Machine Learning

Árboles de decisión

Christian Oliva Moya
Pedro Ramón Ventura Gómez

Introducción - Árboles de decisión

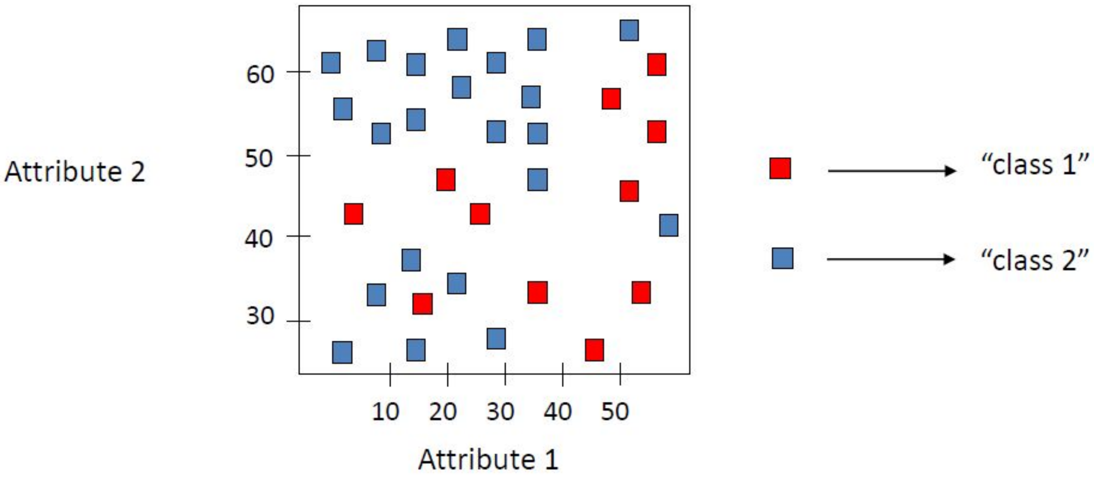
Un árbol de decisión es un algoritmo de ML:

- Supervisado
- De clasificación
- No paramétrico

Divide el espacio de forma recursiva utilizando reglas de decisión

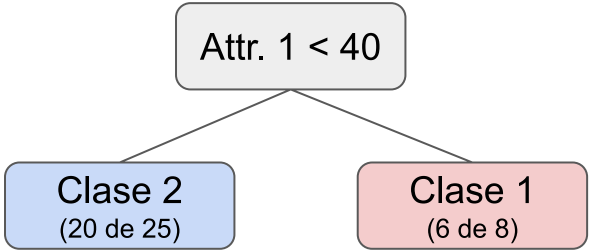
Árboles de decisión - Ejemplo

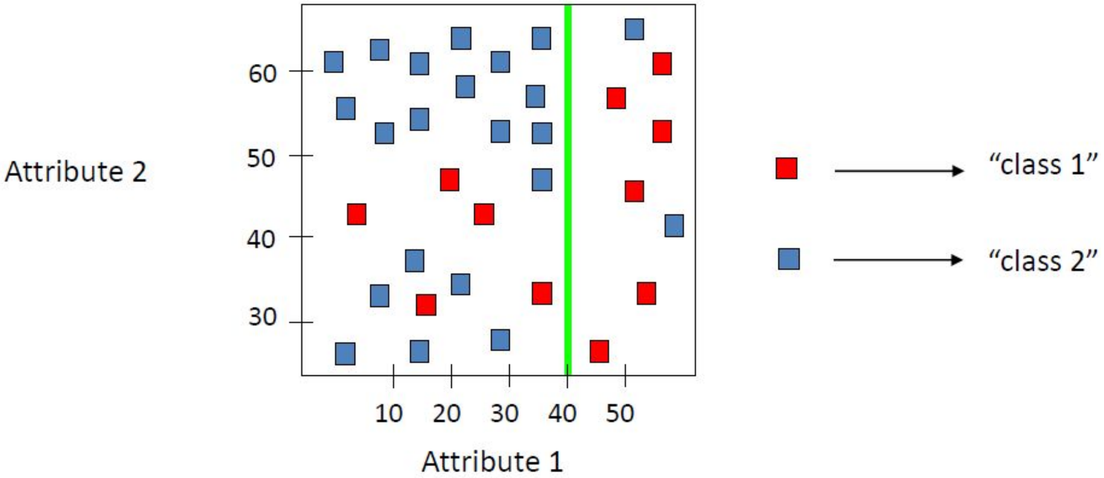
Pongamos un ejemplo:



Árboles de decisión - Ejemplo

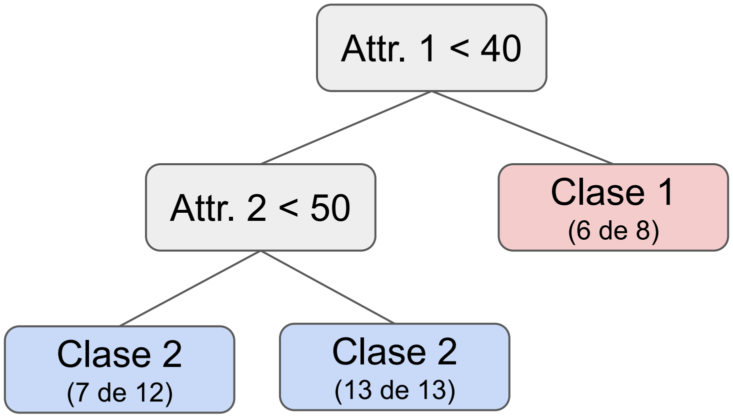
Pongamos un ejemplo:

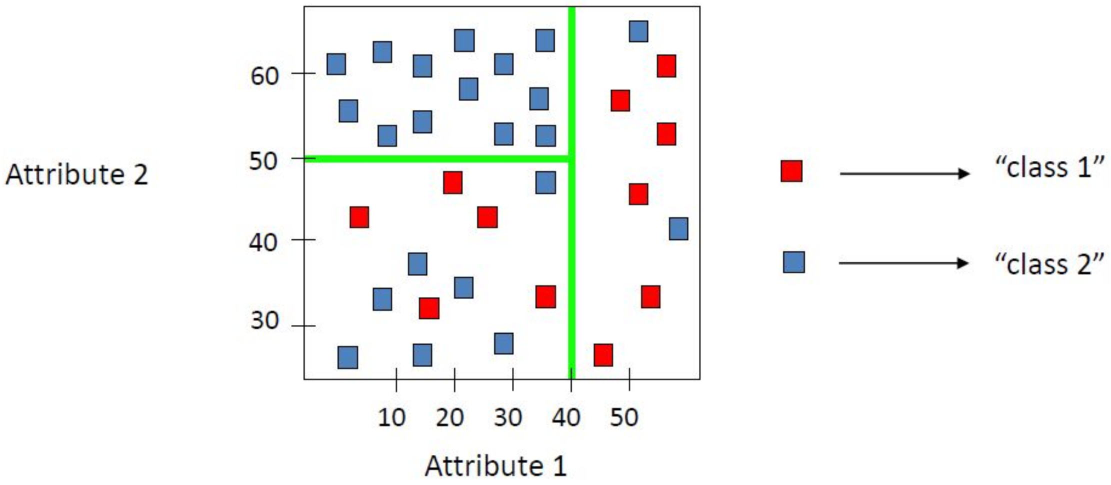




Árboles de decisión - Ejemplo

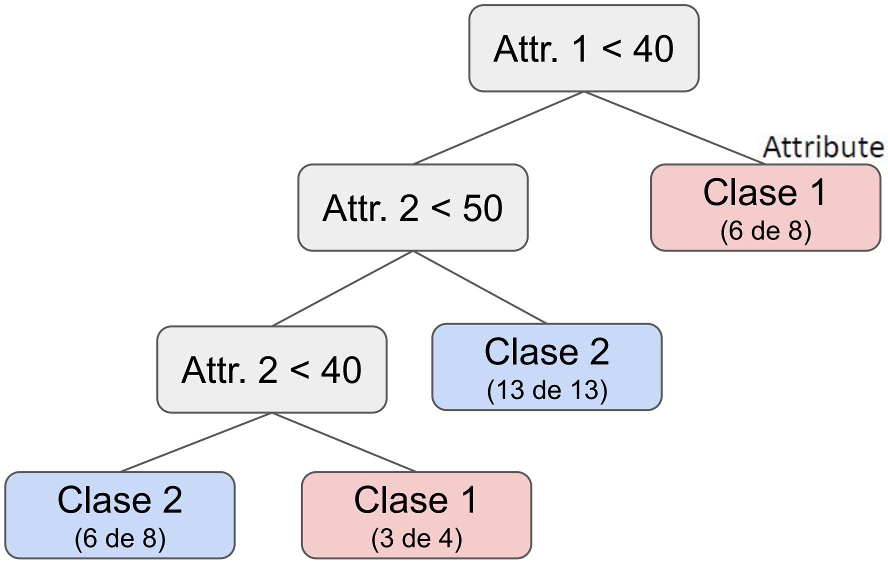
Pongamos un ejemplo:

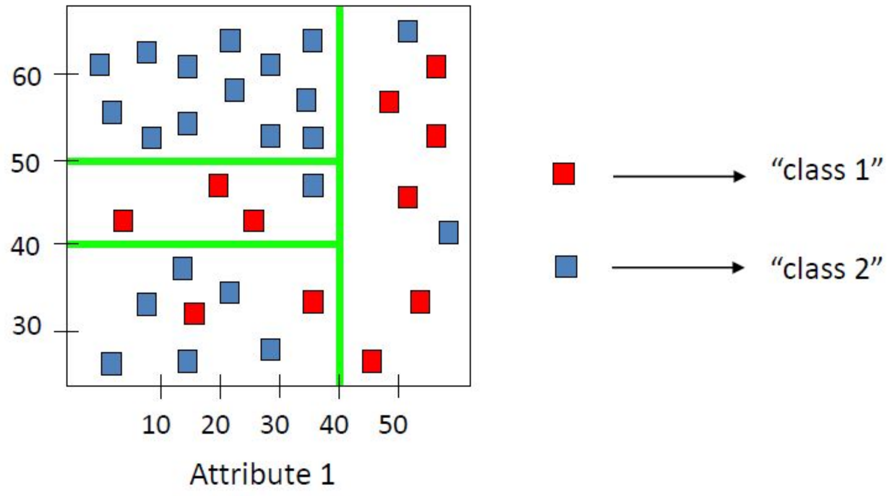




Árboles de decisión - Ejemplo

Pongamos un ejemplo:





Árboles de decisión - Conceptos

- Diagrama en forma de árbol que representa condiciones sucesivas sobre los atributos para clasificar una instancia
- Tipos de nodos:
  - Nodos internos:
    - Definen preguntas condicionales sobre los atributos
  - Nodos hoja:
    - Ejemplos que cumplen la condición y dan una predicción
- Objetivo: Construir el árbol más sencillo que mejor separe los ejemplos por clase

Árboles de decisión

- ¿Cómo funciona?

  Es un algoritmo iterativo. Mientras exista un corte que mejore el criterio de separación:

  1. Se selecciona la mejor separación de acuerdo al criterio
  2. Se añade la condición al árbol incluyendo las posibles respuestas
  3. Se calculan los nodos hoja de la nueva condición añadida
  4. Criterio de parada. Si no se cumple se vuelve al paso 1

- ¿Cómo saber la mejor separación?
- ¿Qué criterio de parada puede haber?

Árboles de decisión - Impureza: Entropía

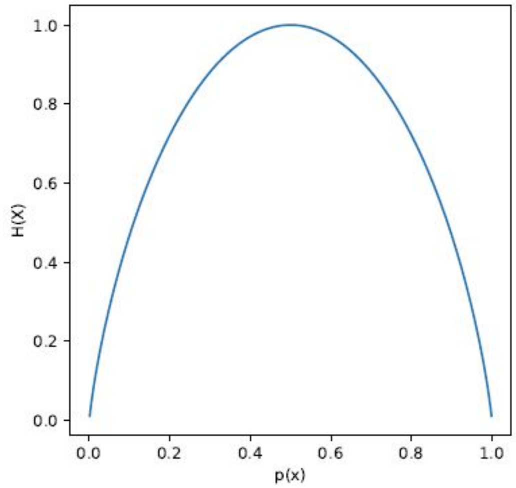
- ¿Cómo saber la mejor separación?

  La entropía mide la incertidumbre en la fuente de información, es decir…

  Cómo de desordenados están los ejemplos

$$E(X) = -\sum_{i=1}^{c} P(C_i) log_2(P(C_i))$$

Donde $P(C_i)$ es la proporción de ejemplos que son clasificados como clase C_i



Árboles de decisión - Impureza: Gini

- ¿Cómo saber la mejor separación?

  Una métrica alternativa es la impureza de Gini

  Mide la probabilidad de clasificar incorrectamente un dato aleatorio si seguimos la distribución:

$$Gini(X) = 1 - \sum_{i=1}^{c} P(C_i)^2$$

Donde $P(C_i)$ es la proporción de ejemplos que son clasificados como clase C_i

Árboles de decisión - Impureza

- ¿Cómo saber la mejor separación?

  Otras funciones de impureza:

Criterion	Impurity function $I(q_1, q_2, \dots, q_C)$	Comments
Expected error	$1 - \max(q_1, q_2, \dots, q_C)$	Causes many ties
GINI (CART)	$1 - \sum q_k^2$	If 2 classes: $2\ q_1 q_2$
Entropy (ID3,C5)	$-\sum q_k \log_2 q_k$	$0 \log_2 0 \ \equiv 0$
DKM	$2\sqrt{q_1 \cdot q_2}$	Only 2 classes. Robust for unbalanced classes
CHAID	χ^2	"Chi-square Automatic Interaction Detector"

Árboles de decisión - Impureza

- ¿Cómo saber la mejor separación?

  En cualquier caso, buscamos la separación que minimice la impureza global:

$$\boxed{\text{global } I(s) = \sum_{j=1}^{n} P_j \cdot I\big(q_1(j),\ q_2(j),\ \ldots,\ q_C(j)\big)}$$

Árboles de decisión - Ejemplo

Ejemplo de ejecución con impureza de Gini y dos clases:

Gini with **two classes:** $\mathrm{I} = 2\, q_1\, q_2$

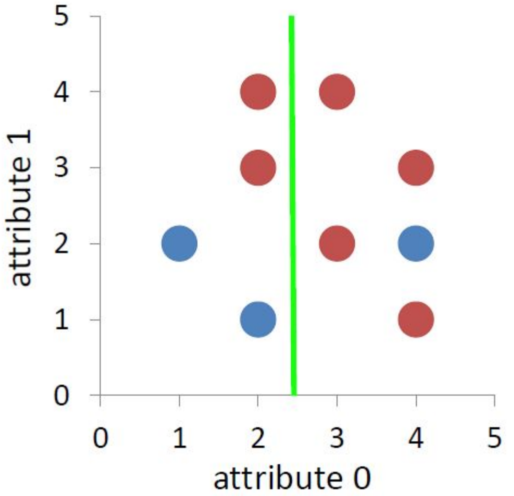
Total impurity of **"attribute 0 > 2.5"** ?

response = Yes:

4 ● 1 ● $\quad \mathrm{I} = 2 \cdot \frac{4}{5} \cdot \frac{1}{5} = \frac{8}{25}$

response = No:

2 ● 2 ● $\quad \mathrm{I} = 2 \cdot \frac{2}{4} \cdot \frac{2}{4} = \frac{1}{2}$

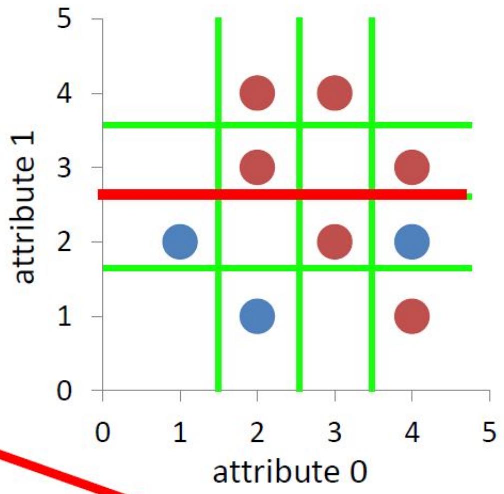


Total impurity $= P(Yes) \cdot \frac{8}{25} + P(No) \cdot \frac{1}{2} = \frac{5}{9} \cdot \frac{8}{25} + \frac{4}{9} \cdot \frac{1}{2} = \frac{2}{5}$

Árboles de decisión - Ejemplo

Ejemplo de ejecución con impureza de Gini y dos clases:

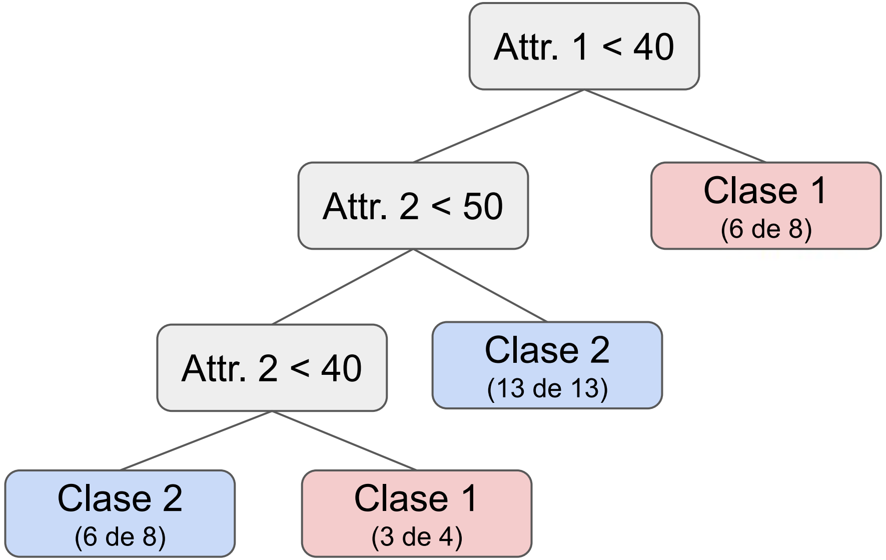
Query	Yes		No		I(s) total
	n_+ , n_-	I	n_+ , n_-	I	
$x_0 > 1.5$	6, 2	$\frac{3}{8}$	0, 1	0	$\frac{1}{3} = 0.333$
$x_0 > 2.5$	4, 1	$\frac{8}{25}$	2, 2	$\frac{1}{2}$	$\frac{2}{5} = 0.400$
$x_0 > 3.5$	2, 1	$\frac{4}{9}$	4, 2	$\frac{4}{9}$	$\frac{4}{9} = 0.444$
$x_1 > 1.5$	5, 2	$\frac{20}{49}$	1, 1	$\frac{1}{2}$	$\frac{3}{7} = 0.429$
$\boldsymbol{x_1 > 2.5}$	**4, 0**	**0**	**2, 3**	$\boldsymbol{\frac{12}{25}}$	$\boldsymbol{\frac{4}{15} = 0.267}$
$x_1 > 3.5$	2, 0	0	4, 3	$\frac{24}{49}$	$\frac{8}{21} = 0.381$

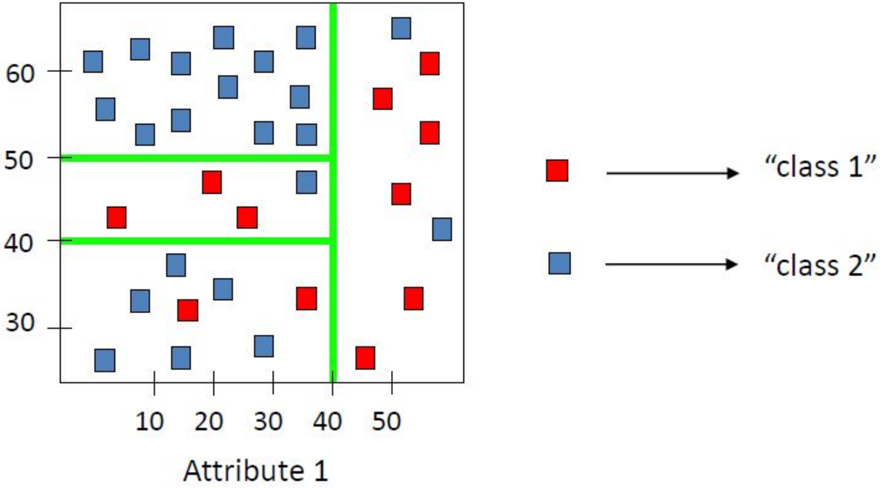


Best query: attribute $_1 > 2.5$
(lowest total impurity)

Árboles de decisión - Criterio de parada

- ¿Qué criterio de parada puede haber?
  - Profundidad máxima del árbol
  - Que la impureza sea menor que un umbral
  - Número mínimo de datos en un nodo hoja. En este árbol el mínimo es 10.





Árboles de decisión - Ventajas e Inconvenientes

- Ventajas

  Se pueden representar visualmente. Son fáciles de interpretar

  Realizan una selección de características de forma implícita

  Soportan datos categóricos y numéricos

  Son muy rápidos

- Inconvenientes

  Rápido sobreajuste (overfitting) a los datos de entrenamiento con árboles con mucha profundidad

  Árboles sesgados para clases no balanceadas

  Es un algoritmo Greedy