



Clasificación

Parte 3: Algoritmos de clasificación (Árboles, KNN, Naive Bayes)

Felipe Bravo

(Basado en una versión previa de Bárbara Poblete)

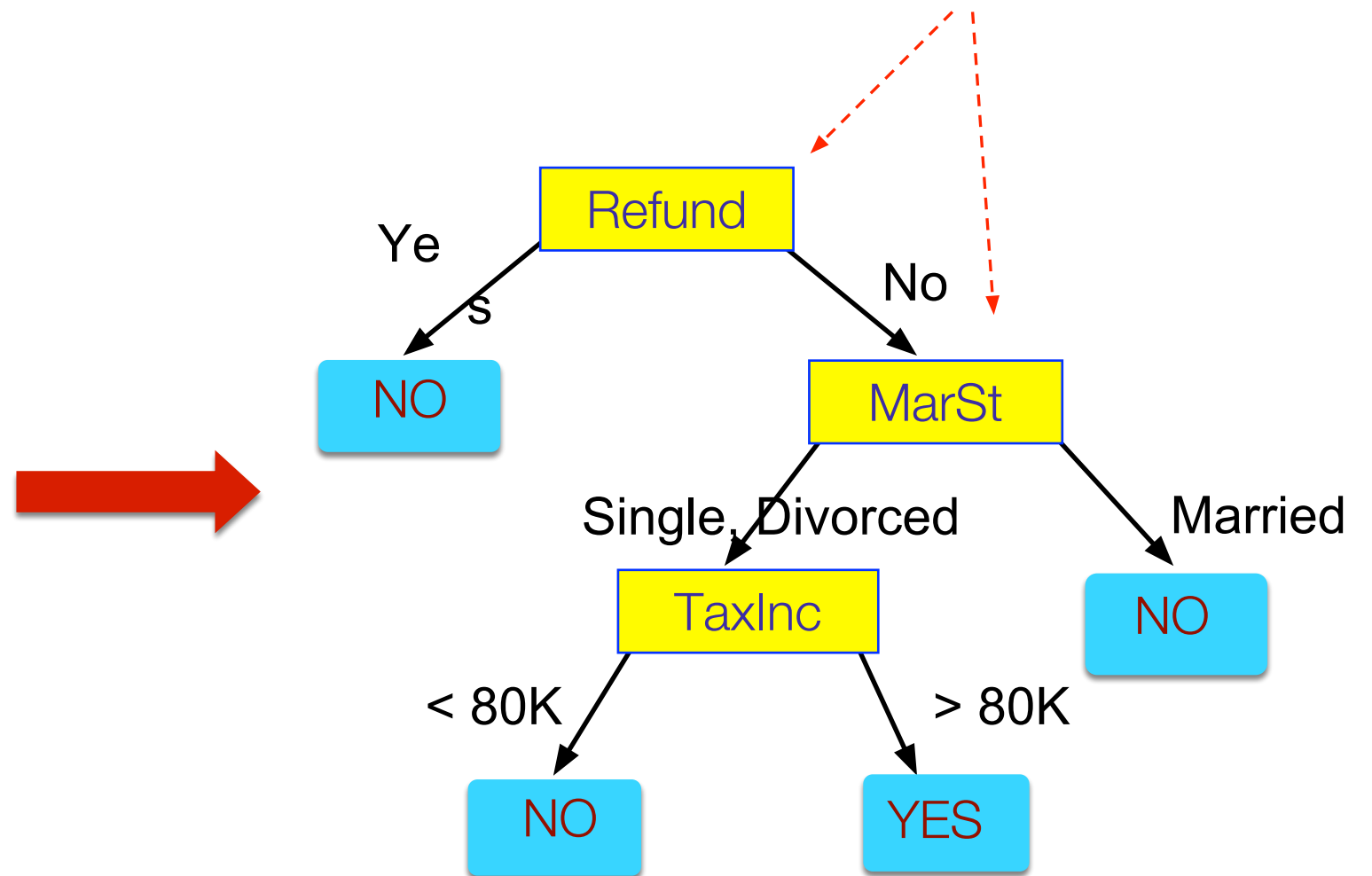
Árbol de Decisión

categorical
categorical
continuous
class

Tid	Refund	Marital Status	Taxable Income	Cheat
1	Yes	Single	125K	No
2	No	Married	100K	No
3	No	Single	70K	No
4	Yes	Married	120K	No
5	No	Divorced	95K	Yes
6	No	Married	60K	No
7	Yes	Divorced	220K	No
8	No	Single	85K	Yes
9	No	Married	75K	No
10	No	Single	90K	Yes

Datos de
Entrenamiento

Atributos de Separación



Modelo: Árbol de Decisión

Árbol de Decisión

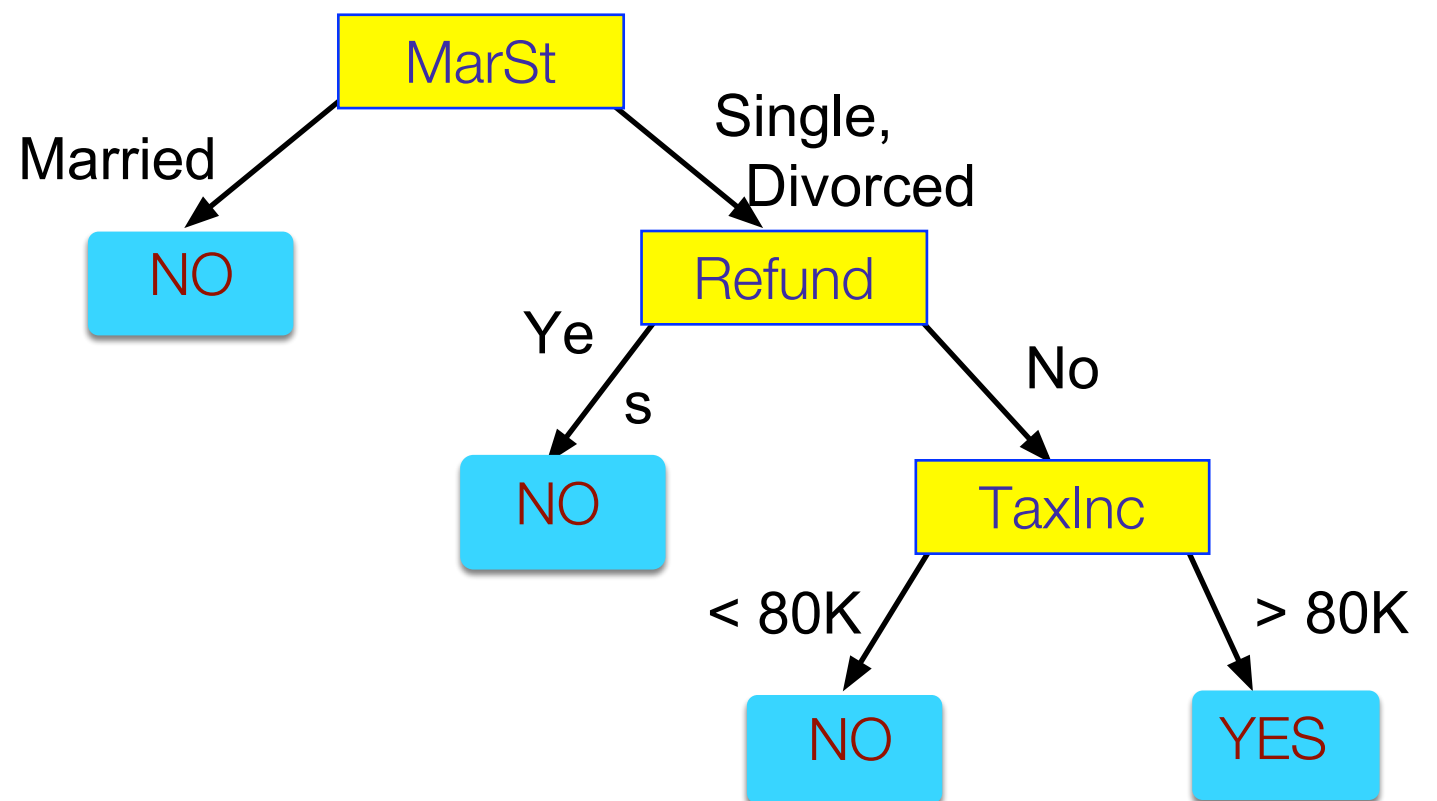
El árbol tiene tres tipos de nodos:

1. Un nodo raíz que no tiene arcos entrantes y tiene arcos salientes.
 2. Nodos internos, cada uno de los cuales tiene exactamente un arco entrante y dos o más arcos salientes.
 3. Nodos hoja o terminales, cada uno de los cuales tiene exactamente un arco entrante.
- A cada nodo de hoja se le asigna una **etiqueta** de clase.
 - Los nodos no terminales, que incluyen la raíz y otros nodos internos, contienen **tests** sobre los atributos para separar los ejemplos que tienen valores diferentes para esos atributos.
 - El árbol de decisión **fragmenta** el dataset de manera recursiva hasta asignar los ejemplos a una clase.

Otro Ejemplo

categorical categorical continuous class

<i>Tid</i>	Refund	Marital Status	Taxable Income	Cheat
1	Yes	Single	125K	No
2	No	Married	100K	No
3	No	Single	70K	No
4	Yes	Married	120K	No
5	No	Divorced	95K	Yes
6	No	Married	60K	No
7	Yes	Divorced	220K	No
8	No	Single	85K	Yes
9	No	Married	75K	No
10	No	Single	90K	Yes



¿Puede existir más de un árbol que se ajuste a los datos!

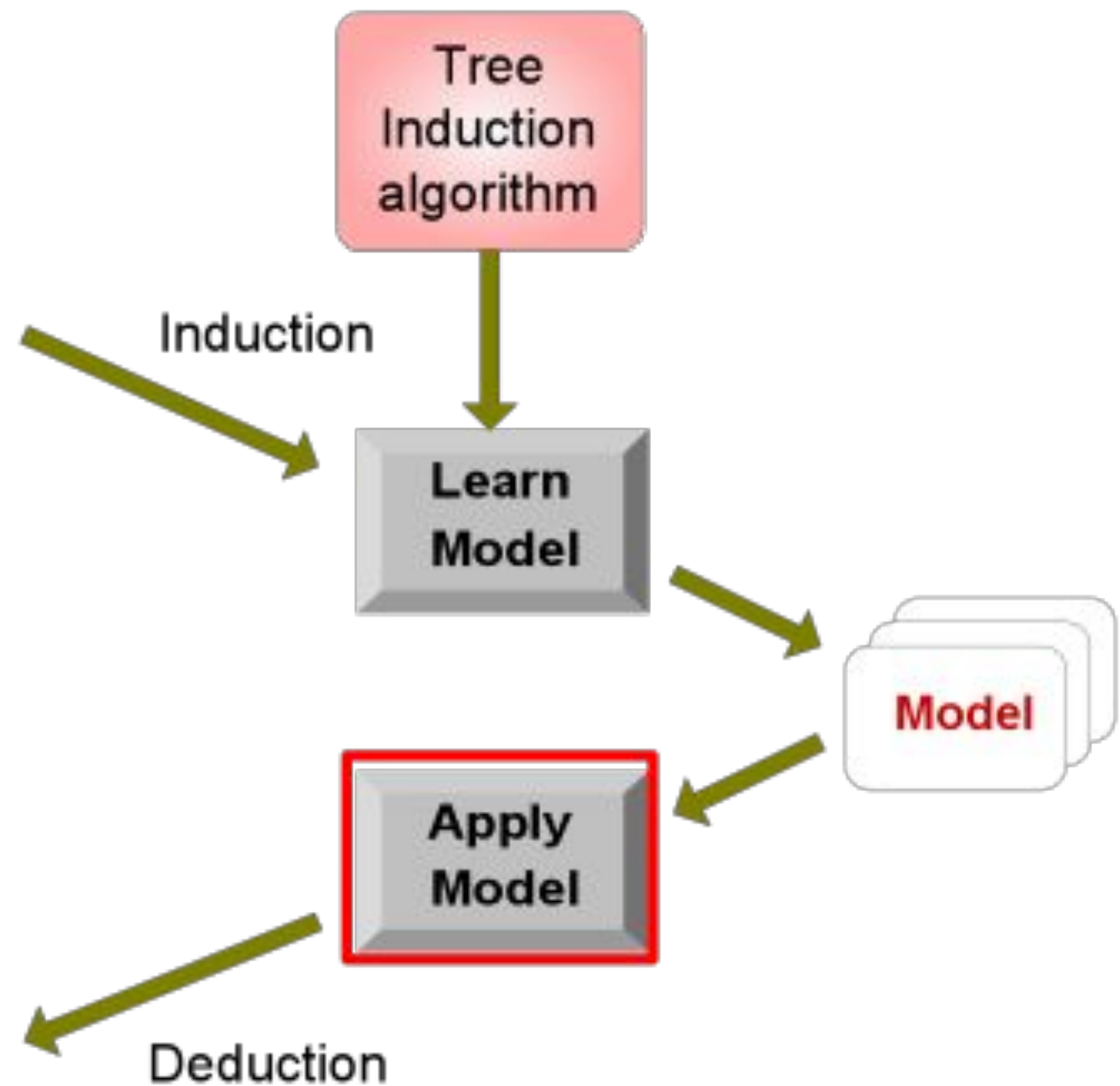
Clasificando con un árbol de decisión

Tid	Attrib1	Attrib2	Attrib3	Class
1	Yes	Large	125K	No
2	No	Medium	100K	No
3	No	Small	70K	No
4	Yes	Medium	120K	No
5	No	Large	95K	Yes
6	No	Medium	60K	No
7	Yes	Large	220K	No
8	No	Small	85K	Yes
9	No	Medium	75K	No
10	No	Small	90K	Yes

Training Set

Tid	Attrib1	Attrib2	Attrib3	Class
11	No	Small	55K	?
12	Yes	Medium	80K	?
13	Yes	Large	110K	?
14	No	Small	95K	?
15	No	Large	67K	?

Test Set

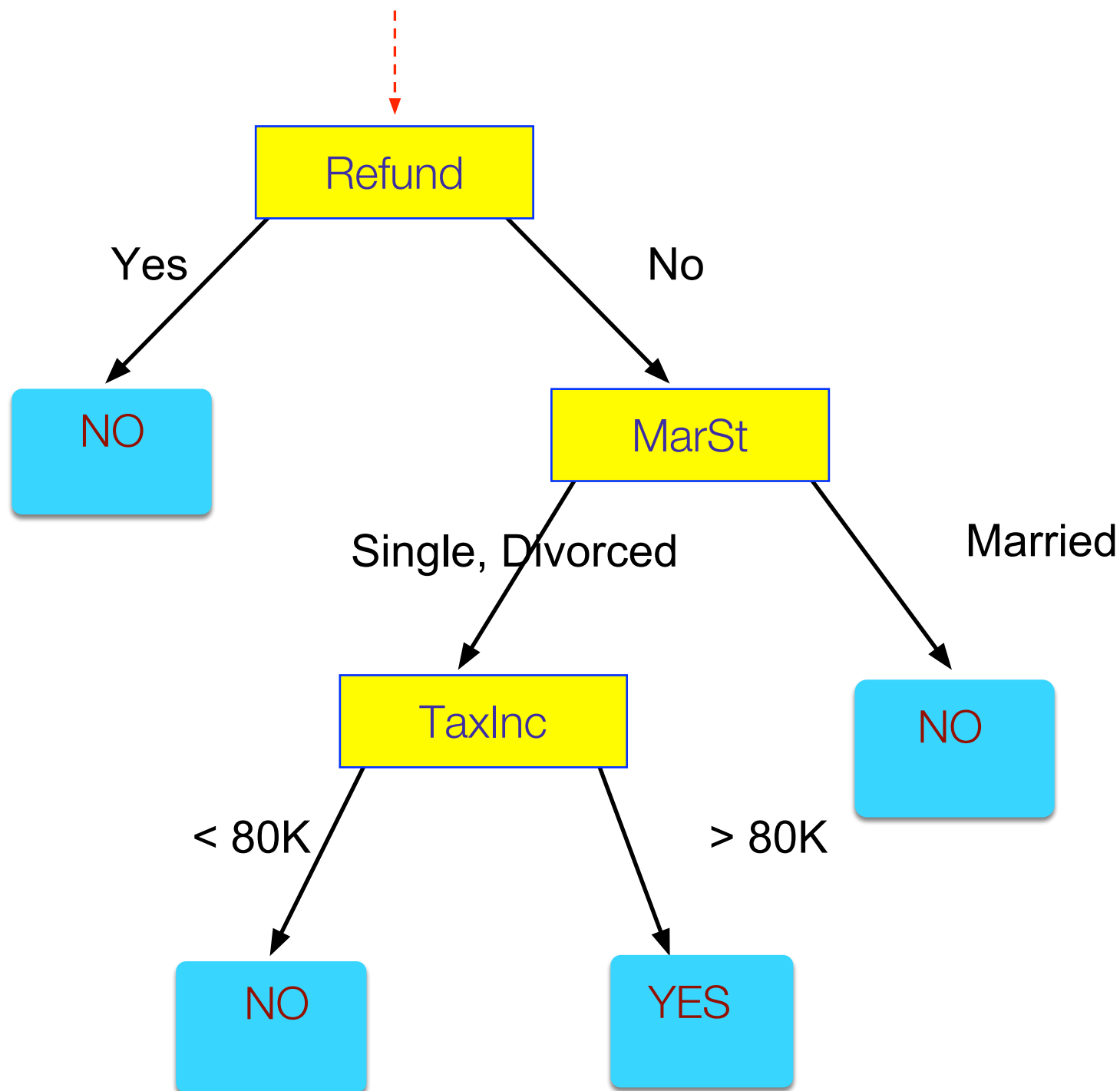


Aplicamos el modelo

Comenzamos en la raíz

Dato de Evaluación

Refund	Marital Status	Taxable Income	Cheat
No	Married	80K	?



Clasificando con un árbol de decisión

- Muchos algoritmos
 - CART
 - ID3, C4.5 (J48 en Weka)
 - SLIQ, SPRINT

Construyendo un Árbol de Decisión

- Estrategia: Top down (greedy) - Divide y vencerás recursiva
 - Primero: seleccionar un atributo para el nodo raíz y crear rama para cada valor posible del atributo .
 - Luego: dividir las instancias del dataset en subconjuntos, uno para cada rama que se extiende desde el nodo.
 - Por último: repetir de forma recursiva para cada rama, utilizando sólo las instancias que llegan a ésta.
- Detenerse cuando todas las instancias del nodo sean de la misma clase.

Un árbol de decisión hace cortes perpendiculares a los ejes

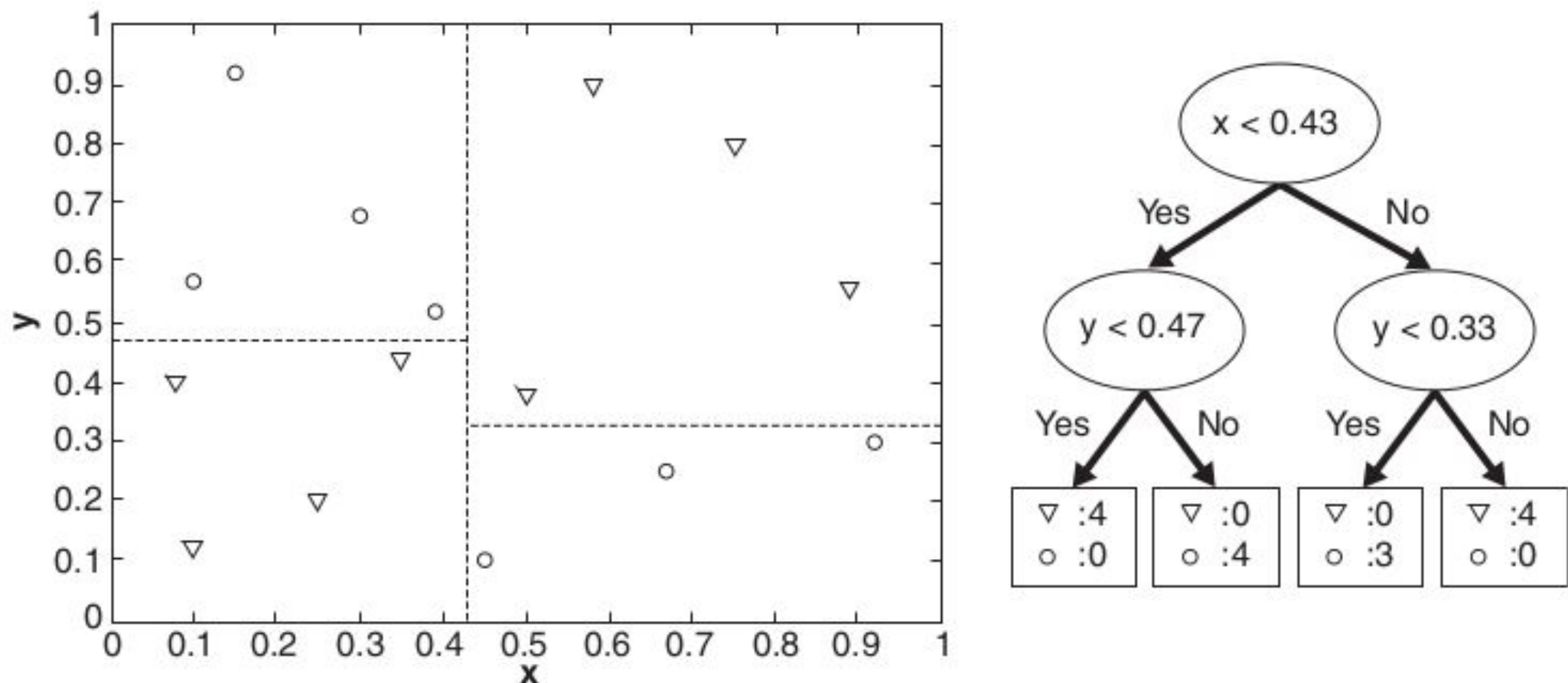


Figure 3.20. Example of a decision tree and its decision boundaries for a two-dimensional data set.

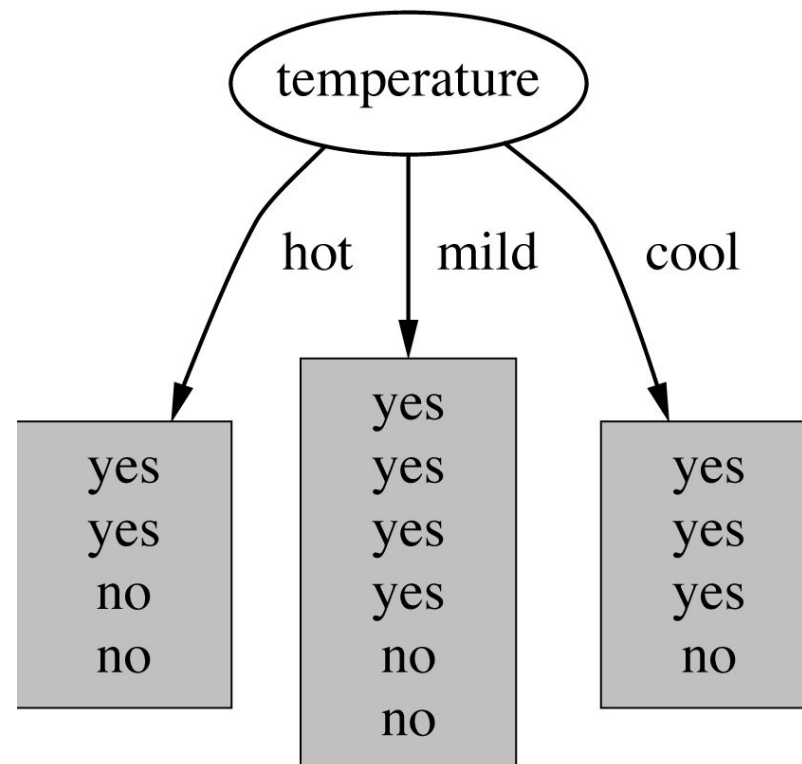
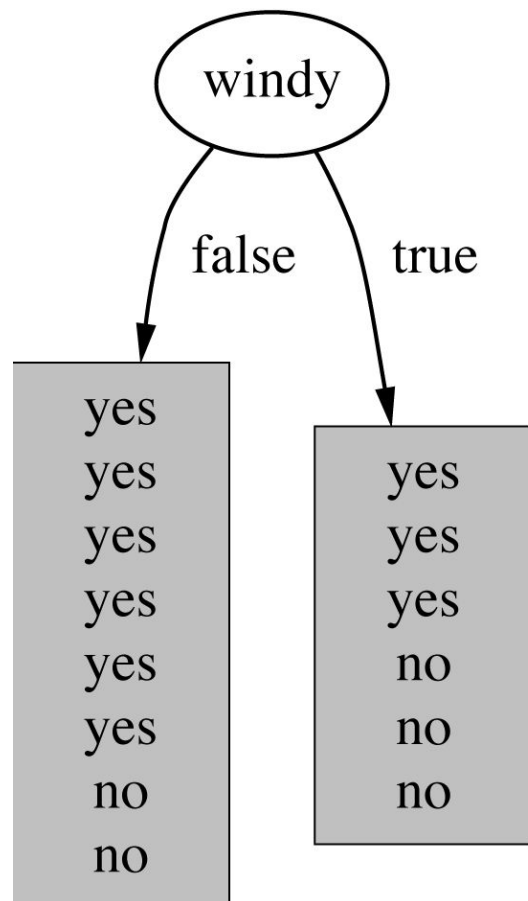
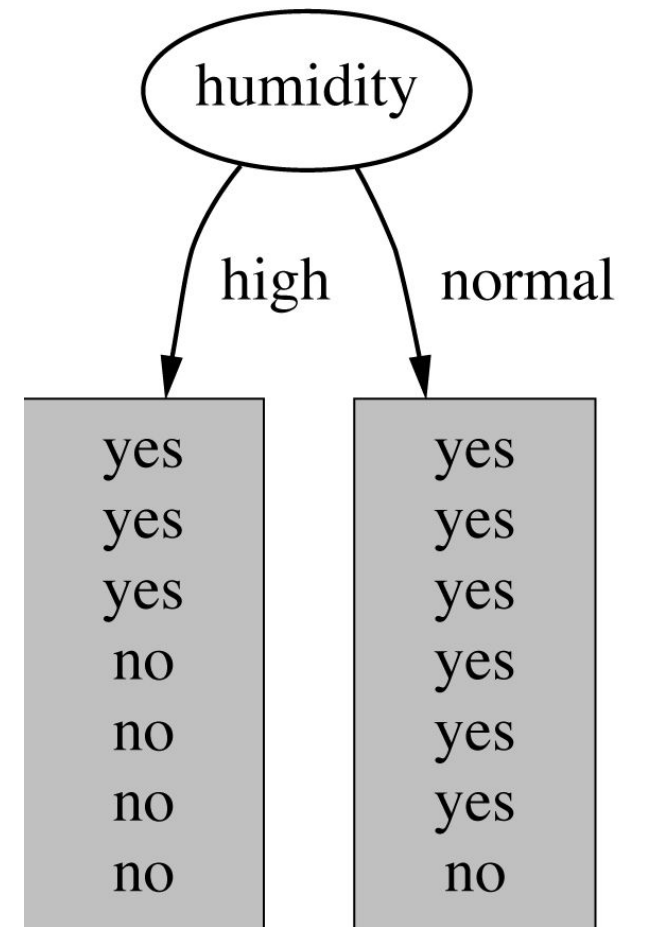
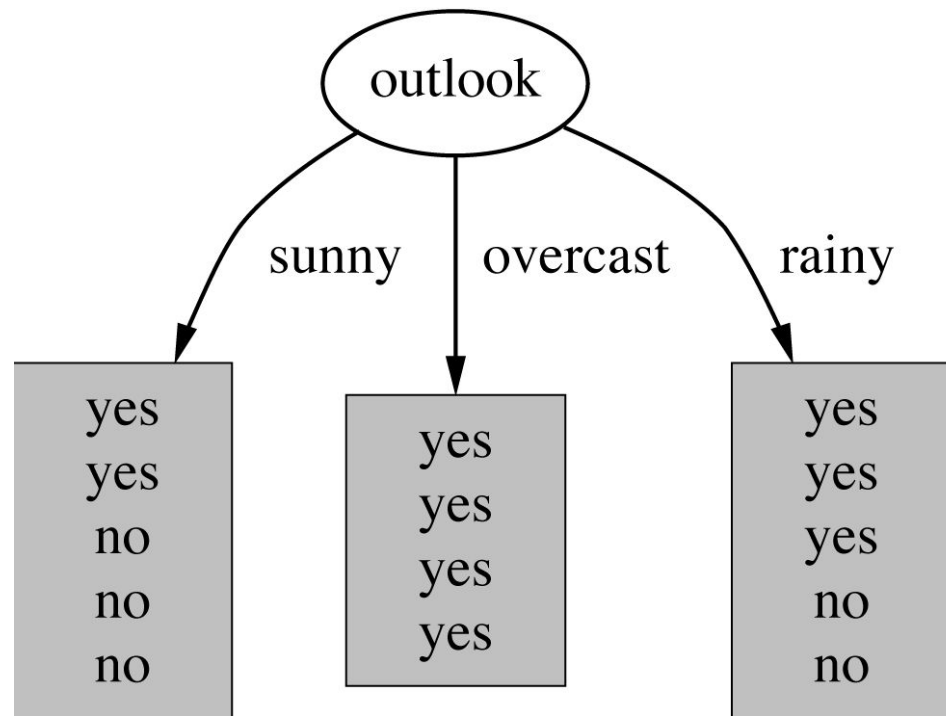
El dataset Weather

Condiciones para salir a jugar tenis:

Table 4.6 **The weather data with identification codes.**

ID code	Outlook	Temperature	Humidity	Windy	Play
a	sunny	hot	high	false	no
b	sunny	hot	high	true	no
c	overcast	hot	high	false	yes
d	rainy	mild	high	false	yes
e	rainy	cool	normal	false	yes
f	rainy	cool	normal	true	no
g	overcast	cool	normal	true	yes
h	sunny	mild	high	false	no
i	sunny	cool	normal	false	yes
j	rainy	mild	normal	false	yes
k	sunny	mild	normal	true	yes
l	overcast	mild	high	true	yes
m	overcast	hot	normal	false	yes
n	rainy	mild	high	true	no

¿Cómo escoger atributos?



Criterio para escoger el mejor atributo

- ¿Qué atributo escojo?
 - La idea es crear el árbol más pequeño posible.
 - Heurística: escoge el atributo que produce nodos lo más “puros” posible.
- El criterio más popular de pureza:
information gain
 - Information gain crece cuando crece la pureza promedio de los subconjuntos.
- Estrategia: escoger el atributo que maximiza el valor de information gain.

Computando la Información

La información se puede medir en **bits**

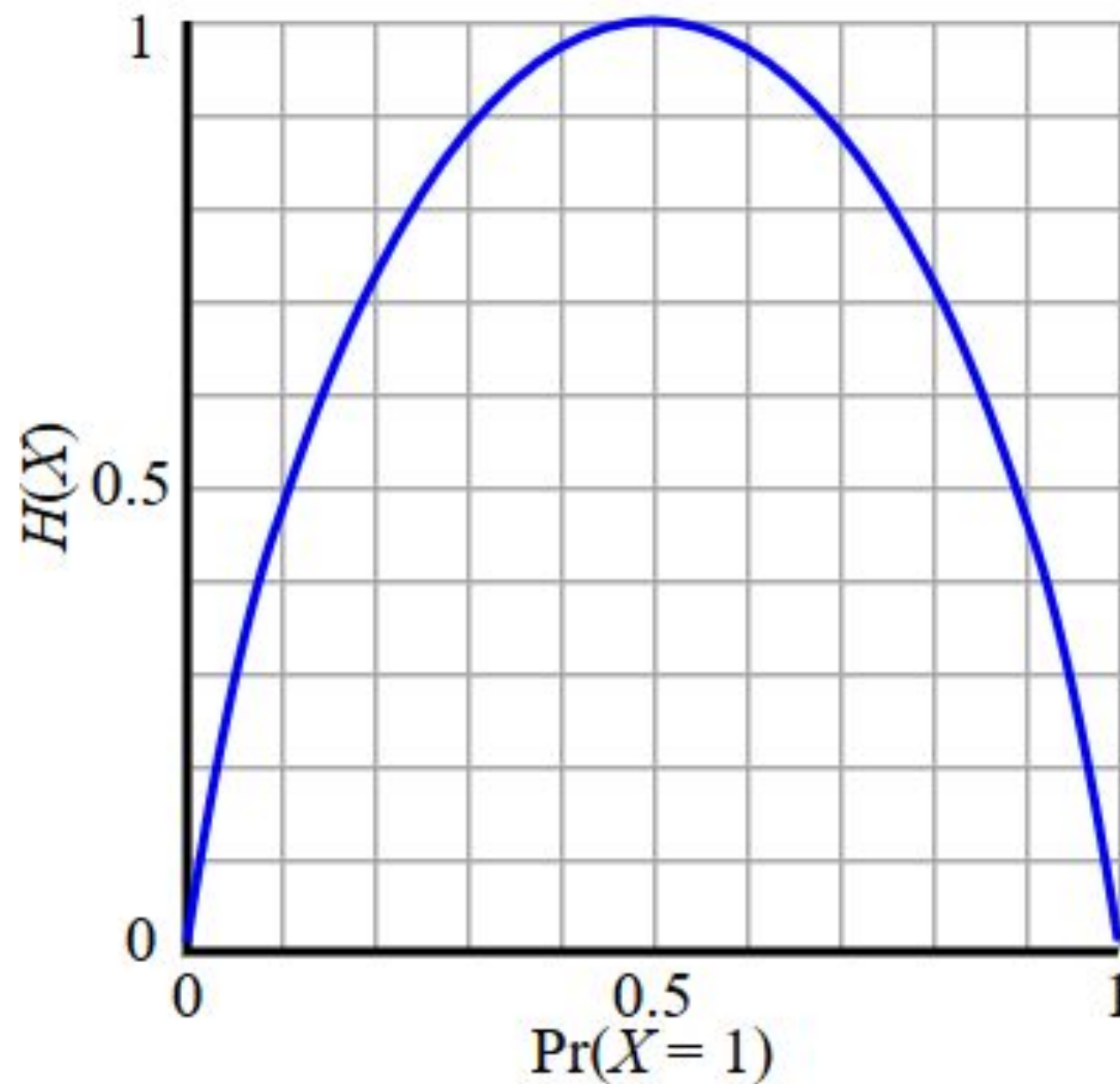
- **Entropía:** información promedio requerida para codificar un evento dado una distribución de probabilidad (viene de la teoría de información de Claude Shannon).
- La entropía nos entrega la información esperada en bits (puede ser una fracción).

Fórmula para calcular la entropía:

$$\text{entropy}(p_1, p_2, \dots, p_n) = -p_1 \log_2 p_1 - p_2 \log_2 p_2 \dots - p_n \log_2 p_n$$

$$H(X) = - \sum_{i=1}^n P(x_i) \log_b P(x_i)$$

Entropía para dos Clases con distintas Proporciones



La entropía toma su máximo valor cuando $p=0.5$ (máxima incerteza).

Ejemplo: atributo *outlook*

- *Outlook = Sunny* :

$$\text{info}([2,3]) = \text{entropy}(2/5,3/5) = -2/5 \log(2/5) - 3/5 \log(3/5) = 0.971 \text{ bits}$$

- *Outlook = Overcast* :

$$\text{info}([4,0]) = \text{entropy}(1,0) = -1 \log(1) - 0 \log(0) = 0 \text{ bits}$$

Nota: esto normalmente queda indefinido

- *Outlook = Rainy* :

$$\text{info}([2,3]) = \text{entropy}(3/5,2/5) = -3/5 \log(3/5) - 2/5 \log(2/5) = 0.971 \text{ bits}$$

- Información esperada para el atributo

$$\text{info}([3,2],[4,0],[3,2]) = (5/14) \times 0.971 + (4/14) \times 0 + (5/14) \times 0.971 = 0.693 \text{ bits}$$

Calculando information gain

- Information gain: Información antes del split – información después del split

$$Gain(S, D) = H(S) - \sum_{V \in D} \frac{|V|}{|S|} H(V)$$

$$\begin{aligned} \text{gain}(\text{Outlook}) &= \text{info}([9,5]) - \text{info}([2,3],[4,0],[3,2]) \\ &= 0.940 - 0.693 \\ &= 0.247 \text{ bits} \end{aligned}$$

- Information gain para los atributos de los datos de weather:

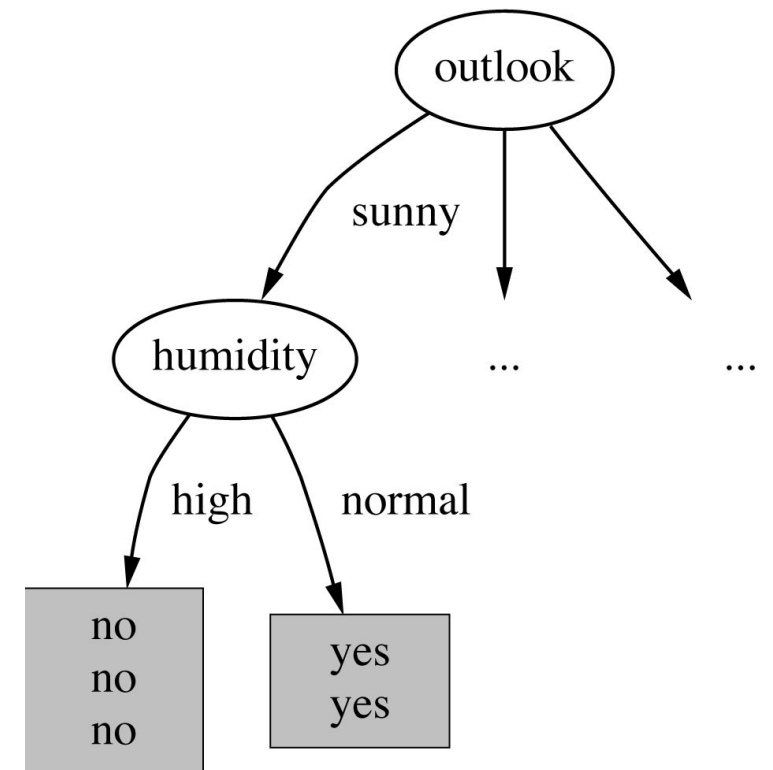
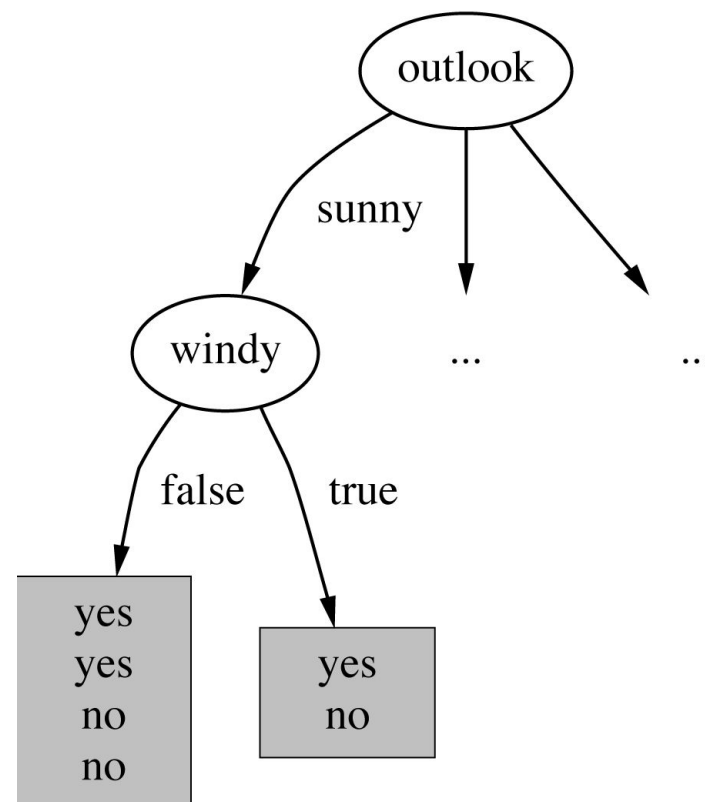
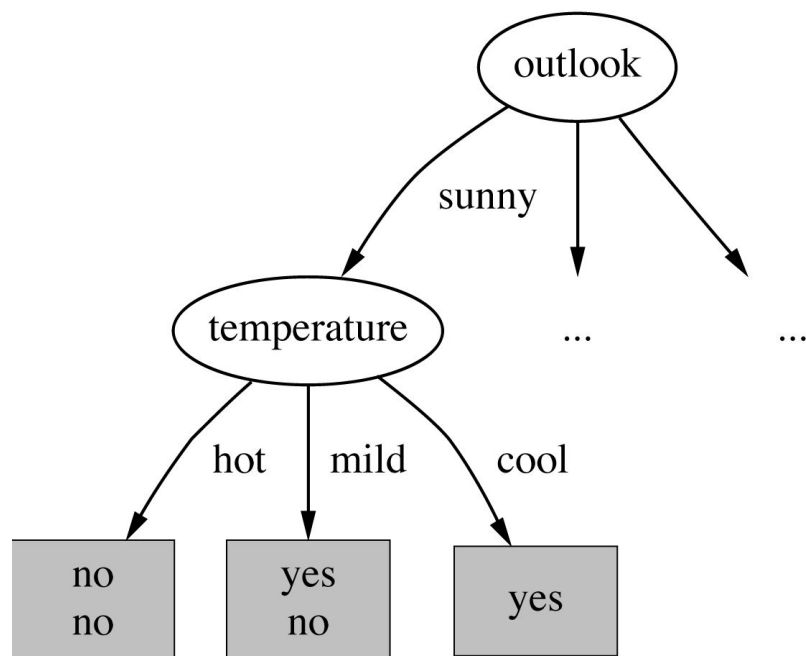
$$\text{gain}(\text{Outlook}) = 0.247 \text{ bits}$$

$$\text{gain}(\text{Temperature}) = 0.029 \text{ bits}$$

$$\text{gain}(\text{Humidity}) = 0.152 \text{ bits}$$

$$\text{gain}(\text{Windy}) = 0.048 \text{ bits}$$

Seguimos particionando

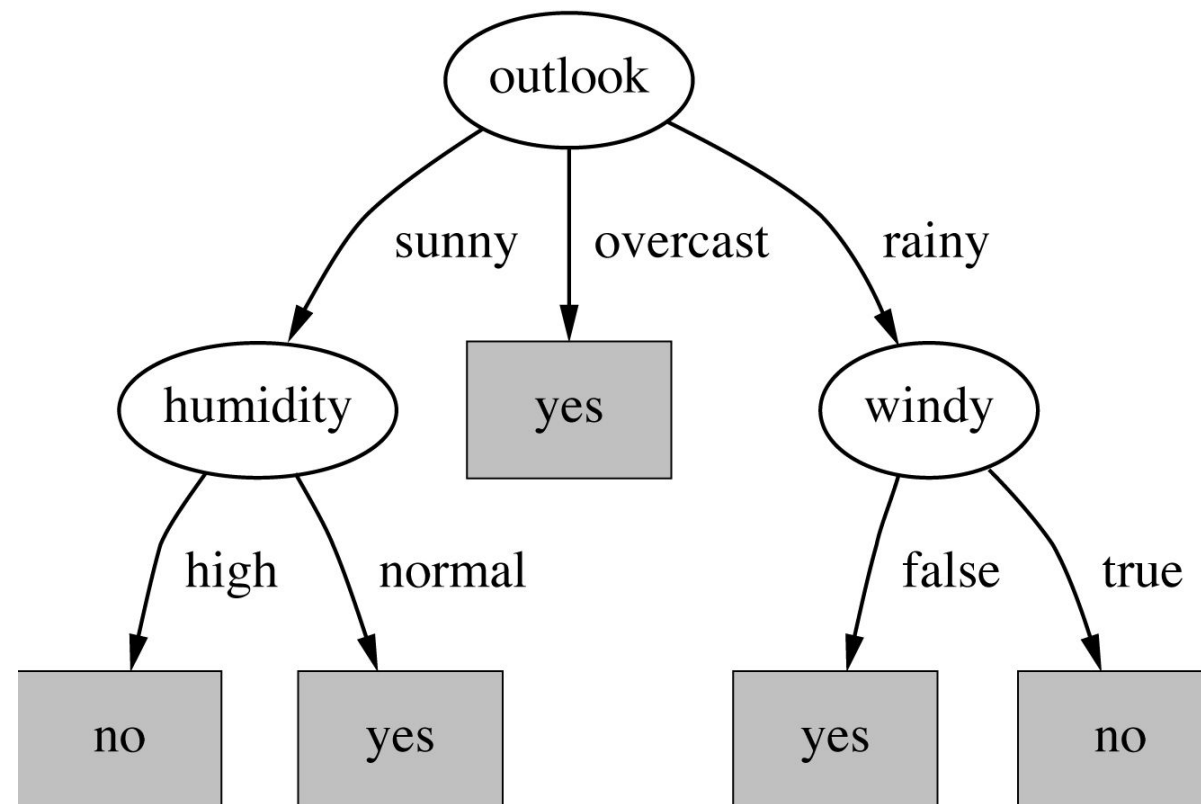


$\text{gain}(\text{Temperature}) = 0.571$ bits

$\text{gain}(\text{Humidity}) = 0.971$ bits

$\text{gain}(\text{Windy}) = 0.020$ bits

Árbol de Decisión Resultante



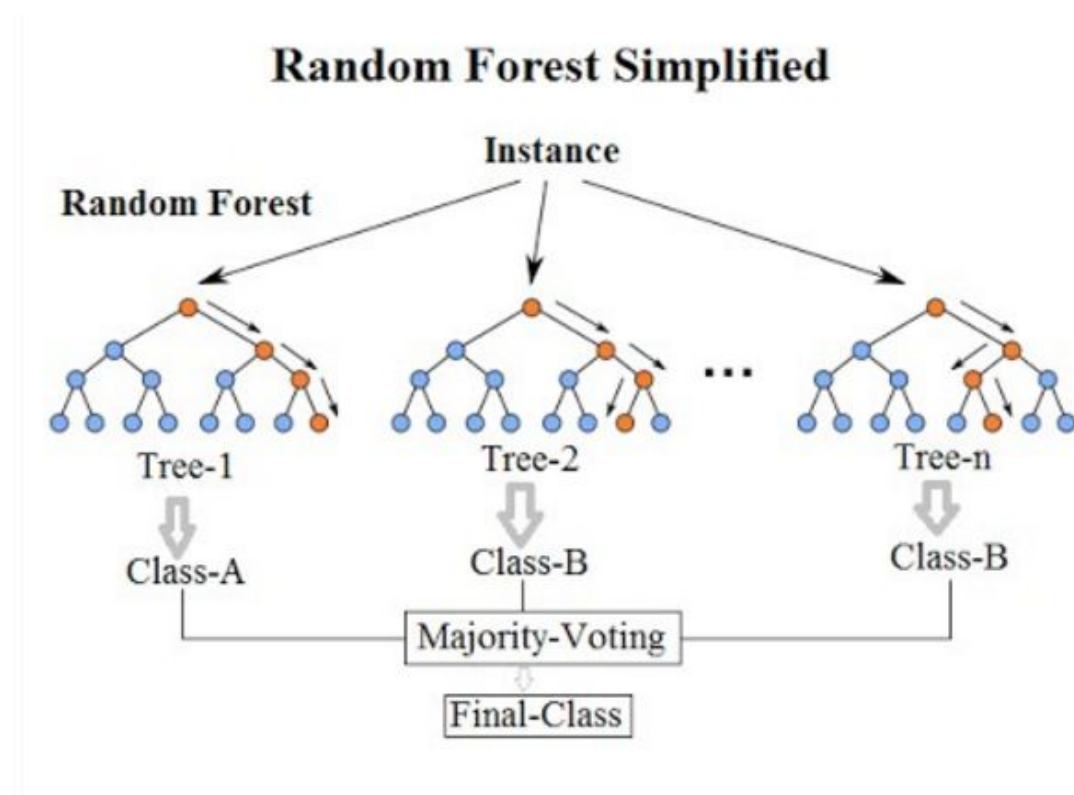
- Nota: no todas las hojas tienen que ser puras; a veces instancias idénticas tienen clases diferentes.
 - → El splitting termina cuando los datos no se pueden seguir particionando.
- Se puede exigir un mínimo número de instancias en la hoja para evitar sobreajuste.
- Puede predecir probabilidades usando las frecuencias relativas de las clases en la hoja.

Otras cosas sobre árboles

- Information gain tiende a favorecer atributos de muchas categorías por su capacidad de fragmentar el dataset en muchas bifurcaciones.
- Una solución es usar una métrica llamada **Gain ratio**.
- **Gain ratio** toma en cuenta el número y el tamaño de las ramas (respecto a la cantidad de ejemplos que alcanzan) al elegir un atributo.
- Los atributos numéricos son discretizados, escogiendo la partición que maximice information gain (o gain ratio).
- Existen otras métricas para medir pureza distintas a entropía como el índice de **Gini** $= 1 - \text{Pr}(\text{Sacar dos ejemplos de la misma clase})$.
- Para evitar sobre-ajuste los árboles pueden ser **podados** (se eliminan ramas que alcanzan muy pocos ejemplos).
- La gran ventaja de los árboles es la **interpretabilidad**.

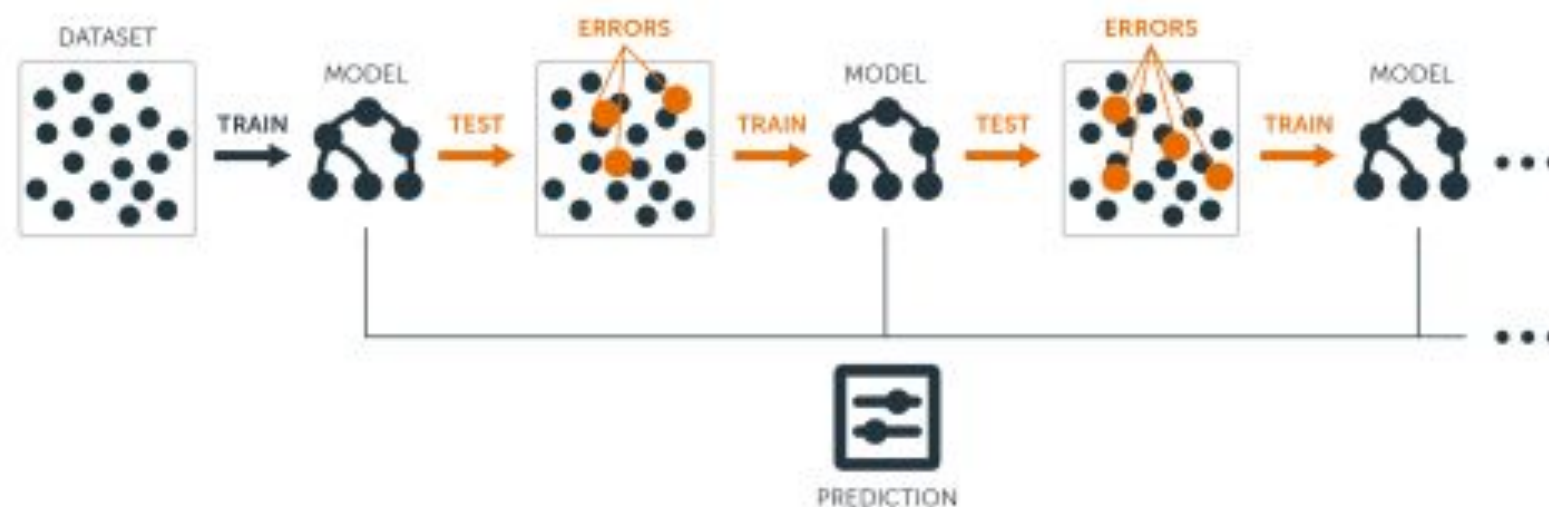
Random Forest

- Es posible combinar varios árboles de decisión para tener modelos con mayor capacidad predictiva.
- Random Forest:
 - un **ensamble** de árboles de decisión (a veces de un sólo nivel).
 - Cada árbol se entrena con distintas muestras aleatorias (con reemplazo) del dataset de entrenamiento.
 - Luego los distintos árboles votan para hacer predicciones finales



Gradient Boosting

- Boosting es otro enfoque para combinar varios clasificadores
- Idea: se entrenan modelos de manera secuencial donde cada modelo siguiente trata de corregir los errores del modelo anterior
- En Gradient Boosting los modelos son **árboles de decisión**.
- Cada árbol se entrena para predecir los errores del anterior.
- La predicción final es una suma ponderada de todos los árboles.
- Existen implementaciones eficientes de la idea como XGBoost y CatBoost para atributos categóricos.

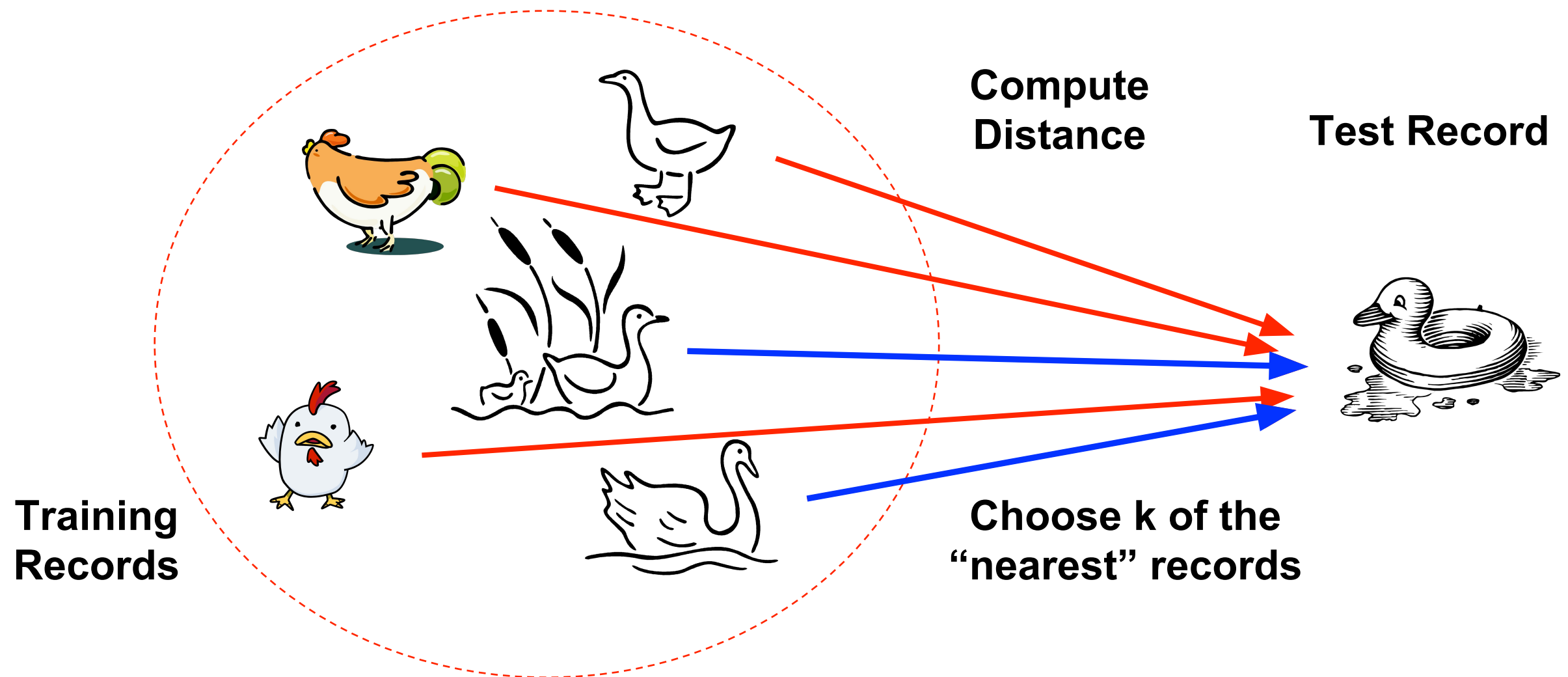


Clasificador KNN

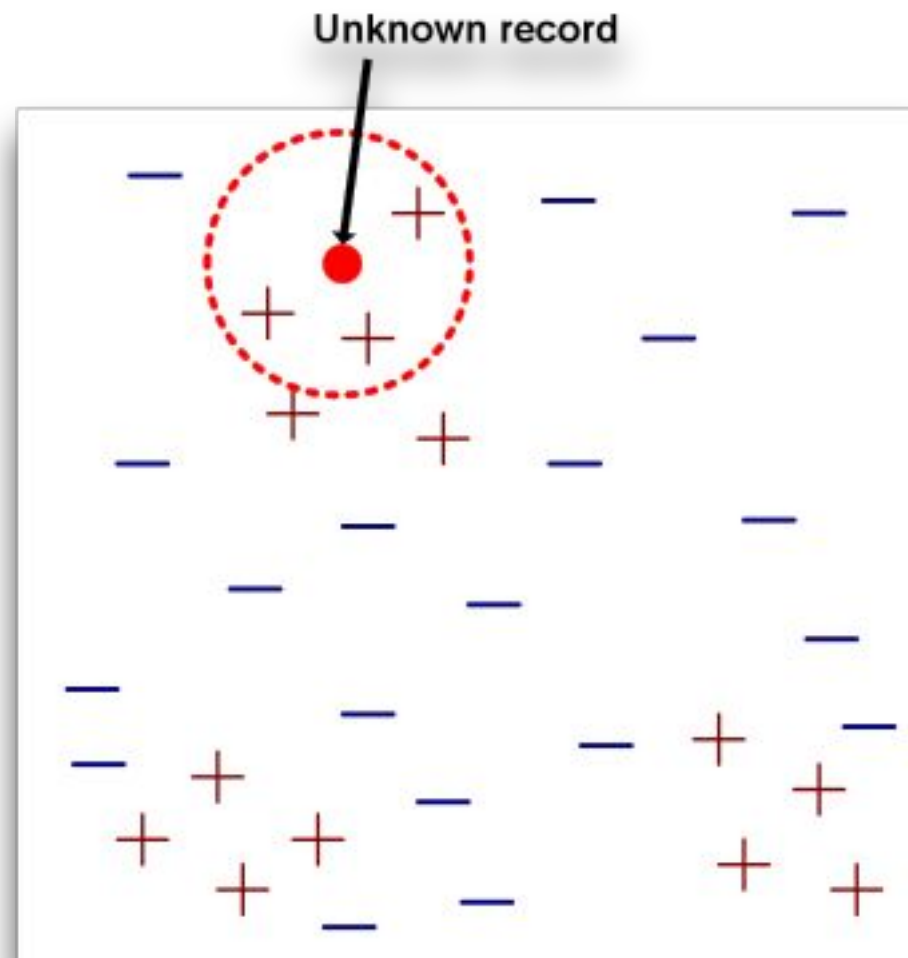
- Nearest Neighbor Classifier (o k-nn)
- Es un clasificador basado en **instancias**
- Conocido como **lazy**
 - Usa los **k** puntos más cercanos (nearest neighbors) para realizar la clasificación

Clasificadores KNN

- Idea:
 - **If it walks like a duck, quacks like a duck, then it's probably a duck**



Clasificadores KNN



- Necesita 3 cosas
 - Set de records almacenados.
 - Métrica de distancia para calcular la distancia entre records.
 - Valor de k , el número de vecinos cercanos a obtener.
- Para clasificar un récord nuevo
 - Calcular la distancia los los récords almacenados.
 - Identificar k nearest neighbors .
 - Utilizar la clase de los knn para asignar la clase al record nuevo (e.j. voto de la mayoría).

Métricas de distancia

- Para atributos numéricos usamos la distancia euclidiana:

$$d(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \sqrt{\sum_{k=1}^n (x_k - y_k)^2},$$

- Una versión más general es la distancia de **Minkowsky** (r=1 => distancia Manhattan, r=2 => distancia euclideana)

$$d(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \left(\sum_{k=1}^n |x_k - y_k|^r \right)^{1/r}$$

- Es muy importante que los atributos estén normalizados.

Escalando atributos

- Problemas de escalas

- Atributos deben ser escalados para prevenir que algún atributo domine la métrica de distancia

- Ejemplos:

- La altura de una persona puede variar entre 1.5m a 1.8m

- El peso puede variar entre 40 kg a 150 kg

- El ingreso de una persona puede variar entre \$150K a \$10M

Técnicas para escalar atributos

- Normalización a media cero y varianza unitaria:

$$\frac{x - \mu_x}{\sigma_x}$$

- Normalización a rango entre 0 y 1:

$$\frac{x - \min_x}{\max_x - \min_x}$$

OJO: Apliquen la misma transformación a los datos de training y testing -> los valores de normalización se calculan sobre los datos de training.

Distancia y similitud

- Es importante distinguir entre métricas de similitud y métricas de distancia.
- Similitud: entre más cerca dos objetos mayor el valor de la métrica.
- Distancia: entre más lejos dos objetos mayor el valor de la métrica.

Attribute Type	Dissimilarity	Similarity
Nominal	$d = \begin{cases} 0 & \text{if } x = y \\ 1 & \text{if } x \neq y \end{cases}$	$s = \begin{cases} 1 & \text{if } x = y \\ 0 & \text{if } x \neq y \end{cases}$
Ordinal	$d = x - y / (n - 1)$ (values mapped to integers 0 to $n-1$, where n is the number of values)	$s = 1 - d$
Interval or Ratio	$d = x - y $	$s = -d, s = \frac{1}{1+d}, s = e^{-d},$ $s = 1 - \frac{d - \min_d}{\max_d - \min_d}$

Similitud Coseno

- Cuando nuestros objetos son vectores sparse (muchas columnas con cero) es conveniente usar la similitud coseno.
- Corresponde al coseno del ángulo entre los dos vectores.

$$\cos(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \frac{\mathbf{x} \cdot \mathbf{y}}{\|\mathbf{x}\| \|\mathbf{y}\|} \quad \|\mathbf{x}\| = \sqrt{\sum_{k=1}^n x_k^2} = \sqrt{\mathbf{x} \cdot \mathbf{x}}.$$

- Un ejemplo común es cuando tratamos documentos como bolsas de palabras (cada columna es una palabra del vocabulario).

Ejemplo:

$$\mathbf{x} = (3, 2, 0, 5, 0, 0, 0, 2, 0, 0)$$

$$\mathbf{y} = (1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 1, 0, 2)$$

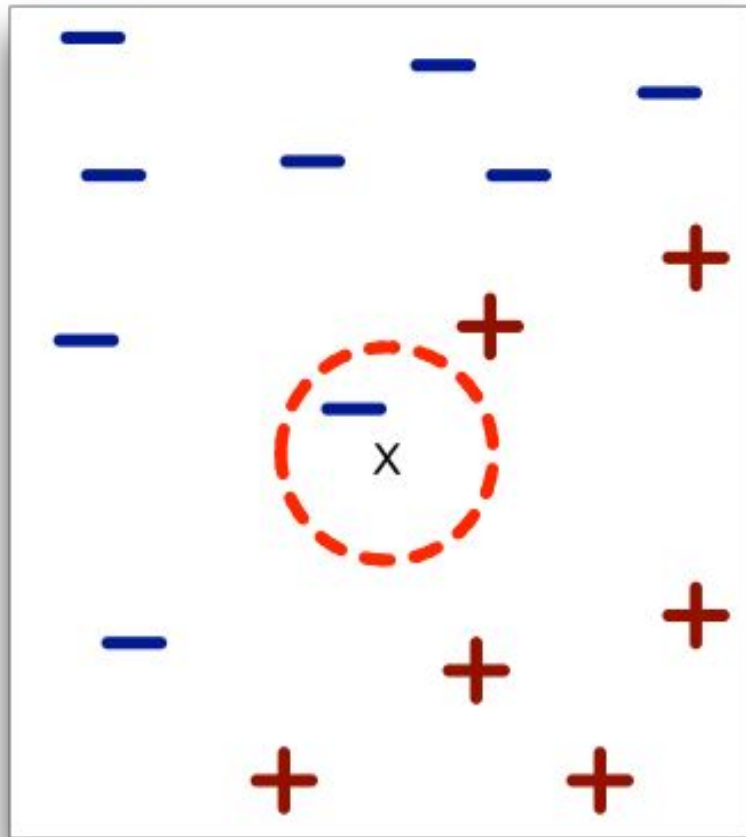
$$\mathbf{x} \cdot \mathbf{y} = 3 * 1 + 2 * 0 + 0 * 0 + 5 * 0 + 0 * 0 + 0 * 0 + 0 * 0 + 2 * 1 + 0 * 0 + 0 * 2 = 5$$

$$\|\mathbf{x}\| = \sqrt{3 * 3 + 2 * 2 + 0 * 0 + 5 * 5 + 0 * 0 + 0 * 0 + 0 * 0 + 2 * 2 + 0 * 0 + 0 * 0} = 6.48$$

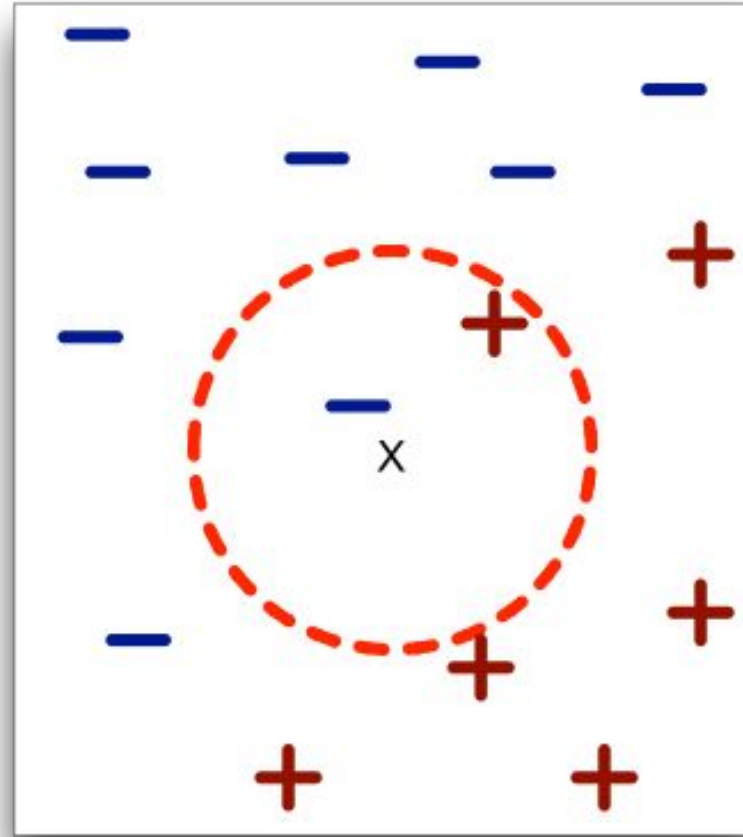
$$\|\mathbf{y}\| = \sqrt{1 * 1 + 0 * 0 + 0 * 0 + 0 * 0 + 0 * 0 + 0 * 0 + 0 * 0 + 1 * 1 + 0 * 0 + 2 * 2} = 2.24$$

$$\cos(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \mathbf{0.31}$$

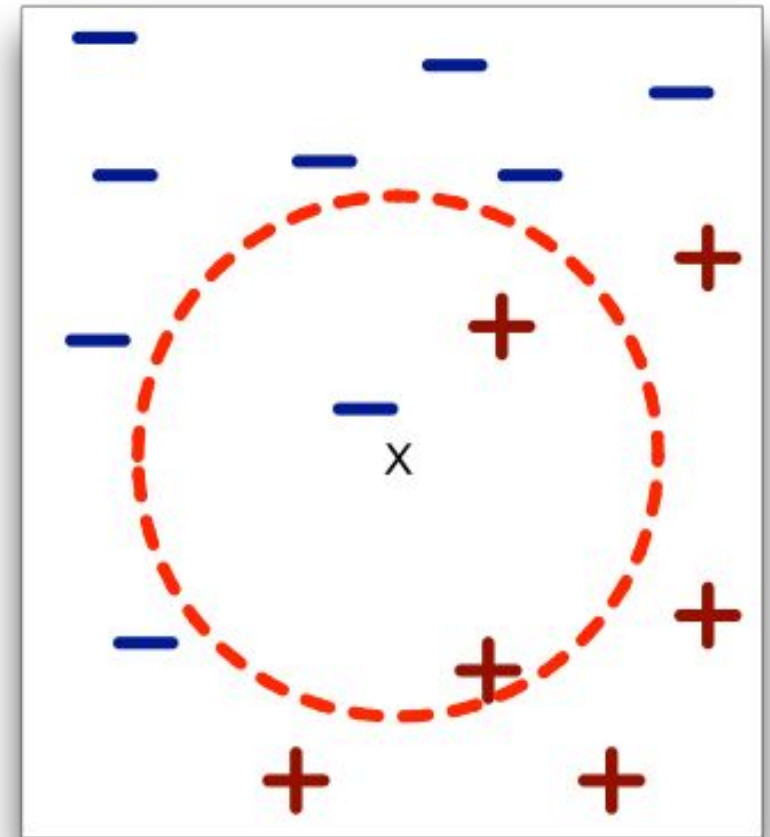
Definición de NN



(a) 1-nearest neighbor



(b) 2-nearest neighbor

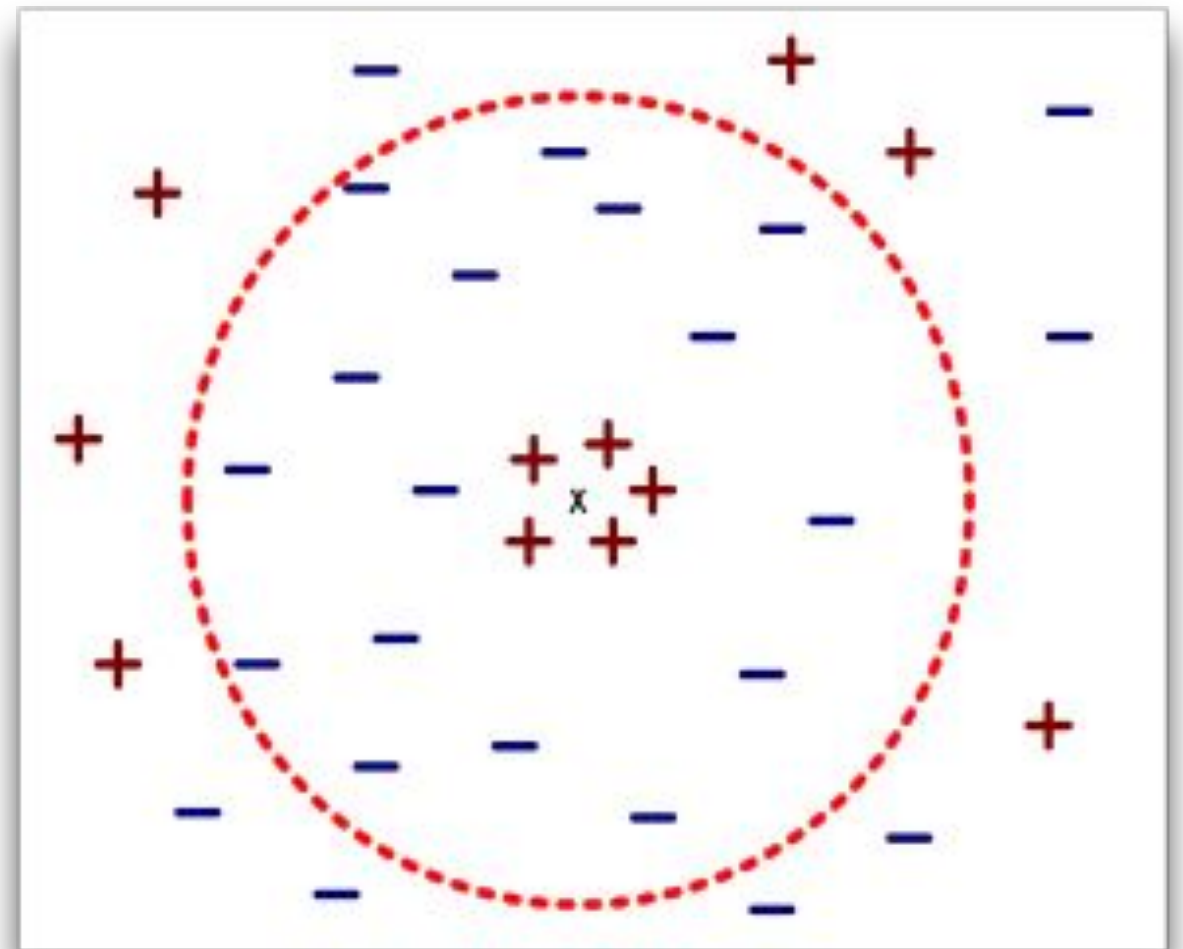


(c) 3-nearest neighbor

K-NN de un record x son los puntos que tienen las k menores distancias a x

Eligiendo el valor de K

- k muy pequeño es susceptible a ruido
- k muy grande puede incluir puntos de otra clase



Clasificación kNN

- Los clasificadores k-NN son **lazy learners**.
- No construyen modelos explícitos, es más flexible ya que no necesita comprometerse con un modelo global a priori.
- Al contrario de otros **eager learners** como los árboles de decisión o clasificadores basados en reglas.
- Es independiente del nro. de clases.
- La clasificación es más costosa (memoria y tiempo).

La Maldición de la Dimensionalidad

- Cuando los datos tienen una alta dimensionalidad KNN está sujeta a la **Maldición de la Dimensionalidad**.
- Fenómeno en que muchos tipos de análisis de datos se vuelven significativamente más difíciles a medida que aumenta la dimensionalidad de los datos.
- Para la clasificación, esto puede significar que no haya suficientes ejemplos para crear un modelo que asigne de forma confiable una clase a todos los ejemplos posibles.
- Para técnicas basadas en distancias (KNN, K-means) las distancias entre objetos se vuelven menos claras cuando hay muchas dimensiones.

Clasificación basada en Naïve Bayes

- Familia de modelos basados en Bayes.
- Veremos Clasificador de Naive Bayes.
- También existen las Redes Bayesianas.

Clasificación Basada en Naïve Bayes

- Modelo que busca **modelar la relación probabilística** entre atributos y clase.
- Modelo generativo, asume una distribución conjunta entre X e Y .
- Supuesto: atributos independientes dado la clase (**naïve assumption**).

Clasificador Bayesiano

- Esquema probabilístico para resolver problemas de clasificación.

- Probabilidad condicional:
$$P(C | A) = \frac{P(A, C)}{P(A)}$$

$$P(A | C) = \frac{P(A, C)}{P(C)}$$

- Teorema de Bayes:
$$P(C | A) = \frac{P(A | C)P(C)}{P(A)}$$

Ejemplo Teorema de Bayes

- Dado:
 - Un doctor sabe que la meningitis produce rigidez de cuello el 50% de las veces.
 - La probabilidad previa de que cualquier paciente tenga meningitis es 1/50,000.
 - La probabilidad previa de que cualquier paciente tenga rigidez en el cuello es de 1/20.
- ¿Si un paciente tiene el cuello rígido, cuál es la probabilidad de que tenga meningitis?

$$P(M | S) = \frac{P(S | M)P(M)}{P(S)} = \frac{0.5 \times 1/50000}{1/20} = 0.0002$$

Clasificador Naïve Bayes

- Considerar cada atributo como variable condicionalmente independiente de la clase (eso es “naive”).
- Dado un record con atributos (A_1, A_2, \dots, A_n) .
 - La meta es predecir la clase C .
 - Específicamente queremos encontrar el C que maximice $P(C | A_1, A_2, \dots, A_n)$.
- ¿Podemos estimar $P(C | A_1, A_2, \dots, A_n)$ directamente de los datos?

Clasificador Naïve Bayes

- Aproximación
- Computar la probabilidad posterior $P(C \mid A_1, A_2, \dots, A_n)$ para todos los valores de C usando el Teorema de Bayes.

$$P(C \mid A_1 A_2 \dots A_n) = \frac{P(A_1 A_2 \dots A_n \mid C) P(C)}{P(A_1 A_2 \dots A_n)}$$

- Elegir un valor de C que maximice $P(C \mid A_1, A_2, \dots, A_n)$.
- Equivalente a elegir un valor de C que maximice $P(A_1, A_2, \dots, A_n \mid C) P(C)$.
- Esto es porque el numerador $P(A_1 A_2 \dots A_n)$ es constante para todas las clases.

Clasificador Naïve Bayes

- Asume independencia entre los atributos A_i cuando la clase está dada (independencia condicional):
 - $P(A_1, A_2, \dots, A_n | C) = P(A_1 | C) P(A_2 | C) \dots P(A_n | C)$.
 - Se puede estimar $P(A_i | C)$ para todos los A_i y C .
 - Un punto nuevo A , se clasifica como C_j si $P(C_j) \prod P(A_i | C_j)$ es máxima (en comparación con otros valores de C).

¿Cómo estimar probabilidades a partir de los datos?

<i>Tid</i>	Refund	Marital Status	Taxable Income	Evade
1	Yes	Single	125K	No
2	No	Married	100K	No
3	No	Single	70K	No
4	Yes	Married	120K	No
5	No	Divorced	95K	Yes
6	No	Married	60K	No
7	Yes	Divorced	220K	No
8	No	Single	85K	Yes
9	No	Married	75K	No
10	No	Single	90K	Yes

- Clase: $P(C_k) = \frac{\text{count}(C_k)}{N}$

- e.g., $P(\text{No}) = 7/10$,
 $P(\text{Yes}) = 3/10$

- Para atributos discretos:

$$P(A_i = b|C_k) = \frac{\text{count}(A_{ik} = b)}{\text{count}(C_k)}$$

- donde $\text{count}(A_{ik} = b)$ es el número de instancias que tiene el valor b para el atributo A_i y que pertenecen a la clase C_k

- Ejemplos:

- $P(\text{Status} = \text{Married} | \text{No}) = 4/7$
 $P(\text{Refund} = \text{Yes} | \text{Yes}) = 0$

Laplace Smoothing

- $P(C \mid A_1, A_2, \dots, A_n)$ se puede ir a cero cuando $|A_{ik}=b| = 0$, osea cuando para alguna clase C_k no hay ningún ejemplo con $A_i=b$.
- En ese caso Naive Bayes le asignaría probabilidad cero a la clase C_k a cualquier ejemplo con $|A_{ik}=b| = 0$, ignorando el valor de los otros atributos (acuérdense que las probabilidades se multiplican).
- Eso no es bueno para la generalización del modelo.
- Laplace Smoothing: soluciona el problema sumándole 1 a todos los conteos para que ninguna probabilidad quede en cero:

$$P(A_i = b|C_k) = \frac{\text{count}(A_{ik} = b) + 1}{\text{count}(C_K) + \text{values}(A_i)}$$

- Donde $\text{values}(A_i)$ es la cantidad de categorías del atributo A_i .
- Con Laplace smoothing $P(\text{Status} = \text{Married}|\text{No}) = (4+1)/(7+3)$

Atributos Numéricos

- ¿Cómo calculamos $P(A_{ik}=b|C_k)$ cuando el atributo A_i es numérico (ej: Taxable income) ?
- Una opción es discretizar el atributo y proceder de la forma anterior.
- Otra solución es asumir que el atributo sigue una distribución Gaussiana y estimar los parámetros de la función de densidad:

$$P(A_i = b|C_k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_{ik}} \exp -\frac{(b-\mu_{ik})^2}{2\sigma_{ik}^2}$$

- Aquí μ_{ik} y σ_{ik} se estiman como la media muestral y la desviación estándar de los ejemplos del atributo A_i cuando la clase es C_k
- Sea A_i = Taxable income y C_k =No, μ_{ik} = mean(125,100,70,120,60,220,75) =110 y σ_{ik} =sd(125,100,70,120,60,220,75)=54.5

$P(\text{Taxable Income} = 130 | \text{No}) = \text{dnorm}(x=130, \text{mean}=110, \text{sd}=54.5) = 0.006843379$

Naïve Bayes (Resumen)

- Es robusto ante puntos de ruido aislados.
- Maneja valores faltantes ignorando la instancia durante los cálculos de estimación de probabilidades.
- Robusto a atributos irrelevantes (afectan de igual manera a todas las clases).
- El supuesto de independencia entre atributos puede no ser cierto en todos los casos.
- Las redes Bayesianas o los modelos gráficos dirigidos permiten hacer modelos probabilísticos con supuestos de independencia menos restrictivos.



dcc

CIENCIAS DE LA COMPUTACIÓN
UNIVERSIDAD DE CHILE

www.dcc.uchile.cl

f @ in  / DCCUCHILE