Algoritmos de clasificación en minería de datos

David Charte

Contents

1 Introducción a la minería de datos

A día de hoy, se recopilan cantidades ingentes de datos en cada vez menos tiempo. Fotografías tomadas en teléfonos y publicadas, datos de estaciones meteorológicas, valores en bolsa, son simples ejemplos de la información que se produce constantemente y a la que queremos buscar un significado. Y mientras que algunos datos se podrán interpretar manualmente, para estudiar muchos otros conjuntos de datos necesitaremos de la ayuda de ordenadores y de la Ciencia de datos.

Para extraer conocimiento de los datos se realiza el proceso de KDD, o *Knowledge Discovery in Databases*, que incluye generalmente las siguientes fases[1]:

- Selección de un conjunto de datos a analizar
- Preprocesamiento: limpieza de datos, eliminación de ruidos...
- Transformación: reducir número de variables, transformación del problema...
- Minería: búsqueda de patrones de interés
- Interpretación y visualización

[1] Fayyad, Usama; Piatetsky-Shapiro, Gregory; Smyth, Padhraic - *From Data Mining to Knowledge Discovery in Databases*

Nos centraremos en la fase del análisis de los datos en sí para buscar significados, conocida como Minería de datos. Los patrones que buscamos servirán para predecir el comportamiento de nuevas observaciones y explicar las relaciones entre las ya conocidas, además de para visualizar la información que se extrae y resumirla en medidas estadísticas.

La Minería de datos abarca distintos problemas, generalmente divididos en aprendizaje no supervisado (*clustering*, detección de anomalías, reglas de asociación) y aprendizaje supervisado (clasificación, regresión). Aquí estudiaremos el problema de clasificación, que consiste en aprender de un conjunto de datos ya clasificados para ser capaz de clasificar nuevos datos.

2 Definiciones

- **Característica/Atributo**: En general, se trata de un conjunto, no vacío, de posibles valores. Por ejemplo, $F_1 = \{Intel, AMD\}, F_2 = \mathbb{R}_0^+$.
- **Espacio de características**: Es el producto cartesiano de las características. $F = F_1 \times F_2 \times \cdots \times F_n$ para $F_1, \dots F_n$ características.
- **Dataset**: Un subconjunto finito $D \subset F$ espacio de características.
- **Instancia**: Cada $X \in D$ dataset.
- **Clasificador**: Una función capaz de predecir los atributos ausentes en nuevos datos. $c : F_1 \times F_2 \times \cdots \times F_m \to F_{m+1} \times \cdots \times F_n$
- **Algoritmo de clasificación**: Un procedimiento que toma un dataset y genera un clasificador *entrenado* para el mismo. Esto significa que el algoritmo encontrará posibles relaciones entre los atributos de los datos, de forma que cuando tengamos un dato nuevo con características ausentes, se le relacionará con unas instancias u otras a partir del resto de atributos.

3 Problema de clasificación

El problema al que nos enfrentamos consiste en, teniendo un dataset al que llamaremos *de entrenamiento*, generar un clasificador que sea capaz de predecir, con la mayor precisión posible, una o más características de cualquier nueva instancia incompleta.

Atendiendo al número de características que estarán ausentes en los nuevos datos, y a sus posibles valores, distinguiremos tres tipos de clasificación:

- **Binaria**: Implica clasificar en 2 clases (generalmente 0 o 1, *Verdadero* o *falso*), utilizando una característica que tome solo dos valores.
- **Multiclase**: Ahora habrá más de dos clases, pero cada instancia pertenecerá a una y solo una de ellas, por lo que se usará una característica que contenga tantos valores como clases.
- **Multietiqueta**: En este caso cada instancia puede asociarse a más de una etiqueta, por tanto se usarán tantos atributos como etiquetas, cada uno de ellos conteniendo dos valores.

Adicionalmente, existe una generalización del problema de clasificación que reside en la clasificación **multidimensional**. En este tipo de clasificación, las características que se habrán de predecir serán de cualquier tipo, no necesariamente de dos valores.

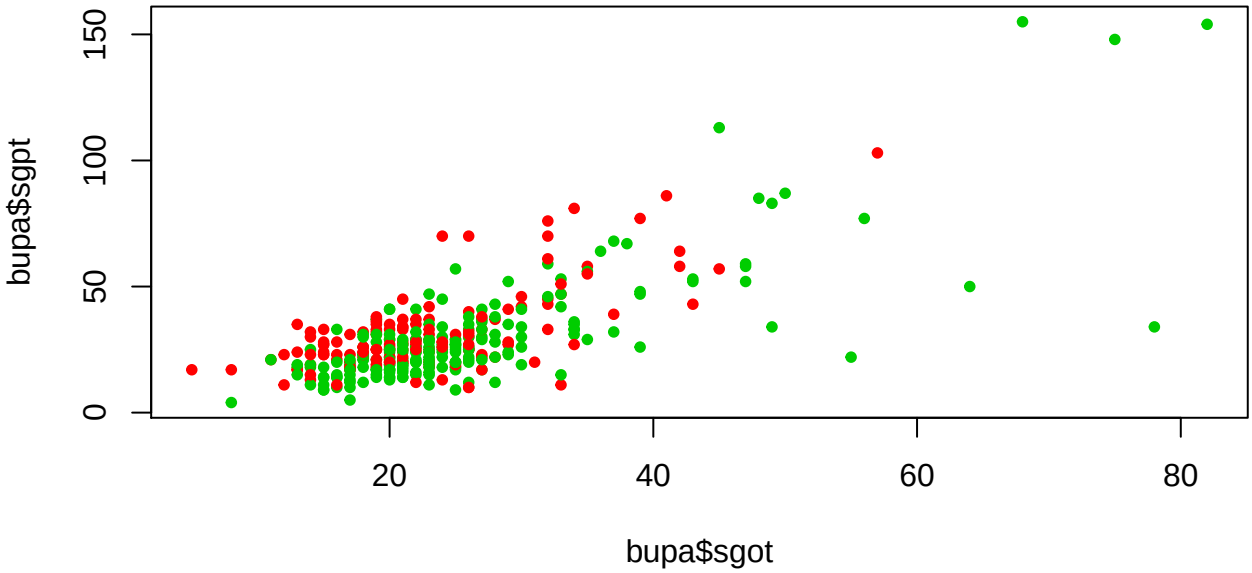
3.1 Clasificación binaria

En clasificación binaria solo usaremos una característica para contener información de las clases, por lo que $m = n - 1$, y como solo tendremos dos clases, tomaremos $F_n = \{0, 1\}$.

El siguiente es un ejemplo de gráfico generado a partir de las instancias del dataset `bupa`[2], que tiene 7

[2]UCI Machine Learning Repository - Liver Disorders

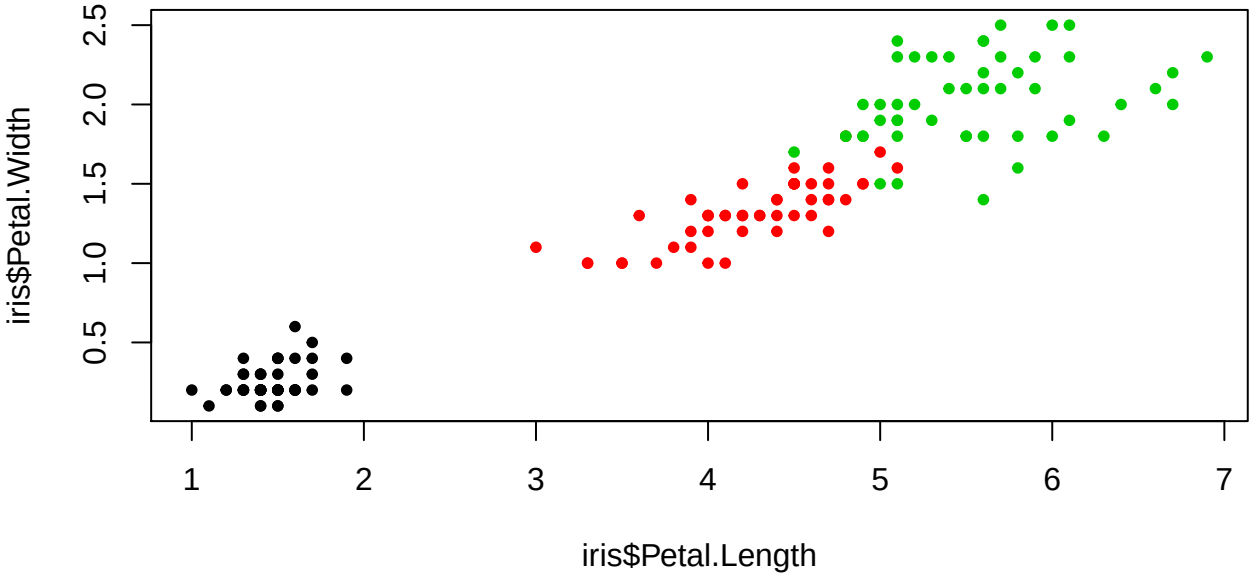
atributos en total (se han escogido dos para los ejes y el atributo de clase está representado por el color):



3.2 Clasificación multiclase

La clasificación multiclase añade la complejidad de que, en lugar de dos únicos valores para la característica que agrupa a las instancias, tendremos 3 o más. Esto significa que aunque m se mantenga igual a $n-1$, tendremos $F_n = \{1, 2, 3 \dots l\}$.

La nube de puntos siguiente representa los datos del conocido dataset `iris`[3], que cuenta con 5 atributos, el último de los cuales se utiliza para separarlos en 3 clases. De nuevo, se representan dos de los atributos y el color diferencia las clases:



[3]UCI Machine Learning Repository - Iris

3.3 Clasificación multietiqueta

Una etiqueta se diferencia de una clase en que no es exclusiva, es decir, que una instancia puede pertenecer a varias etiquetas a la vez. Esto implica que cada etiqueta puede estar activada o desactivada en todas las instancias, y por tanto necesitaremos tantas características como etiquetas: $m = n - l \leq n$ para l etiquetas. Cada atributo correspondiente a una etiqueta tendrá dos valores: $F_{m+1} = \cdots = F_n = \{0, 1\}$.

A continuación se muestran las etiquetas del dataset `emotions` obtenido del repositorio MULAN[4]. Este dataset, aun siendo de los más pequeños entre los multietiqueta, cuenta con 78 características, 6 de las cuales son etiquetas.

```
##                  index count
## amazed-suprised     73   173
## happy-pleased       74   166
## relaxing-calm       75   264
## quiet-still         76   148
## sad-lonely          77   168
## angry-aggresive     78   189
```

Uno de los problemas que presenta la clasificación multietiqueta es que suelen existir varias decenas de etiquetas, o incluso cientos (el dataset de MULAN con más etiquetas tiene 3993), aumentando significativamente la cantidad de información que un clasificador debe averiguar para cada dato nuevo. Además, es probable que se dé la situación en que algunas etiquetas estén relacionadas entre sí. Un buen algoritmo de clasificación deberá tener esto en cuenta, y no tratar cada etiqueta por separado.

4 Transformación de problemas

Las primeras estrategias a las que podemos recurrir cuando tratamos un problema de clasificación multiclase o multietiqueta son las de transformación del mismo a problemas de clasificación binaria.

Supondremos que disponemos de un algoritmo de clasificación binaria que entrenará clasificadores para varios conjuntos de datos.

4.1 Multiclase

4.1.1 One vs. All

Consiste en entrenar un clasificador para cada clase, de forma que sea capaz de distinguir cuándo un dato nuevo tiene o no esa clase, y aportar un valor de confianza (probabilidad) del resultado. Para decidir la clase que llevará un nuevo dato, se le aplican todos los clasificadores y se queda con la clase que tenga el mayor valor de confianza:

$$\phi_i : F \to F_1 \times \cdots \times F_{n-1} \times F_n^{(i)}$$

$$\phi_i(x_1, x_2, \ldots x_n) = (x_1, x_2, \ldots, x_{n-1}, \delta_{i,x_n})$$

donde δ_{i,x_n} es la Delta de Kronecker para i y x_n. Obtenemos clasificadores c_i para $\phi_i(D)$, $\forall i \in F_n$, y generamos el clasificador completo:

$$c : F_1 \times \cdots \times F_{n-1} \to F_n$$

$$c(x) = \underset{i \in F_n}{\operatorname{argmax}}\, conf(c_i(x))$$

donde $conf(c_i(x))$ es la confianza del clasificador c_i de que la instancia x pertenezca a la i-ésima clase.

[4] MULAN - Multilabel datasets

Una desventaja de esta estrategia es que al darle a cada clasificador todas las instancias, se desequilibran fácilmente las clases, ya que se le informará de una de las clases y el resto de las instancias aparecerán como de una única clase. Cuando esto suceda, el clasificador podría dar siempre valores muy pobres de confianza.

4.1.2 One vs. One

Para cada pareja de clases, se entrenará un clasificador que aprenda a distinguirlas. Para ello, se restringirá el dataset en cada caso a instancias de alguna de las dos clases que se vayan a usar. En total se entrenarán $\frac{l(l-1)}{2}$ clasificadores (para l clases). De esta forma, cuando tengamos que decidir la clase de un nuevo dato, cada uno de los clasificadores dará una de dos clases, y la clase más votada será la que se le asigne al dato.

Uno de los problemas de esta estrategia es la posible ambigüedad cuando haya dos clases con el mismo número de votos y haya que decidir entre ellas. Además, cada clasificador que se entrene no dispondrá de todas las instancias, sino de la restricción a las dos clases elegidas, por lo que no será capaz de obtener toda la información.

4.2 Multietiqueta

4.2.1 Binary Relevance

La idea de Binary Relevance es tratar cada etiqueta como un par de clases, y separar un problema de l etiquetas en l problemas de clasificación binaria, generando tantos clasificadores como etiquetas tengamos:

$$c_i : F_1 \times \cdots \times F_m \to F_{m+i} \quad \forall i = 1, \dots l$$

$$c = (c_1, c_2, \dots c_l) : F_1 \times \cdots \times F_m \to F_{m+1} \times \cdots \times F_n$$

El problema principal de esta estrategia es que no tiene en cuenta las relaciones entre las distintas etiquetas, por lo que el aprendizaje obtenido es menor.

4.2.2 Label Powerset

Label Powerset pretende solventar el problema de Binary Relevance, estudiando en vez de cada etiqueta por separado, sus posibles combinaciones:

$$\forall L \in F_{m+1} \times \cdots \times F_n, \quad F_L = \{0, 1\}$$

$$\phi_L : F \to F_1 \times \cdots \times F_m \times F_L$$

$$\phi_L((x, L)) = (x, 1); \quad \phi_L((x, L')) = (x, 0) \forall L' \neq L$$

Esta transformación de los datos nos deja una única característica, F_L, para averiguar, se trata de un problema binario. Con el dataset restringido a cada uno de esos espacios de características, entrenaremos un clasificador (en total, 2^l):

$$c_L : F_1 \times \cdots \times F_m \to F_L$$

$$c : F_1 \times \cdots \times F_m \to F_{m+1} \times \cdots \times F_n$$

$$c(x) = \arg \max_{L \in F_{m+1} \times \cdots \times F_n} conf(c_L(x))$$

donde, de nuevo, $conf(c_L(x))$ será la confianza que dé el clasificador correspondiente de que la instancia x tenga la combinación L de etiquetas.

5 Algoritmos de clasificación

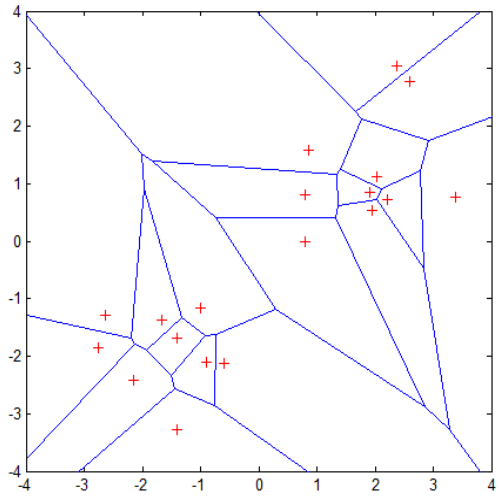
5.1 K-nearest neighbors (kNN)

Introducido en 1951[5], el método de los k vecinos más cercanos consiste en hallar los primeros k puntos de $F_1 \times \cdots \times F_k$ a menor distancia (para cierta distancia d, generalmente la euclídea) del nuevo dato a clasificar. Una vez encontrados estos puntos, se le otorga al nuevo dato la clase de la mayoría (esquema de votación).

En el caso $k = 1$, expresar matemáticamente el algoritmo es muy sencillo; para un dato a clasificar X, la clase será la de la instancia más cercana a él por la distancia d:

$$NN(X) = \arg\min_{Y \in D} d(X, (Y_1, \dots Y_{n-1})); \quad c(X) = (NN(X))_n \quad \forall X \in F_1 \times \cdots \times F_{n-1}$$

Además, se puede visualizar fácilmente el método mediante un diagrama de Voronoi[6], que divide el plano en regiones que identifican al punto más cercano:



En el siguiente ejemplo[7] utilizamos el algoritmo kNN para clasificar datos del dataset `iris`.

> **Nota**: En el ejemplo se utiliza *validación cruzada* para comprobar la precisión del clasificador generado. La validación cruzada consiste en dividir el dataset en varias partes del mismo tamaño, y utilizar todas menos una como dataset para el algoritmo, y la restante como conjunto de test, es decir, para comprobación de la capacidad de clasificación del algoritmo. El procedimiento se repite utilizando una parte distinta como conjunto de test en cada iteración.

```
# Cargamos dataset
iris <- read.arff(system.file("arff", "iris.arff", package = "RWeka"))
# Generamos clasificador kNN con k = 10
classifier <- IBk(class ~., data = iris, control = Weka_control(K = 10))
# Evaluamos con validación cruzada
evaluate_Weka_classifier(classifier, numFolds = 5)
```

```
## === 5 Fold Cross Validation ===
##
```

[5] Fix, E.; Hodges, J.L. - *Discriminatory analysis, nonparametric discrimination: Consistency properties*
[6] Diagrama de Voronoi obtenido de Scholarpedia (CC BY-NC-SA)
[7] Wikibooks - Data Mining Algorithms in R/Classification/kNN

```
## === Summary ===
##
## Correctly Classified Instances         145               96.6667 %
## Incorrectly Classified Instances         5                3.3333 %
## Kappa statistic                          0.95
## Mean absolute error                      0.0423
## Root mean squared error                  0.1326
## Relative absolute error                  9.5257 %
## Root relative squared error             28.1203 %
## Coverage of cases (0.95 level)         100      %
## Mean rel. region size (0.95 level)      40.6667 %
## Total Number of Instances              150
##
## === Confusion Matrix ===
##
##   a  b  c   <-- classified as
##  50  0  0 |  a = Iris-setosa
##   0 49  1 |  b = Iris-versicolor
##   0  4 46 |  c = Iris-virginica
```

5.1.1 Tipificación

Generalmente en el espacio de características habrá atributos en distintas unidades de medida. Esto puede provocar un sesgo importante en el cálculo de la distancia entre los puntos, ya que algunos de los atributos tendrán más peso que otros. Para contrarrestar este efecto se tipifican las características, es decir, a cada valor de la característica se le resta la media de todos los valores del dataset y se divide el resultado entre la desviación típica.

5.1.2 Distance-weighted kNN[8]

Con el objetivo de afinar más la elección de la clase para nuevos datos, se le aplican pesos a los puntos más cercanos según la distancia a la que estén. Por tanto, la clase del punto más cercano tendrá más importancia en la elección final que la del k-ésimo punto más cercano.

5.1.3 ML-kNN[9]

ML-kNN es una adaptación del algoritmo kNN para problemas de clasificación multietiqueta. En este método, una vez localizados los k puntos más cercanos a una instancia de test Y, construimos un vector de cuentas como sigue. Si $kNN(Y) = \{X^{(1)}, X^{(2)}, \dots X^{(k)}\}$ son los vecinos más cercanos a Y, definimos la cuenta:

$$C(Y) = \sum_{X \in kNN(Y)} (X_{m+1}, X_{m+2}, \dots X_n)$$

De esta forma obtenemos un vector de l elementos para los cuales, cuanto mayor sea el valor, mayor es la confianza de que la instancia T tenga las etiquetas asociadas. Para discriminar cuáles de las etiquetas se asignarán y cuáles no, ML-kNN utiliza una estimación *Maximum a posteriori*.

[8] Dudani, Sahibsingh A. - *The Distance-Weighted k-Nearest-Neighbor Rule*
[9] Min-Ling Zhang, Zhi-Hua Zhou - *ML-kNN: A Lazy Learning Approach to Multi-Label Learning*

5.1.4 Problemas en alta dimensionalidad

Se puede comprobar que, bajo ciertas condiciones, al aumentar el número de dimensiones, dada una instancia, la diferencia entre la distancia de la instancia más cercana y la distancia a la más lejana tiende a cero[10].

5.2 Árboles de decisión

Un árbol de decisión es una herramienta que permite tomar decisiones siguiendo unas condiciones en forma de árbol. Aplicado al problema de clasificación, generar un árbol de decisión nos permitiría asignar una clase a una nueva instancia basándonos en condiciones sobre sus otras características.

Tenemos, por tanto, toda una familia de algoritmos capaces de generar árboles de decisión de distintas maneras. Entre ellos se encuentran ID3 (*Iterative Dichotomiser 3*)[11], C4.5, CART (*Classification And Regression Tree*) y CHAID (*CHi-squared Automatic Interaction Detector*). En general siguen el mismo procedimiento, pero aplicando diferentes medidas. Se distinguen dos fases que se van iterando, la selección de atributos, y la parada y selección de clase.

5.2.1 Selección de atributos

En terminología de árboles, seleccionar un atributo implica crear un nodo interno. Por tanto, de este nodo partirán dos o más ramas que crearán subconjuntos del dataset a partir de una condición sobre el atributo. Por esto, se pretende escoger siempre el atributo que más información nos aporte sobre los datos, es decir, el que mejor los separe. Esto se mide a través de cálculos como la entropía (H) y la ganancia de información (IG)[12]:

$$H(S) = -\sum_{k \in \{1,...l\}} p(k) log_2 p(k); \quad S \subset D$$

donde l es el número de clases y $p(k)$ nos dice la proporción entre las instancias de D con la k-ésima clase y el número total de instancias.

$$IG(i,S) = H(S) - \sum_{U \in s_i(S)} \frac{|U|}{|S|} H(U); \quad S \subset D, 1 \leq i \leq n-1$$

donde $s_i(S)$ nos da los subconjuntos de S resultantes de dividir S mediante una condición sobre el i-ésimo atributo (F_i).

Al añadir un nodo al árbol de decisión, ID3 y C4.5 escogen el atributo que maximice la ganancia de información obtenida. Otras medidas que se pueden usar son el índice de impureza de Gini (utilizado en CART) y el ratio de ganancia de información.

5.2.2 Criterios de parada, selección de clase

Al ramificar el árbol, se necesitan criterios para convertir un nodo en hoja del árbol. Entre ellos se contemplan:

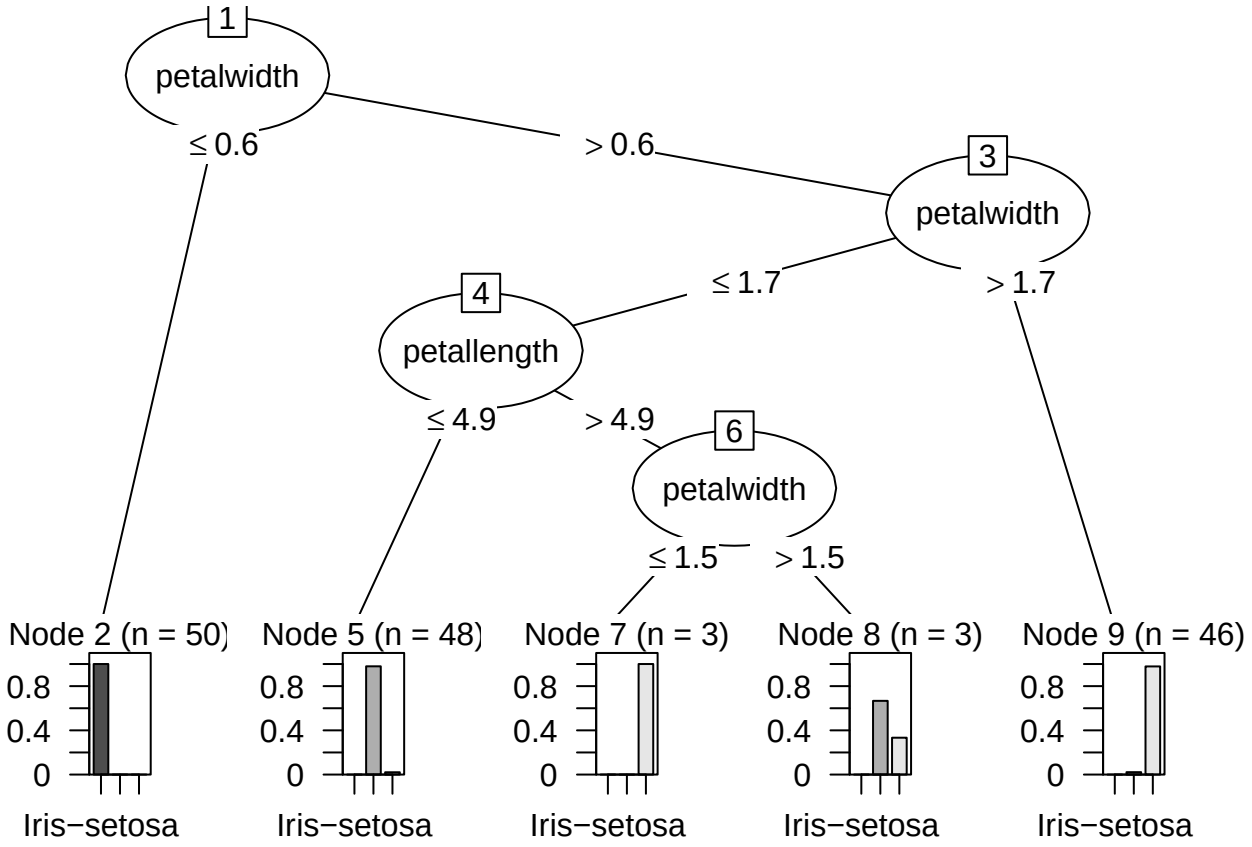
- Cuando todas las instancias del subconjunto de D correspondiente son de la misma clase. Se crea el nodo hoja y se le asigna la clase a la que pertenecen las instancias.
- Cuando no quedan atributos para ramificar el árbol, o ninguno de ellos aporta ganancia de información. En ese caso, el nodo hoja creado lleva la clase mayoritaria del subconjunto.

[10] Beyer, K.; Goldstein, J; Ramakrishnan, R; Shaft. U - *When Is "Nearest Neighbor" Meaningful?*
[11] Quinlan, J.R. - *Induction of Decision Trees*
[12] Wikipedia - ID3 Algorithm

- Cuando el subconjunto de D es vacío. Se crea un nodo hoja con la clase mayoritaria del subconjunto del nodo padre.

En el ejemplo se muestra el árbol de decisión generado por el algoritmo de clasificación C4.5 (utilizando la implementación libre J48 de Weka). Observamos que el atributo `petalwidth` es el que más información aporta, ya que se utilizan tres umbrales sobre él para ramificar el árbol; además se usa una condición para `petallength` y ninguna sobre los otros dos atributos, `sepalwidth` y `sepallength`.

```
# Cargamos dataset
iris <- read.arff(system.file("arff", "iris.arff", package = "RWeka"))
# Generamos clasificador C4.5 con parámetros por defecto
classifier <- J48(class ~., data = iris)
# Mostramos árbol de decisión
plot(classifier)
```



5.2.3 *Bagging* de árboles y Random Forest

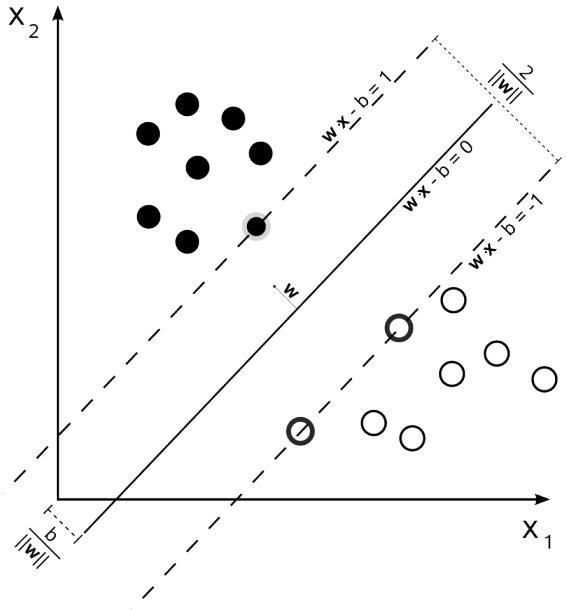
Cuando en un dataset hay muchas características, puede ser difícil generar un árbol que sea suficientemente pequeño para evitar el *overfitting* o sobreaprendizaje y que a la vez consiga describir al completo los datos. Para solucionarlo, se puede trabajar con árboles de decisión que tomen menos características y menos instancias.

Parte de esta idea se implementa en el *bagging* de árboles, que implica ejecutar varios algoritmos de árboles de decisión sobre un conjunto de muestras del dataset tomadas de forma aleatoria con reemplazamiento. Para predecir la clase de una nueva instancia, se utiliza un esquema de votación: se siguen todos los árboles y se elige la opción mayoritaria.

El método Random Forest añade además el ir escogiendo subconjuntos aleatorios de las características, es decir, para cada árbol se extrae aleatoriamente un subconjunto de $1, 2, \dots n-1$ y se le proporcionan instancias con únicamente esas características (siempre se proporciona la n-ésima característica para poder clasificar).

5.3 Máquina de vectores de soporte (SVM)

Las máquinas de vectores de soporte tienen su origen en la teoría de aprendizaje estadístico. En principio solo son capaces de tratar el problema de clasificación binaria. La idea básica de estos algoritmos es tratar de separar las instancias de las dos clases mediante un hiperplano de forma que la distancia que las separe sea la máxima posible. Los nuevos datos para los que haya que predecir la clase serán asignados a la que corresponda a la mitad del espacio (determinada por el hiperplano) a la que pertenezcan.



Por tanto, para un algoritmo de este tipo, cada instancia de un dataset representa un punto en un espacio de $n-1$ dimensiones (si tenemos n atributos), y se pretende encontrar un hiperplano afín de la forma

$$H = \{x \in F_1 \times \cdots \times F_{n-1} : \langle w, x \rangle - b = 0\}$$

donde w sea un vector ortogonal al hiperplano y b un desplazamiento, tal que tenga el máximo margen de distancia a cualquier punto. Este margen se define como

$$\delta^* = \min_{X=(x,y)\in D} \{d(x, H)\} = \min_{X=(x,y)\in D} ||\overrightarrow{x\ \pi_H(X)}||$$

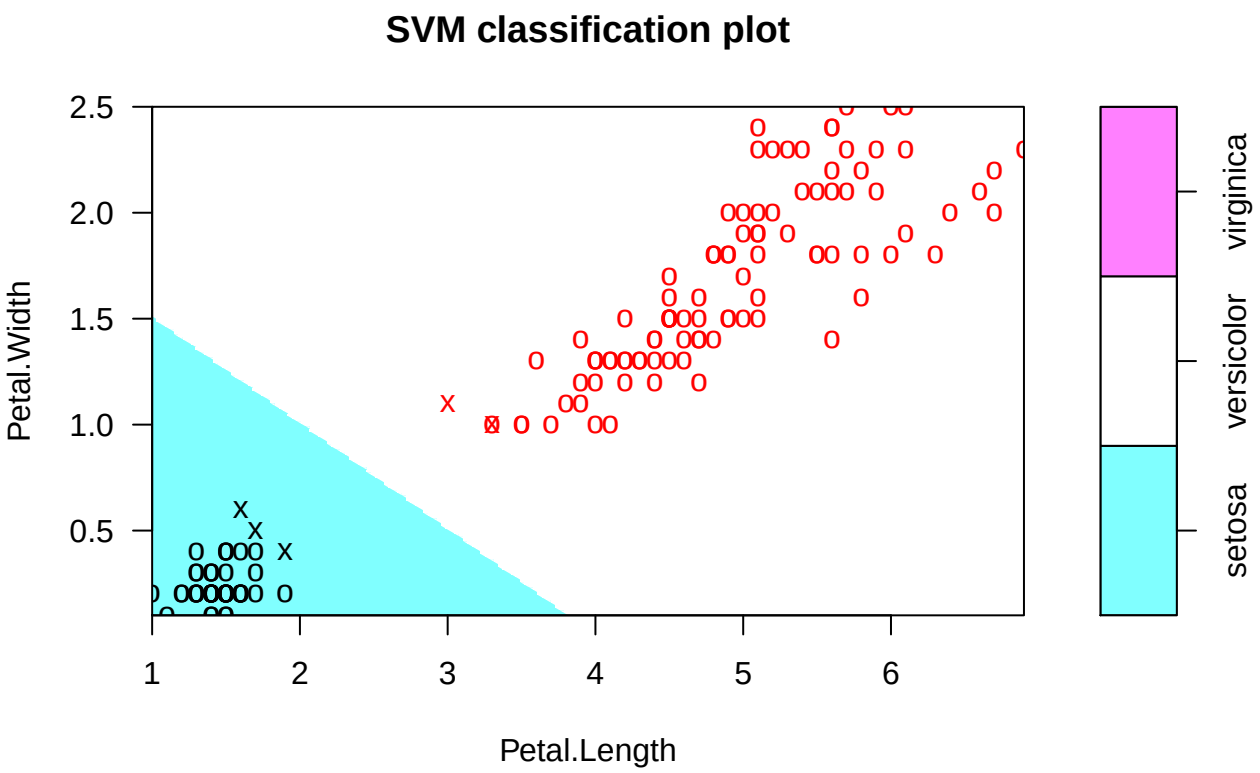
Los puntos que realizan este mínimo de distancia se denominan *vectores de soporte*.

En lugar de tratar de optimizar el margen mediante las distancias a todos los puntos, se puede utilizar el desplazamiento para medir la separación entre los hiperplanos $\{x : \langle w, x \rangle - b = 1\}, \{x : \langle w, x \rangle - b = -1\}$ (ver figura superior), de forma que solo tenemos que tratar de maximizar $\frac{1}{||w||}$, o equivalentemente, minimizar $||w||$, con las restricciones de separación de instancias de distintas clases.

En el siguiente ejemplo utilizamos la función `svm` del paquete `e1071` de R para generar un modelo SVM lineal que separe una clase del dataset `iris` de las demás, atendiendo a dos de las características:

```
# Cargamos dataset integrado en R
data(iris)
```

```r
# Nos quedamos con 2 características
iris2 <- data.frame(Petal.Width = iris$Petal.Width,
                    Petal.Length = iris$Petal.Length,
                    Species = iris$Species)
# Eliminamos una de las clases
iris2$Species[iris2$Species == "virginica"] <- "versicolor"
# Generamos un modelo de máquina de vectores de soporte
model <- svm(Species~., data = iris2, kernel = "linear")
# Mostramos un gráfico del modelo
plot(model, iris2, grid = 200)
```



Los puntos marcados como `x` son los vectores de soporte utilizados para el modelo.

5.3.1 Funciones *kernel*[13]

El algoritmo básico para SVM tiene la restricción de que genera únicamente modelos lineales para separar los datos. Para evitarla, se pueden llevar los puntos del dataset a un espacio de más dimensiones, donde puedan ser linealmente separados, y utilizar la SVM en ese espacio. Una vez encontrado el hiperplano que los separa en ese espacio, se puede volver a transformar al espacio original, convirtiendolo en una superficie no lineal.

Para llevar esto a cabo se utilizan funciones *kernel*, que son capaces de hallar los productos escalares en distintos espacios, sin necesidad de crearlos y transformar todo el dataset. Algunos ejemplos de funciones *kernel* son:

- Kernel polinomial de grado q: $K(x_i, x_j) = (\langle x_i, x_j \rangle + 1)^q$
- Kernel gaussiano: $K(x_i, x_j) = e^{-\frac{||x_i - x_j||^2}{2\sigma^2}}$
- Kernel sigmoide de desplazamiento b: $K(x_i, x_j) = tanh(a \langle x_i, x_j \rangle + b)$

[13] Wikibooks - Data Mining Algorithms In R/Classification/SVM

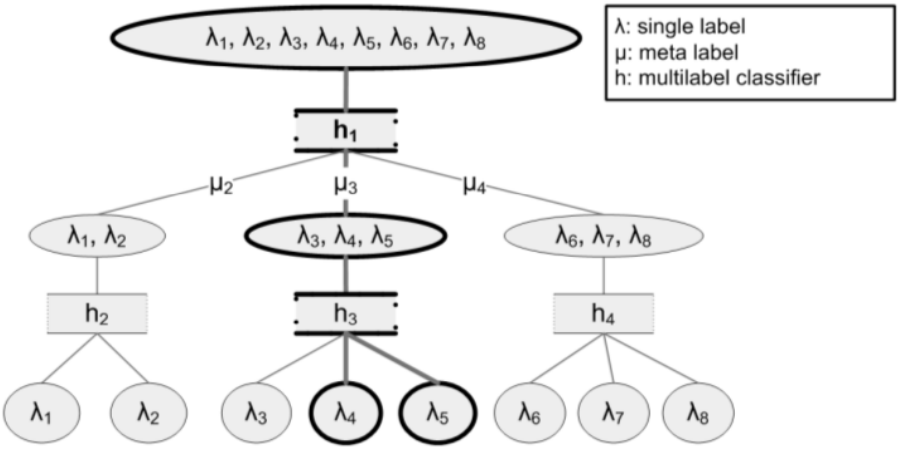
5.4 Algoritmos para clasificación multietiqueta

La clasificación multietiqueta es un problema que se comenzó a tratar por sí mismo muy recientemente. Algunos de los algoritmos más utilizados en este ámbito se publicaron en 2007 (ML-kNN), 2008 (HOMER) y 2011 (RAkEL). Esto implica que aún hay un largo camino por recorrer en cuanto a la clasificación multietiqueta, no solo alrededor del análisis de las instancias, sino también de las relaciones entre etiquetas por sí mismas.

A continuación revisamos los algoritmos HOMER (*Hierarchy Of Multi-labEl leaRners*) y RAkEL (*RAndom k-labELsets*), ambos basados en la técnica de transformación Label Powerset.

5.4.1 HOMER[14]

En clasificación multietiqueta es frecuente encontrar una alta dimensionalidad del espacio de características, no solo eso, sino que además puede haber una cantidad grande de etiquetas, lo cual provoca que la cantidad de combinaciones posibles al clasificar un dato ascienda exponencialmente (2^l con l etiquetas).



Para lidiar con este problema el algoritmo HOMER propone construir una jerarquía de tareas de clasificación más simples, cada una tratando un número menor de etiquetas, en forma de árbol. Cada nodo interno del árbol se ramifica tantas veces como indique un parámetro k, y el reparto de etiquetas se realiza buscando juntar las que estén presentes en instancias más similares. Las instancias que quedan en cada nodo son las que contienen al menos una de las etiquetas correspondientes a ese nodo.

El asunto más problemático en este planteamiento reside en el método a utilizar para distribuir las etiquetas de forma que reunan instancias similares entre sí. Para resolverlo, el algoritmo trata las etiquetas como si se tratase de un problema de *clustering*. Los autores proponen utilizar agrupamientos de etiquetas del mismo tamaño, para lo que se debe usar un algoritmo de *clustering* equilibrado.

5.4.2 RAkEL[15]

La estrategia de transformación Label Powerset presenta un problema de complejidad computacional. Al considerar cada posible combinación de etiquetas (*labelset*) como una clase, está generando un problema de clasificación multiclase de hasta 2^l clases. En la práctica son muchas menos clases, ya que los labelsets se pueden repetir, y no tienen por qué aparecer todos en el dataset. Sin embargo, sí que se puede dar que existan muchos labelsets con una sola ocurrencia, es decir, que solo exista una instancia con esa combinación de etiquetas. Esto dificulta el procesamiento necesario considerablemente.

[14] Tsoumakas, G.; Katakis, I.; Vlahavas, I. - *Effective and Efficient Multilabel Classification in Domains with Large Number of Labels*

[15] Tsoumakas, G.; Katakis, I.; Vlahavas, I. - *Random k-Labelsets for Multi-Label Classification*

El algoritmo RAkEL propone utilizar subconjuntos aleatorios de tamaño k del conjunto de etiquetas y entrenar clasificadores multietiqueta para cada uno mediante Label Powerset.

Por ejemplo, si tuviéramos $l = 6, k = 2$, RAkEL podría entrenar los siguientes clasificadores:

$$c_1 : F_1 \times \cdots \times F_m \to F_1 \times F_5$$
$$c_2 : F_1 \times \cdots \times F_m \to F_2 \times F_3$$
$$c_3 : F_1 \times \cdots \times F_m \to F_4 \times F_6$$

Es decir, se habría empleado Label Powerset sobre $\{F_1, F_5\}$, $\{F_2, F_3\}$ y $\{F_4, F_6\}$. De esta forma no se llegan a analizar todas las combinaciones posibles, pero el tiempo de procesamiento es significativamente menor (dependiendo del algoritmo que se utilice por debajo para clasificar).

Además, existe una variante de RAkEL que permite solapar los subconjuntos de etiquetas, de forma que las etiquetas puedan aparecer en más de un clasificador.
