict = prediction(i, Data_Test, X_train, Y_train )

        # y_predictions_vector.append( y_new_predict )

    y_predictions_vector = Parallel(n_jobs=n_jobs)( delayed(prediction)(
    ↪ i, Data_Test, X_train, Y_train) for i in range(0, len(Data_Test)) )

    #####

    from itertools import chain

    TEC = 1 - sum(y_predictions_vector == Y_test)/len(Y_test)

    return(y_predictions_vector , TEC)
```

Se va a probar el algoritmo con distancias diferentes a las que pueden usarse con `sklearn` para así cubrir un mayor campo.

Usando la distancia de Canberra:

```
y_predictions_vector , TEC_KNN_Canberra =  
→ Simple_Validation_Classification('Canberra', Data_Test, X_train,  
→ Y_train, Y_test)
```

```
TEC_KNN_Canberra
```

```
0.23931623931623935
```

Usando la distancia de Pearson:

```
y_predictions_vector , TEC_KNN_Pearson =  
→ Simple_Validation_Classification('Pearson', Data_Test, X_train,  
→ Y_train, Y_test)
```

```
TEC_KNN_Pearson
```

```
0.2991452991452992
```

Usando la distancia de Mahalanobis:

Ahora vamos a usar la distancia de Mahalanobis, pero teniendo especial cuidado, porque como pone dentro de la propia función (# All the columns of Quantitative_Data_set must be type = 'float' or 'int' (specially not 'object'), in other case we will find dimensional problems when Python compute $x @ S_{inv} @ x.T$) todas las variables de `X_train` así como `x_new` tienen que ser tipo float o int, y especialmente no ser tipo object, y resulta que tenemos Gender como object, luego tenemos que modificar esto para poder usar el algoritmo con la distancia de Mahalanobis.

Para hacer que todas las variables de `X_train` sean tipo float o int basta con cambiar a int la variable Gender que es la única tipo object.

```
X_train.dtypes
```

```
Age                int64  
Gender             object  
Total_Bilirubin    float64  
Direct_Bilirubin   float64  
Alkaline_Phosphotase  int64  
Alamine_Aminotransferase  int64  
Aspartate_Aminotransferase int64  
Total_Protiens     float64  
Albumin            float64  
Albumin_and_Globulin_Ratio float64  
dtype: object
```

```
X_train['Gender'] = X_train['Gender'].astype('int')
```

Pero por otro lado como `x_new` se define en el algoritmo de validacion como `x_new = Data_Test.iloc[i, range(1, Data_Test.shape[1])]` y `Data_test` tambien tiene variables tipo `object`, por lo que hay que convertirlas en tipo `float` o `int`, ya que si no `x_new` será tipo `object` y no podrá intervenir en ciertas operaciones entre arrays con Numpy , cosa que pasa en el algoritmo. En general para quitarnos problemas siempre que se usen operaciones entre arrays con Numpy estos deberian ser tipo `float` o `int`, nunca `object`.

```
Data_Test.dtypes
```

```
Y                object
Age              int64
Gender           object
Total_Bilirubin  float64
Direct_Bilirubin float64
Alkaline_Phosphotase  int64
Alamine_Aminotransferase  int64
Aspartate_Aminotransferase  int64
Total_Protiens     float64
Albumin           float64
Albumin_and_Globulin_Ratio  float64
dtype: object
```

```
Data_Test['Gender'] = Data_Test['Gender'].astype('int')
Data_Test['Y'] = Data_Test['Y'].astype('int')
```

```
y_predictions_vector , TEC_KNN_Mahalanobis =
↳ Simple_Validation_Classification('Mahalanobis', Data_Test, X_train,
↳ Y_train, Y_test)
```

```
TEC_KNN_Mahalanobis
```

```
0.3504273504273504
```

Usando la distancia de Gower:

Ahora vamos a probar con la distancia de Gower, que es la ideal para conjuntos de datos de tipo mixto (que tienen por lo menos dos tipos de variables (cuantitativas-binarias , cuantitativas-multiclase, binarias-multiclase o cuantitativas-binarias-multiclase)).

Notese que las distancias usadas hasta el momento (Minkowski con $p=1,2$ (es decir, Euclidean y Manhattan), Canberra, Pearson y Mahalanobis) NO son distancias apropiadas, desde un punto de vista estadístico, para matrices de datos de tipo mixto. La distancia mas estandarizada para este tipo de conjunto de datos es la de Gower. En este caso como tenemos un conjunto de datos de tipo cuantitativo-binario usaremos una version de la distancia de Gower adecuada para este tipo de datos.

Para ello podemos usar el parametro `distance="Gower-BQ"` en nuestra funcion de KNN. Pero para ello debemos hacer unas modificaciones en el data-set de predictores para que nuestra funcion pueda operar correctamente.

Por un lado tenemos que hacer que las primeras p1 variables (columnas) de X_train sean las cuantitativas, y las siguientes p2 variables las binarias. Tras esto ya podremos usar nuestra función KKN con la distancia de Gower para datos binarios-cuantitativos, pasándole como parámetros adicionales p1 y p2.

```
X_train_rearranged = X_train.loc[ : , [ 'Age', 'Total_Bilirubin',
    ↪ 'Direct_Bilirubin',
    'Alkaline_Phosphotase',
    ↪ 'Alamine_Aminotransferase',
    ↪ # Cuantitativas (9)
    'Aspartate_Aminotransferase',
    ↪ 'Total_Protiens', 'Albumin',
    'Albumin_and_Globulin_Ratio',

    'Gender' # Binarias (1)

]]
```

Como `x_new = Data_Test.iloc[i , range(1, Data_Test.shape[1])]` y también tiene que ser un vector con el mismo orden que `X_train_rearranged` tenemos que reordenar `Data_test` del mismo modo que lo hemos hecho con `X_train`.

```
Data_Test_rearranged = Data_Test.loc[ : , [ 'Y' , # Respuesta

    'Age', 'Total_Bilirubin',
    ↪ 'Direct_Bilirubin',
    'Alkaline_Phosphotase',
    ↪ 'Alamine_Aminotransferase',
    ↪ # Cuantitativas (9)
    'Aspartate_Aminotransferase',
    ↪ 'Total_Protiens', 'Albumin',
    'Albumin_and_Globulin_Ratio',

    'Gender' # Binarias (1)

]]
```

Validamos el algoritmo por validación simple:

```
def Simple_Validation_Classification(Data_Test, X_train, Y_train, Y_test)
    ↪ :

    #####

    from joblib import Parallel, delayed
    import multiprocessing

    n_jobs = multiprocessing.cpu_count()

    #####
```

```
#####

def prediction(i, Data_Test, X_train, Y_train ):

    x_new = Data_Test.iloc[ i , range(1, Data_Test.shape[1])]

    prediction_group, proportions_groups_knn = KNN_classification(
    ↪ X_train , Y_train , x_new, 10 , distance = "Gower-BQ" , p1=9 , p2=1)

    y_new_predict = prediction_group

    return(y_new_predict)

#####

y_predictions_vector = []

# Paralelizamos el siguiente bucle for :

# for i in range(0, len(Data_Test)):

    # y_new_predict = prediction(i, Data_Test, X_train, Y_train )

    # y_predictions_vector.append( y_new_predict )

y_predictions_vector = Parallel(n_jobs=n_jobs)( delayed(prediction)(
    ↪ i, Data_Test, X_train, Y_train) for i in range(0, len(Data_Test)) )

#####

from itertools import chain

TEC = 1 - sum(y_predictions_vector == Y_test)/len(Y_test)

return(y_predictions_vector , TEC)
```

```
prediction_group, proportions_groups_knn = KNN_classification(
    ↪ X=X_train_rearranged , Y=Y_train , x_new=x_new, k=10 ,
    ↪ distance="Gower-BQ" , p1=9 , p2=1)
```

```
y_predictions_vector , TEC_KNN_Gower_BQ =
    ↪ Simple_Validation_Classification(Data_Test_rearranged,
    ↪ X_train_rearranged, Y_train, Y_test)
```

```
TEC_KNN_Gower_BQ
```

```
0.3418803418803419
```

4.6.3 KNN para clasificación en Python con sklearn

```
import sklearn
```

```
from sklearn.neighbors import NearestNeighbors
```

```
# sklearn.neighbors.KNeighborsClassifier(n_neighbors=5, *,  
→ weights='uniform', algorithm='auto', leaf_size=30, p=2,  
→ metric='minkowski', metric_params=None, n_jobs=None)
```

Es recomendable ver primero la documentación de sklearn: <https://scikit-learn.org/stable/modules/generated/sklearn.neighbors.KNeighborsClassifier.html>

```
knn_classification = sklearn.neighbors.KNeighborsClassifier(n_neighbors=10  
→ , weights='uniform', p=2, metric='minkowski')
```

```
knn_classification.fit(X_train, Y_train)
```

```
KNeighborsClassifier(n_neighbors=10)
```

```
knn_classification.predict( [x_new] )
```

```
array([0])
```

```
knn_classification.predict_proba([x_new])
```

```
array([[0.8, 0.2]])
```

Validación simple con función de validación propia y función de clasificación KNN sklearn

```
def Simple_Validation_Classification(Data_Test, X_train, Y_train, Y_test)
    ↪ :

    #####

    from joblib import Parallel, delayed
    import multiprocessing

    n_jobs = multiprocessing.cpu_count()

    #####

    knn_classification =
    ↪ sklearn.neighbors.KNeighborsClassifier(n_neighbors=10 ,
    ↪ weights='uniform', p=2, metric='minkowski')

    #####

    def prediction(i, Data_Test, X_train, Y_train ):

        x_new = Data_Test.iloc[ i , range(1, Data_Test.shape[1])]

        knn_classification.fit(X_train, Y_train)

        y_new_predict = knn_classification.predict( [x_new] )

        return(y_new_predict)

    #####

    y_predictions_vector = []

    # Paralelizamos el siguiente bucle for :

    # for i in range(0, len(Data_Test)):

        # y_new_predict = prediction(i, Data_Test, X_train, Y_train )

        # y_predictions_vector.append( y_new_predict )

    y_predictions_vector = Parallel(n_jobs=n_jobs)( delayed(prediction)(
    ↪ i, Data_Test, X_train, Y_train) for i in range(0, len(Data_Test)) )

    #####

    from itertools import chain

    y_predictions_vector = list(chain(*y_predictions_vector))
```

```
TEC = 1 - sum(y_predictions_vector == Y_test)/len(Y_test)
```

```
return(y_predictions_vector , TEC)
```

```
y_predictions_vector , TEC_KNN_Minkowski_p_2 =  
↪ Simple_Validation_Classification(Data_Test, X_train, Y_train, Y_test)
```

```
TEC_KNN_Minkowski_p_2
```

```
0.2991452991452992
```

Validación simple con la función de validación sklearn

Usando la distancia de Minkowski con q=2:

```
knn_classification = sklearn.neighbors.KNeighborsClassifier(n_neighbors=10  
↪ , weights='uniform', p=2, metric='minkowski')
```

```
knn_classification.fit(X_train, Y_train)
```

```
KNeighborsClassifier(n_neighbors=10)
```

```
TEC_KNN_skl_Minkowski_p_2 = 1 - knn_classification.score(X_test, Y_test)
```

```
TEC_KNN_skl_Minkowski_p_2
```

```
0.2991452991452992
```

Usando la distancia de Minkowski con q=1:

```
knn_classification = sklearn.neighbors.KNeighborsClassifier(n_neighbors=10  
↪ , weights='uniform', p=1, metric='minkowski')
```

```
knn_classification.fit(X_train, Y_train)
```

```
KNeighborsClassifier(n_neighbors=10, p=1)
```

```
TEC_skl_Minkowski_p_1 = 1 - knn_classification.score(X_test, Y_test)
```

```
TEC_skl_Minkowski_p_1
```

```
0.32478632478632474
```

Usando la distancia coseno:


```
knn_classification = sklearn.neighbors.KNeighborsClassifier(n_neighbors=10
↳ , weights='uniform', metric='cosine')

knn_classification.fit(X_train, Y_train)
```

```
KNeighborsClassifier(metric='cosine', n_neighbors=10)
```

```
TEC_skl_Coseno = 1 - knn_classification.score(X_test, Y_test)
```

```
TEC_skl_Coseno
```

```
0.2991452991452992
```

4.6.4 Selección óptima del hiperparámetro k en KNN

Vamos a hacer una seleccion óptima del hiperparametro k por validacion simple para KNN con varias distancias.

k óptimo con distancia Canberra

```
def Simple_Validation_Classification(k, Data_Test, X_train, Y_train,
    ↪ Y_test) :

    #####

    from joblib import Parallel, delayed
    import multiprocessing

    n_jobs = multiprocessing.cpu_count()

    #####

    #####

    def prediction(i, Data_Test, X_train, Y_train ):

        x_new = Data_Test.iloc[ i , range(1, Data_Test.shape[1])]

        prediction_group, proportions_groups_knn = KNN_classification(
    ↪ X_train , Y_train , x_new, k , distance = 'Canberra' )

        y_new_predict = prediction_group

        return(y_new_predict)

    #####

    y_predictions_vector = []

    # Paralelizamos el siguiente bucle for :

    # for i in range(0, len(Data_Test)):

        # y_new_predict = prediction(i, Data_Test, X_train, Y_train )

        # y_predictions_vector.append( y_new_predict )

    y_predictions_vector = Parallel(n_jobs=n_jobs)( delayed(prediction)(
    ↪ i, Data_Test, X_train, Y_train) for i in range(0, len(Data_Test)) )

    #####

    from itertools import chain

    TEC = 1 - sum(y_predictions_vector == Y_test)/len(Y_test)
```

```
return(y_predictions_vector , TEC)
```

```
TEC_KNN_Canberra_vector = [ ]
```

```
for k in range(1, 50) :
```

```
    y_predictions_vector , TEC = Simple_Validation_Classification(k,  
    ↪ Data_Test, X_train, Y_train, Y_test)
```

```
    TEC_KNN_Canberra_vector.append(TEC)
```

```
k_KNN_Canberra_df = pd.DataFrame({'k':range(1,50),  
    ↪ 'TEC':TEC_KNN_Canberra_vector})
```

```
k_KNN_Canberra_df =
```

```
    ↪ k_KNN_Canberra_df.sort_values(by=["TEC"]).reset_index(drop=False)
```

```
k_KNN_Canberra_df.head()
```

	index	k	TEC
0	3	4	0.230769
1	4	5	0.230769
2	5	6	0.230769
3	7	8	0.230769
4	9	10	0.239316

k óptimo con distancia Pearson

```
def Simple_Validation_Classification(k, Data_Test, X_train, Y_train,
    ↪ Y_test) :

    #####

    from joblib import Parallel, delayed
    import multiprocessing

    n_jobs = multiprocessing.cpu_count()

    #####

    #####

    def prediction(i, Data_Test, X_train, Y_train ):

        x_new = Data_Test.iloc[ i , range(1, Data_Test.shape[1])]

        prediction_group, proportions_groups_knn = KNN_classification(
    ↪ X_train , Y_train , x_new, k , distance = 'Pearson' )

        y_new_predict = prediction_group

        return(y_new_predict)

    #####

    y_predictions_vector = []

    # Paralelizamos el siguiente bucle for :

    # for i in range(0, len(Data_Test)):

        # y_new_predict = prediction(i, Data_Test, X_train, Y_train )

        # y_predictions_vector.append( y_new_predict )

    y_predictions_vector = Parallel(n_jobs=n_jobs)( delayed(prediction)(
    ↪ i, Data_Test, X_train, Y_train) for i in range(0, len(Data_Test)) )

    #####

    from itertools import chain

    TEC = 1 - sum(y_predictions_vector == Y_test)/len(Y_test)

    return(y_predictions_vector , TEC)
```

```
TEC_KNN_Pearson_vector = [ ]
```

```
for k in range(1, 50) :
```

```
    y_predictions_vector , TEC = Simple_Validation_Classification(k,  
    ↪ Data_Test, X_train, Y_train, Y_test)
```

```
    TEC_KNN_Pearson_vector.append(TEC)
```

```
k_KNN_Pearson_df = pd.DataFrame({'k':range(1,50),  
    ↪ 'TEC':TEC_KNN_Pearson_vector})
```

```
k_KNN_Pearson_df =
```

```
    ↪ k_KNN_Pearson_df.sort_values(by=["TEC"]).reset_index(drop=False)
```

```
k_KNN_Pearson_df.head()
```

	index	k	TEC
0	3	4	0.256410
1	1	2	0.264957
2	4	5	0.264957
3	2	3	0.273504
4	5	6	0.273504

k óptimo con distancia Euclidea

```
def Simple_Validation_Classification(k, Data_Test, X_train, Y_train,
    ↪ Y_test) :

    #####

    from joblib import Parallel, delayed
    import multiprocessing

    n_jobs = multiprocessing.cpu_count()

    #####

    #####

    def prediction(i, Data_Test, X_train, Y_train ):

        x_new = Data_Test.iloc[ i , range(1, Data_Test.shape[1])]

        prediction_group, proportions_groups_knn = KNN_classification(
    ↪ X_train , Y_train , x_new, k , distance = 'Euclidean' )

        y_new_predict = prediction_group

        return(y_new_predict)

    #####

    y_predictions_vector = []

    # Paralelizamos el siguiente bucle for :

    # for i in range(0, len(Data_Test)):

        # y_new_predict = prediction(i, Data_Test, X_train, Y_train )

        # y_predictions_vector.append( y_new_predict )

    y_predictions_vector = Parallel(n_jobs=n_jobs)( delayed(prediction)(
    ↪ i, Data_Test, X_train, Y_train) for i in range(0, len(Data_Test)) )

    #####

    from itertools import chain

    TEC = 1 - sum(y_predictions_vector == Y_test)/len(Y_test)

    return(y_predictions_vector , TEC)
```

```

TEC_KNN_Euclidean_vector = [ ]

for k in range(1, 50) :

    y_predictions_vector , TEC = Simple_Validation_Classification(k,
↪ Data_Test, X_train, Y_train, Y_test)

    TEC_KNN_Euclidean_vector.append(TEC)

k_KNN_Euclidean_df = pd.DataFrame({'k':range(1,50),
↪ 'TEC':TEC_KNN_Pearson_vector})

k_KNN_Euclidean_df =
↪ k_KNN_Euclidean_df.sort_values(by=["TEC"]).reset_index(drop=False)

k_KNN_Euclidean_df.head()

```

	index	k	TEC
0	3	4	0.256410
1	1	2	0.264957
2	4	5	0.264957
3	2	3	0.273504
4	5	6	0.273504

4.7 Comparación final entre árboles y KNN para clasificación por validación simple

Modelo	TAC
Rpart sin podar	0.6667
Rpart podado	0.6879
C5.0 sin podar	0.6986
C5.0 podado	0.7123
Rpart podado (mlr3)	0.6917
C5.0 (mlr3)	0.6986
AC propio TEC $k = 20$	0.6923
AC propio Gini $k = 20$	0.7179
AC sklearn (criterion='gini', min_samples_split=40, min_samples_leaf=50)	0.6581
AC sklearn penalización α^* (criterion='gini')	0.7008
KNN Canberra $k = 10$	0.7607
KNN Pearson $k = 10$	0.7008
KNN Mahalanobis $k = 10$	0.6496
KNN Gower $k = 10$	0.6581
KNN Minkowski $q = 2$ $k = 10$	0.7008
KNN Minkowski $q = 1$ $k = 10$	0.67521
KNN Coseno $k = 10$	0.7008
KNN Canberra k^*	0.7692
KNN Pearson k^*	0.74359
KNN Euclidea k^*	0.74359

Donde:

AC = Arbol de clasificación

5 Bibliografía

James, G. ; Tibshirani, R. ; Hastie, T. ; Witten, D. (2021). *An Introduction to Statistical Learning* (second edition). Springer.

Tibshirani, R. ; Hastie, T. ; Friedman, H. (2008). *The elements of Statistical Learning* (second edition). Springer.

Grané, A. (2022). *Análisis Discriminante* [Presentación de PowerPoint]. Aula Global UC3M.

Grané, A. (2022). *Distancias Estadísticas* [Presentación de PowerPoint]. Aula Global UC3M.

scikit-learn Developers. *scikit-learn*. <https://scikit-learn.org/stable/>

mlr3 Developers. *mlr3*. <https://mlr3.ml-org.com/>