

Machine Learning I

Francisco Javier Mercader Martínez

Índice

1	Introducción al Machine Learning	1
1.1	Tareas básicas del Machine Learning	1
1.2	Generalización: subajuste y sobreajuste	2
1.2.1	Planteamiento del problema	2
1.2.2	Planteamiento de la solución	3
1.2.3	Peligros	3
1.2.4	Subajuste y sobreajuste	3
1.2.5	Complejidad del modelo vs número de datos	4
1.2.6	Conclusión	4
1.2.7	Descomposición sesgo-varianza. Coste cuadrático	4
1.2.8	Algunas técnicas de generalización	8
1.2.9	Evitar el sobreajuste: "early stopping"	9
1.2.10	Evitar el sobreajuste: "Weight Decay"	10
1.3	Evaluación de prestaciones	11
1.3.1	Regresión	12
1.3.2	Clasificación	13
2	Aprendizaje Supervisado	14
2.1	Árboles de Decisión	14
2.1.1	Arquitectura	14
2.1.2	Ventajas y desventajas	15
2.1.3	Clasificación vs Regresión	16
2.2	Construcción de árboles de decisión	16
2.2.1	Particiones	17
2.2.2	Particiones posibles	17
2.3	ID3: Algoritmo básico de aprendizaje	18
2.3.1	Entropía	18

Tema 1: Introducción al Machine Learning

1.1) Tareas básicas del Machine Learning

¿Qué es el Machine Learning?

- Definición de Machine Learning

”Descubrir regularidades en datos mediante el uso de algoritmos, y mediante el uso de esas regularidades realizar alguna acción” (C. M. Bishop)

- Tareas básicas

Fundamentalmente cuatro:

- Clasificación

- **Detección de spam:** Se trata de clasificar, mediante identificación de patrones, los correos electrónicos como spam o no spam.
- **Detección de fraudes:** Distinción entre transacciones legítimas y sospechosas basándose en patrones y características relevantes.
- **Análisis de sentimientos:** Los algoritmos de clasificación pueden utilizarse para determinar el sentimiento expresado en un texto, como positivo, negativo o neutro. Esto es útil para el análisis de opiniones en redes sociales, comentarios de clientes, revisiones de productos, etc.
- **Detección de objetos en imágenes:** Especialmente útil en la conducción de coches autónomos.

- Regresión

- **Estimación de la demanda de un producto:** Predicción de la demanda de un producto en función de variables como el precio, la publicidad, las tendencias del mercado, entre otras.
- **Predicción de la contaminación atmosférica:** Utilizando datos históricos de contaminantes, meteorología y otras variables relevantes, se puede aplicar la regresión para predecir los niveles de contaminación en una ubicación específica.
- **Análisis de la relación entre variables económicas:** La regresión puede utilizarse para explorar la relación entre variables económicas, como el crecimiento del PIB y el desempleo, con el fin de entender mejor su interdependencia y tomar decisiones políticas o empresariales informadas.

- Agrupamiento

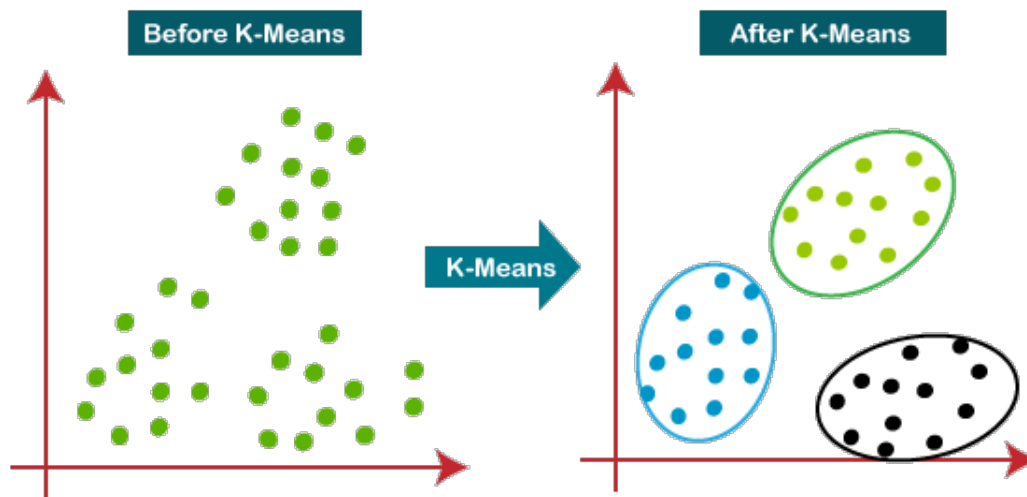
- Asociación

- Tarea de agrupación en Machine Learning

El **agrupamiento** o **clustering** consiste en detectar agrupaciones en datos no etiquetados empleando alguna medida de similitud entre ellas. El objetivo es descubrir patrones y estructuras dentro de los datos.

Algoritmos populares para clustering incluyen el K-Means, el DSCAN, el clustering jerárquico y Mapas Autoorganizados (SOM).

Ejemplo K-Means



- Tarea de asociación en Machine Learning

La tarea de **asociación** se centra en descubrir reglas de asociación entre eventos en un conjunto de datos, lo que significa identificar qué elementos tienden a aparecer juntos en dichos eventos. El objetivo es revelar después del afeitado, hay un 80% de posibilidades de que el cliente compre también crema de afeitado.

La asociación es una tarea no supervisada, los datos a menudo provienen de transacciones o eventos, y no se requieren etiquetas previas.

Algoritmos como Apriori se utilizan comúnmente para generar reglas de asociación en los datos, reglas como "Si A, entonces B". Estas reglas se utilizan en análisis de mercado y sistemas de recomendación.

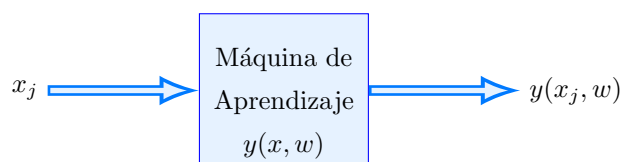
1.2) Generalización: subajuste y sobreajuste

1.2.1) Planteamiento del problema

En el contexto del Machine Learning, el **conjunto de hipótesis** se refiere a un conjunto de funciones o modelos matemáticos que se utilizan para aproximar una relación desconocida entre las **entradas** (x) y las **salidas deseadas o targets** (t) de un conjunto de datos.

Cada hipótesis representa una posible aproximación de la relación subyacente en los datos.

El objetivo del **aprendizaje supervisado** es encontrar la hipótesis que mejor se ajuste a los datos de entrenamiento manteniendo la capacidad de hacer predicciones precisas para datos nuevos (**capacidad de generalización**).



- Necesario: Conjunto de entrenamiento

Pares: $\{x_j, t_j\}$ con $j = 1, 2, \dots, N$.

$x_j = \{x_{j1}, x_{j2}, \dots, x_{jD}\}$ entrada j -ésima; vector con D **componentes o características**.

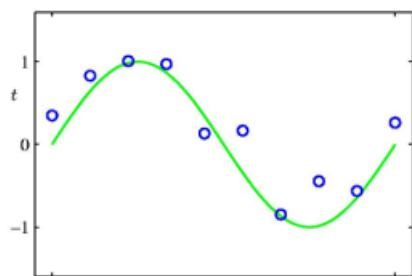
$t_j = \{x_{j1}, x_{j2}, \dots, x_{jT}\}$ target j -ésimo; vector con T componentes.

- Objetivo: Aprendizaje supervisado

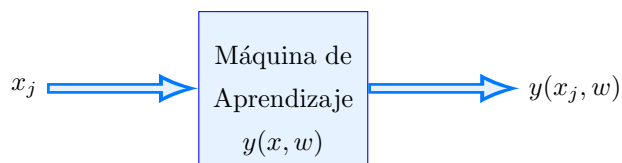
Encontrar las **variables o pesos** del modelo (\mathbf{w}) que resuelvan el problema: $y(x_j, \mathbf{w}) \approx t_j$ para $j = 1, 2, \dots, N$. A esta tarea se la denomina **entrenamiento**.

Ejemplo: Problema de regresión

$y = \sin(2\pi x) + n(x)$, donde $n(x)$ es un ruido gaussiano pequeño.



Conjunto de entrenamiento: $\{x_j, t_j\}_{j=1}^{N=10}$



Aproximador polinómico: $y(x, \mathbf{w}) = w_0 + w_1x + w_2x^2 + \dots + x_Mx^M = \sum_{j=0}^M w_j x^j$

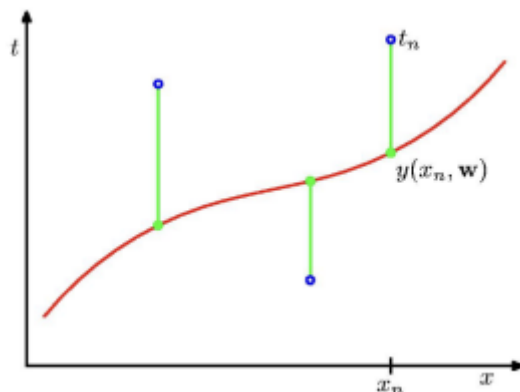
- M es un parámetro que determina la complejidad del modelo (orden del polinomio).
- Los parámetros no entrenables que determinan el modelo o el entrenamiento se denominan en Machine Learning **hiperparámetros**.

1.2.2) Planteamiento de la solución

Se quiere encontrar las variables del modelos (coeficientes del polinomio) para que éste minimice una función de coste o error, por ejemplo, la función de error SSE ("Sum of Square Error") dada por

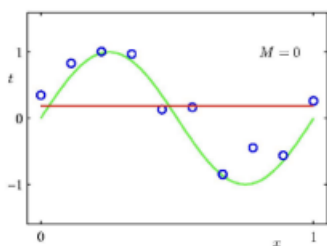
$$E(\mathbf{w}) = \frac{1}{2} \sum_{n=1}^N \{y(x_n, \mathbf{w}) - t_n\}^2$$

Existe una solución analítica única mediante álgebra lineal.

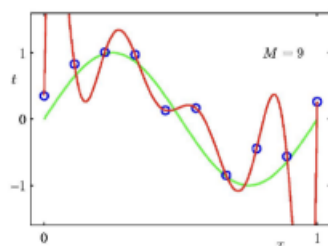


1.2.3) Peligros

1.2.4) Subajuste y sobreajuste



Ajuste pobre

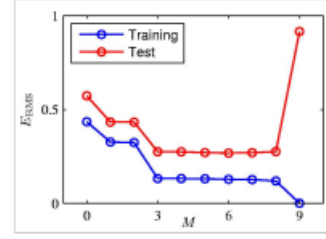


Sobreajuste ("overfitting")

1.2.5) Complejidad del modelo vs número de datos

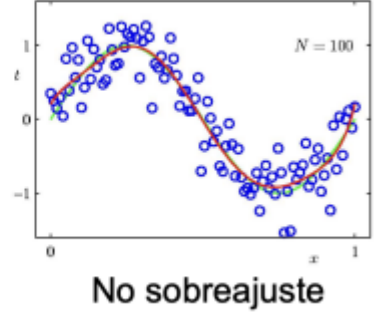
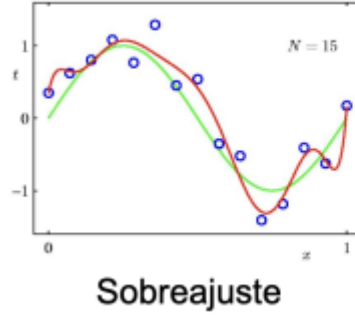
- Comportamiento con $M(N$ fijo)

Fijado N , la complejidad del modelo determina la generalización



- Comportamiento con N (M fijo)

Fijado $N(M = 9)$, N condiciona la solución del problema: si es bajo, se puede sobreajustar, si es alto (con relación a la dimensión) se reduce el sobreajuste.



1.2.6) Conclusión

Hay que limitar la complejidad del modelo acorde con el número de datos disponibles.

En número de muestras (N) suele ser un parámetro fijo condicionado por el problema.

Hay que lidiar con el compromiso entre la complejidad y el error de generalización.

1.2.7) Descomposición sesgo-varianza. Coste cuadrático

- Solución óptima

En el contexto de machine learning y desde un punto de vista teórico, los datos de un problema se considera extraídos de una disposición $p(\mathbf{x}, t)$. Definamos:

- Salida del modelo regresor: $y(\mathbf{x})$, aporta la solución ($y(\mathbf{x}) \approx t$).
- Coste cuadrático para una entrada \mathbf{x} : $L = (y(\mathbf{x}) - t)^2$.
- Coste cuadrático promedio (MSE):

$$E[L] = \int_{\mathbf{x}} \int_t L(t, y(\mathbf{x})) p(\mathbf{x}, t) dt d\mathbf{x} \quad (1)$$

$$= \int_{\mathbf{x}} \int_t (y(\mathbf{x}) - t)^2 p(\mathbf{x}, t) dt d\mathbf{x} \quad (2)$$

El término cuadrático de la Ecuación (1), se puede escribir como

$$\begin{aligned} \{y(\mathbf{x}) - t\}^2 &= \{y(\mathbf{x}) - E_t[t|\mathbf{x}] + E_t[t|\mathbf{x}] - t\}^2 \\ &= \{y(\mathbf{x}) - E_t[t|\mathbf{x}]\}^2 + \{E_t[t|\mathbf{x}] - t\}^2 + 2\{y(\mathbf{x}) - E_t[t|\mathbf{x}]\}\{E_t[t|\mathbf{x}] - t\} \end{aligned}$$

que insertado en (1) produce

$$E[L] = \int_{\mathbf{x}} \int_t \{y(\mathbf{x}) - E_t[t|\mathbf{x}]\}^2 p(\mathbf{x}, t) dt d\mathbf{x} + \int_{\mathbf{x}} \int_t \{E_t[t|\mathbf{x}] - t\}^2 P(\mathbf{x}, t) dt d\mathbf{x} + \int_{\mathbf{x}} \int_t 2\{y(\mathbf{x}) - E_t[t|\mathbf{x}]\}\{E_t[t|\mathbf{x}] - t\} p(\mathbf{x}, t) dt d\mathbf{x}$$

y realizando la integral sobre t , se obtiene

$$E[L] = \int_{\mathbf{x}} \{y(\mathbf{x}) - E_t[t|\mathbf{x}]\}^2 p(\mathbf{x}) d\mathbf{x} + \int_{\mathbf{x}} \text{var}(t|\mathbf{x}) + 0 \quad (3)$$

- El primer término queda así debido a que el integrando no depende de t .
- El segundo término representa la variabilidad intrínseca del target t promediada sobre t y \mathbf{x} , y el valor mínimo posible del coste esperado ($E[L]$). Se considera, por tanto, un ruido irreducible del problema.
- El tercer término se anula ya que al realizar la integral sobre t se tiene

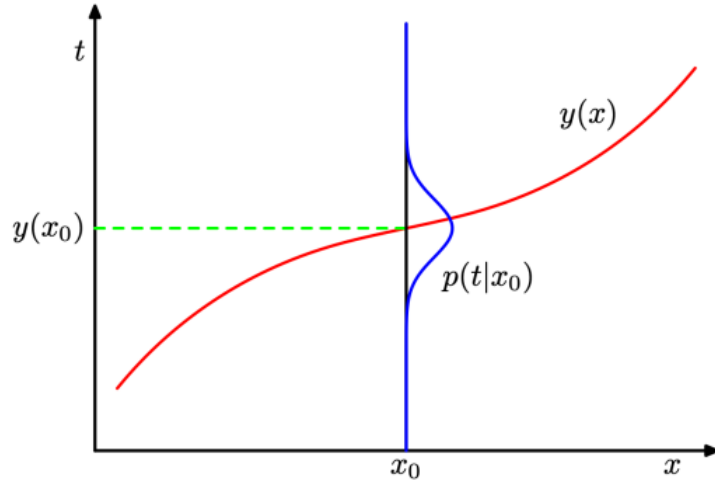
$$\begin{aligned} \int_t 2\{y(\mathbf{x}) - E_t[t|\mathbf{x}]\}\{E_t[t|\mathbf{x}] - t\}p(\mathbf{x}, t) dt &= 2\{y(\mathbf{x}) - E_t[t|\mathbf{x}]\} \int_t \{E_t[t|\mathbf{x}] - t\}p(\mathbf{x}, t) dt \\ &= E_t[t|\mathbf{x}] - E_t[t|\mathbf{x}] \\ &= 0 \end{aligned}$$

Como el segundo término de (3) no depende de nuestro regresor $y(\mathbf{x})$, la solución óptima que minimiza $E[L]$, y que llamaremos $h(\mathbf{x})$, es:

$$\boxed{h(\mathbf{x}) = E_t[t|\mathbf{x}]}$$

que anula el primer término de (3).

- Representación gráfica de la solución óptima (mínimo MSE). Ejemplo unidimensional.
- Como acabamos de ver, la solución es $y(x) = E_t[t|x]$, es decir, $h(x)$.



En la práctica, **nunca tendremos infinitas muestras**, sino un conjunto finito D de N datos: $D = \{x_j, t_h\}_{j=1}^N$. Por esto, no podemos conocer $h(\mathbf{x})$ con exactitud.

Si modelamos $h(\mathbf{x})$ con una función paramétrica $y(\mathbf{x}, \mathbf{w})$ gobernada por el vector \mathbf{w} , entonces la incertidumbre del modelo se puede tratar de dos formas:

- 1) Considerando un único conjunto de datos D , de forma que la incertidumbre se expresa tratando \mathbf{w} como una variable aleatoria (con una distribución a posteriori de \mathbf{w} , teoría bayesiana).
- 2) Considerando que se dispone de un gran número de conjuntos de datos diferentes, cada uno con N muestras extraídas independientemente de $p(\mathbf{x}, t)$, de forma que para cada uno de ellos, se obtiene –mediante algún algoritmo de entrenamiento– un predictor $y(\mathbf{x}, D)$ definido por un único vector \mathbf{w} (estimación única para cada D).

Siguiendo la segunda opción, para cada conjunto D y muestra \mathbf{x} , se obtiene un error dado por:

$$\{y(\mathbf{x}, D) - h(\mathbf{x})\}^2$$

Introduciendo el promedio sobre D de nuestro regresor para \mathbf{x} , podemos re-escribir el error como

$$\{y(\mathbf{x}, D) - E_D[y(\mathbf{x}, D)] - h(\mathbf{x})\}^2 = \{y(\mathbf{x}, D) - E_D[y(\mathbf{x}, D)]\}^2 + \{E_D[y(\mathbf{x}, D)] - h(\mathbf{x})\}^2 + 2\{y(\mathbf{x}, D) - E_D[y(\mathbf{x}, D)]\}\{E_D[y(\mathbf{x}, D)] - h(\mathbf{x})\}$$

Promediando con respecto a D , se anula el tercer término y se obtiene el **error esperado para la muestra x** :

$$E_D[\{y(\mathbf{x}, D) - h(\mathbf{x})\}^2] = \underbrace{E_D[\{y(\mathbf{x}, D) - E_D[y(\mathbf{x}, D)]\}^2]}_{\text{varianza}} + \underbrace{\{E_D[y(\mathbf{x}, D)] - h(\mathbf{x})\}^2}_{(\text{sesgo})^2} \quad (4)$$

- **Error esperado total: sesgo, varianza y ruido**

Hasta ahora tenemos considerado el error producido por una única muestra \mathbf{x} . Incluyendo (4) en el primer término de (3), se obtiene el **error global esperado**

$$\text{Error esperado} = \text{varianza} + (\text{sesgo})^2 + \text{ruido}$$

donde

$$\text{varianza} = \int_{\mathbf{x}} E_D[\{y(\mathbf{x}, D) - E_D[y(\mathbf{x}, D)]\}^2] p(\mathbf{x}) d\mathbf{x}$$

es la diferencia cuadrática entre las predicciones de nuestro modelo y la media de dichas predicciones;

$$(\text{sesgo})^2 = \int_{\mathbf{x}} \{E_D[y(\mathbf{x}, D)] - h(\mathbf{x})\}^2 p(\mathbf{x}) d\mathbf{x}$$

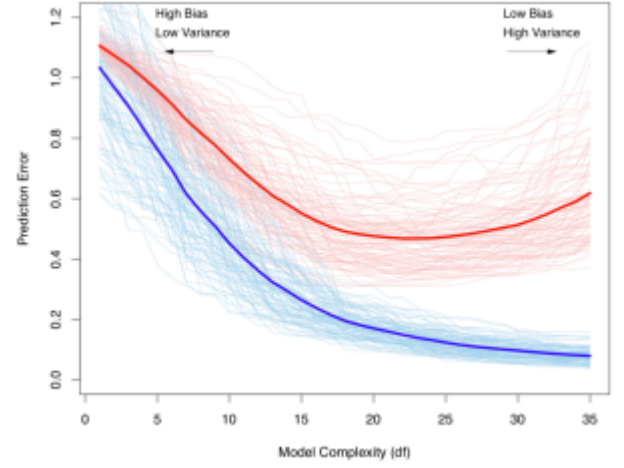
es la diferencia entre la predicción esperada de nuestro modelo y los valores verdaderos; y

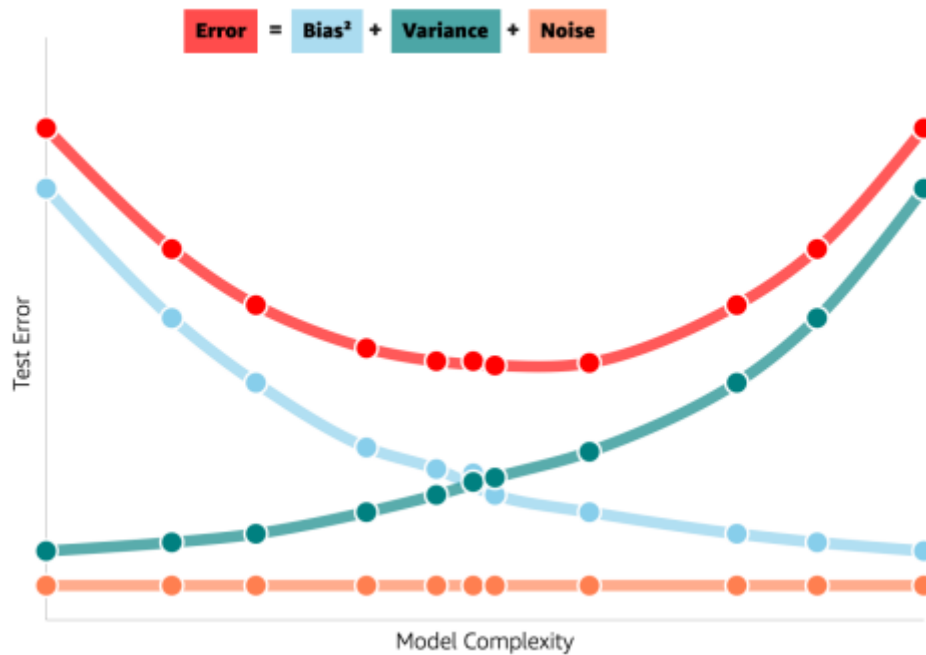
$$\text{ruido} = \int_{\mathbf{x}} \int_t \{h(\mathbf{x}) - y\}^2 p(\mathbf{x}, t) dt d\mathbf{x}$$

es el error irreducible que siempre está presente. Es el segundo término de (3).

Representaciones gráficas

- **Error esperado vs Complejidad**

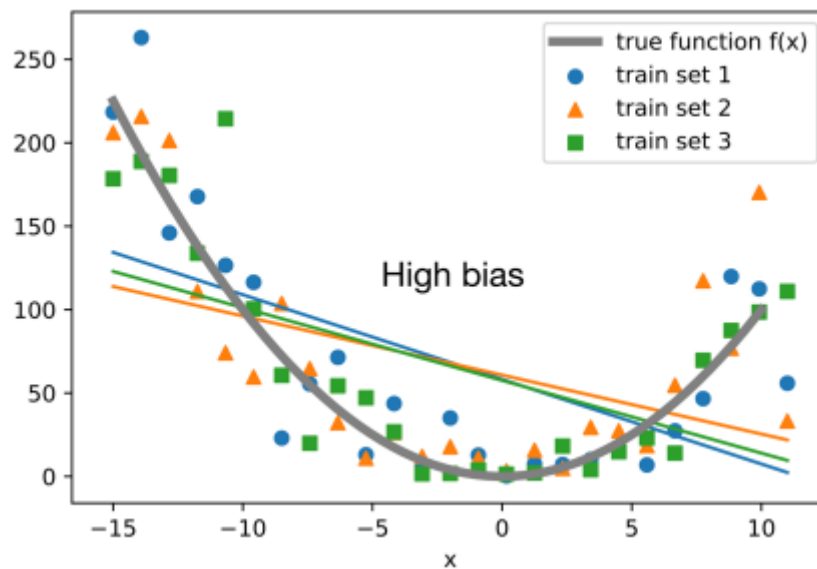




- Modelos complejos (alta capacidad, flexibles) producen varianzas elevadas y sesgos bajos
- Modelos simples (baja capacidad, rígidos) producen varianzas bajas y sesgos elevados

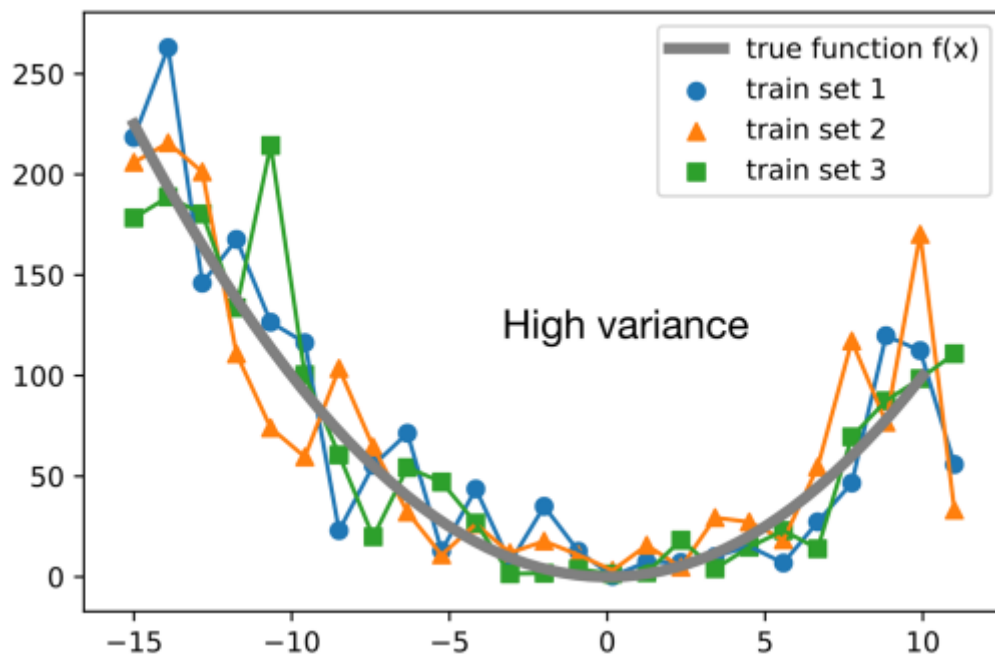
• Sesgo

Sea $f(\mathbf{x})$ una función desconocida que queremos aproximar, la llamaremos "true function". Supongamos que tenemos diferentes conjuntos de entrenamiento extraídos de función de distribución definida como " $f(\mathbf{x}) + \text{noise}$ ". La siguiente figura muestra tres regresores lineales, uno para cada conjunto de entrenamiento.

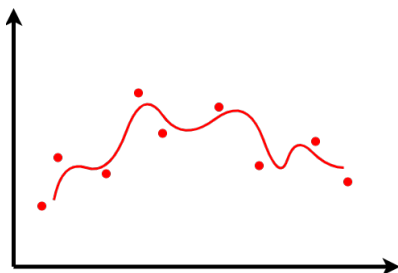


• Varianza

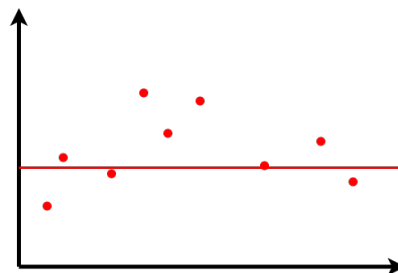
En este caso, las regresiones se realizan perfectamente mediante árboles de decisión sin podar. Cada uno, se ajusta perfectamente a los datos.



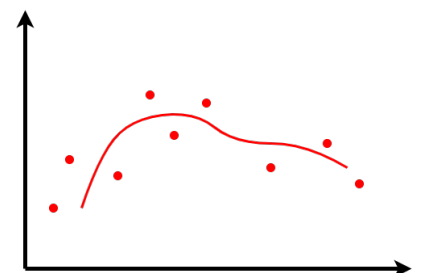
• Compromiso sesgo-varianza



High variance

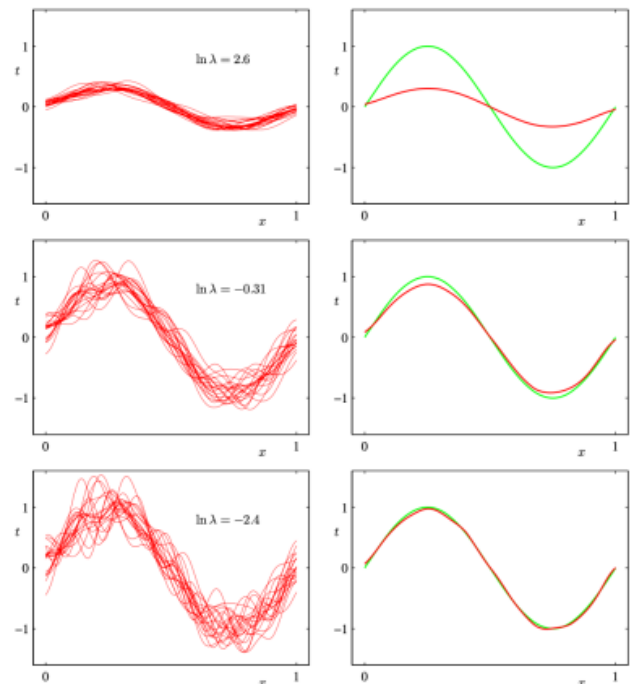


High bias



Low variance - low bias

- Mismo ejemplo de regresión considerado anteriormente.
- 100 conjuntos de datos, cada uno con 25 muestras. Se realizan 100 entrenamientos.
- Regresores: mezclas de 24 gaussianas.
- λ parámetro que determina la complejidad del modelo. Aumenta hacia abajo.
- En la primer columna, se muestran 20 entrenamientos (modelos).
- Resultados:
 - Primera fila: complejidad baja, varianza pequeña y sesgo grande.
 - Última fila: complejidad alta, varianza grande y sesgo bajo.
 - Fila centro: solución intermedia. Mejor compromiso sesgo-varianza.



1.2.8) Algunas técnicas de generalización

¿Cómo evitar el sobre-ajuste?

- **"Early stopping"**: Se detiene el entrenamiento del modelo antes de que alcance la convergencia total en los datos de entrenamiento. Se emplea un conjunto de parada.
- **Regularización L1 y L2** (Regresión Ridge y Lasso): Se agregan términos de penalización (normas L1 ó L2 de los coeficientes del modelo) a la función de pérdida durante el entrenamiento. Son técnicas **'Wight decay'**.
- **Dropout**: Es una técnica específica para redes neuronales. Durante el entrenamiento aleatoriamente se desactivan (ponen a cero) ciertas neuronas en cada paso. Esto evita que el modelo dependa demasiado de neuronas específicas y promueve una mejor generalización.
- **Aumento de datos**: Se aumenta el tamaño del conjunto de datos mediante técnicas como la rotación, la inversión y el recorte de imágenes. Esto ayuda a exponer al modelo a una mayor variedad de datos y reduce el riesgo de sobresaliente.
- **Feature Selection**: La selección adecuada de características es esencial para evitar el sobreajuste. Eliminar características irrelevantes o altamente correlacionadas puede reducir la complejidad del modelo y mejorar su generalización.
- **Ensemble learning**: Combina múltiples modelos más simples y menos propensos al sobreajuste. El Bagging (Bootstrap Aggregating) y el Boosting son ejemplos de ensemble learning.

¿Cómo evitar el sub-ajuste?

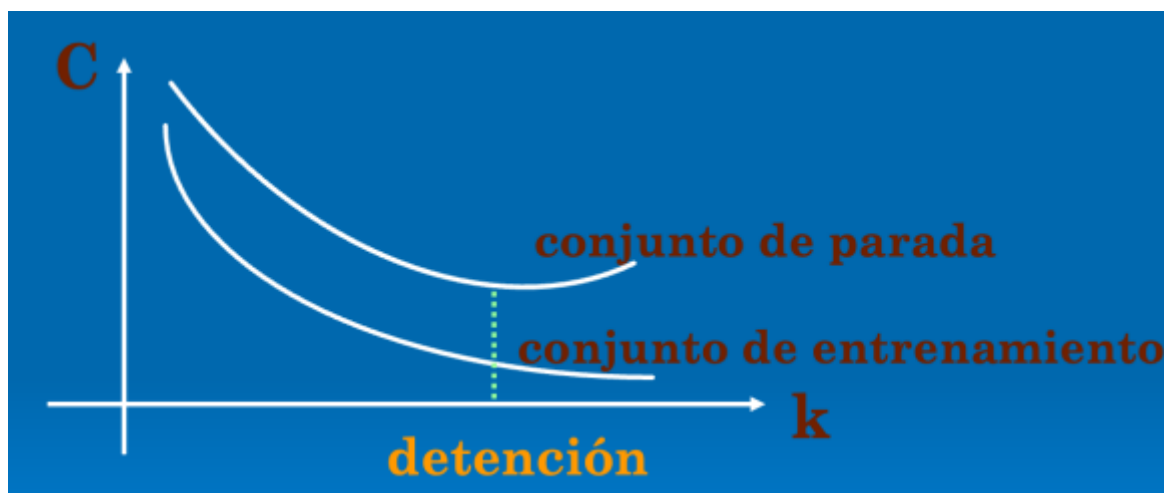
Evitar el sub-ajuste es tan importante como evitar el sobre-ajuste.

- Aumentar la complejidad del modelo.
- Aumentando el tiempo de entrenamiento.
- Añadiendo más características.
- Reducir la regularización.

1.2.9) Evitar el sobreajuste: "early stopping"

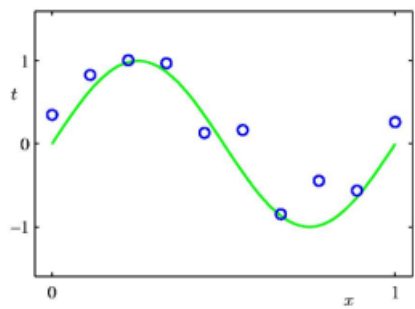
- **Sobreentrenamiento**: demasiados ciclos adaptan en exceso la red a las muestras de entrenamiento, no generalizando bien.

Para evitarlo (mantener la generalización), se emplea un conjunto adicional, extraído del conjunto de entrenamiento llamado **conjunto de validación** (en este caso, actúa como conjunto de parada)

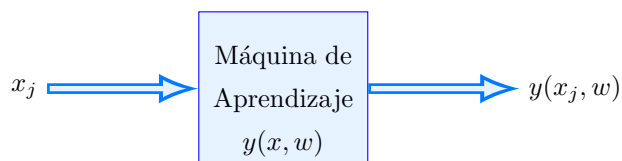


1.2.10) Evitar el sobreajuste: "Weight Decay"

Retomamos el problema de **regresión**: $y = \sin(2\pi x) + n(x)$, donde $n(x)$ es un ruido gaussiano pequeño.



Conjunto de entrenamiento: $\{x_j, t_j\}_{j=1}^{N=10}$

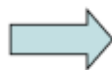


Aproximador polinómico: $y(x, \mathbf{w}) = w_0 + w_1x + w_2x^2 + \dots + x_Mx^M = \sum_{j=0}^M w_jx^j$

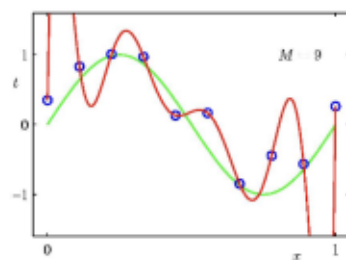
• Técnica de regularización

Valores de los pesos para varios M

	$M = 0$	$M = 1$	$M = 6$	$M = 9$
w_0^*	0.19	0.82	0.31	0.35
w_1^*		-1.27	7.99	232.37
w_2^*			-25.43	-5321.83
w_3^*			17.37	48568.31
w_4^*				-231639.30
w_5^*				640042.26
w_6^*				-1061800.52
w_7^*				1042400.18
w_8^*				-557682.99
w_9^*				125201.43



Los pesos aumentan con el orden del modelo para ajustarse al ruido

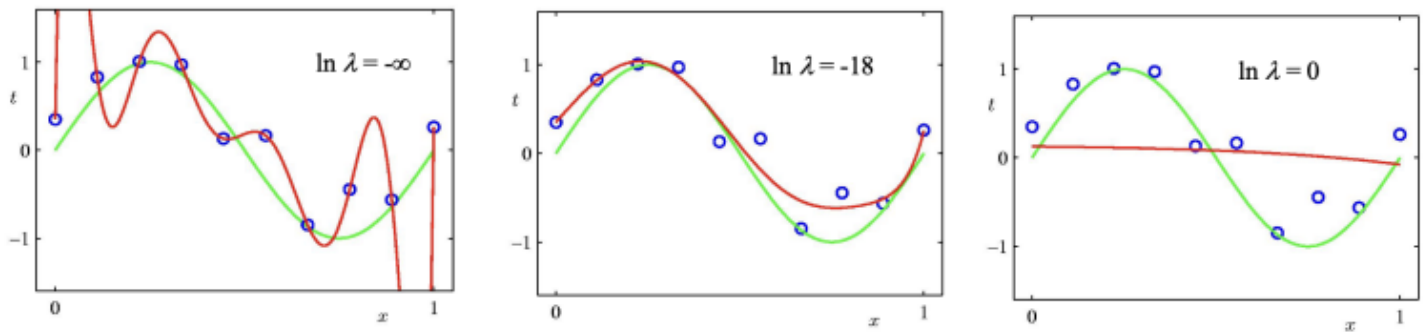


"**Weight Decay**": Se regulariza la solución mediante la minimización adicional (cuadrática) de los pesos

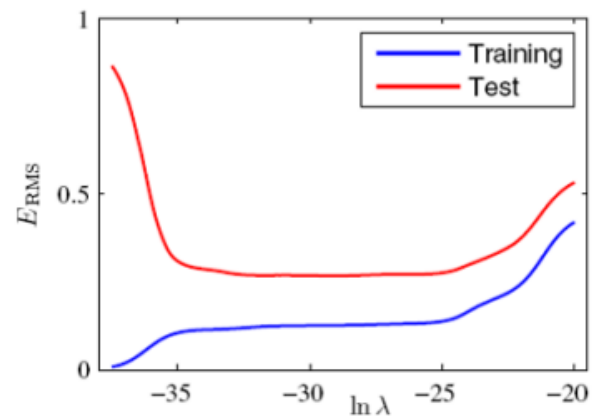
$$\tilde{E}(\mathbf{w}) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \{y(x_n, \mathbf{w}) - t_n\}^2 + \underbrace{\frac{\lambda}{2} \|\mathbf{w}\|^2}_{\text{Regularización}}$$

Regularizando para $M = 9$

	$\ln \lambda = -\infty$	$\ln \lambda = -18$	$\ln \lambda = 0$
w_0^*	0.35	0.35	0.13
w_1^*	232.37	4.74	-0.05
w_2^*	-5321.83	-0.77	-0.06
w_3^*	48568.31	-31.97	-0.05
w_4^*	-231639.30	-3.89	-0.03
w_5^*	640042.26	55.28	-0.02
w_6^*	-1061800.52	41.32	-0.01
w_7^*	1042400.18	-45.95	-0.00
w_8^*	-557682.99	-91.53	0.00
w_9^*	125201.43	72.68	0.01



En la figura, se observa como λ determina la generalización de la solución



Una forma sencilla de encontrar el valor óptimo de λ (la complejidad del modelo) es mediante la evaluación de las prestaciones del **Conjunto de Validación** (el mismo conjunto empleado para early-stopping).

1.3) Evaluación de prestaciones

Para evaluar las prestaciones (**rendimiento**) de un modelo de machine learning ya entrenado, se utilizan diversas métricas de evaluación dependiendo del tipo de problema (clasificación, regresión, etc.) y las características del conjunto de datos.

Métricas más comunes:

- Problemas de regresión.
 - Error cuadrático medio (Mean Square Error, MSE)
 - Error absoluto medio (Mean Absolute Error, MAE)
 - Coeficiente de Determinación R^2 .
- Problemas de clasificación.
 - Matriz de confusión.
 - Exactitud (Accuracy)

- Precisión (Precision)
- Sensibilidad (Recall) y Especificidad (Specificty)
- F1-score
- ROC

1.3.1) Regresión

- **Error Cuadrático Medio (MSE):**

$$MSE(\mathbf{w}) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \{y(x_n, \mathbf{w}) - t_n\}^2$$

- **Error Absoluto Medio (MAE):**

$$MAE(\mathbf{x}) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N |y(x_n, \mathbf{w}) - t_n|$$

En estas fórmulas, N el número total de instancias, $y(x_n, w)$ la salida obtenida del modelo w y t_n la salida real de la instancia n . Interpretación de MSE y MAE: A menor error mejor siempre será el modelo.

- **Coefficiente de Determinación R^2**

Métrica a utilizar en tareas de regresión. Indica la cantidad proporcional de variación en la variable de respuesta y , explicada según las variables independientes X . Es una medida adimensional. Toma valores en el intervalo $[0, 1]$.

Cuando mayor es el valor mejor es el ajuste del modelo.

La fórmula es:

$$R^2 = 1 - \frac{\sum (t_i - y_i)^2}{\sum (y_i - \mu_t)^2}.$$

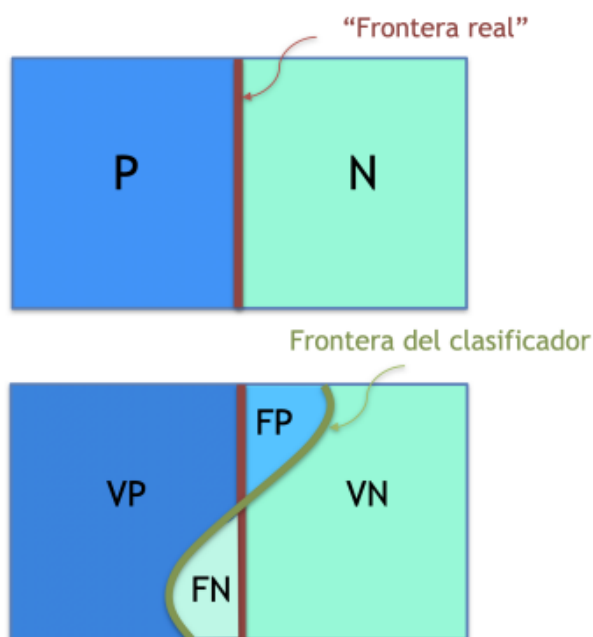
Siendo t_i la salida esperada de la instancia i , y_i la salida del modelo para la instancia i y μ_t la media de los valores de salida de todas las instancias. Interpretación de R^2 .

- Valor entre 0 y 1.
- Más cercano a 0 \rightarrow modelo con poco ajuste.
- Más cercano a 1 \rightarrow modelo con mayor ajuste.
- Umbral entre el nivel de ajuste se encuentra superior a 0.5, para algunas áreas superior a 0.75.

1.3.2) Clasificación

Supongamos un problema de clasificación binario con datos bidimensionales positivos (clase P) y negativos (clase N). En la figura anexa, se muestra el espacio de los datos y la frontera real (ideal) del problema.

Cuando se entrena un modelo con los datos disponibles, se obtendrá una frontera diferente a la ideal, como se muestra en la figura.



El objetivo es conseguir un clasificador que produzca una frontera lo más parecida a la real, es decir,

$$VP = P \longrightarrow FN = 0$$

y

$$VN = N \longrightarrow FP = 0$$

¿Cómo medir este parecido?

Con **métricas** como:

- Matriz de Confusión
- Exactitud (Accuracy)
- Precisión (Precision)
- Sensibilidad (Recall) y Especificidad (Specificity)
- F1-score
- ROC
- Matriz de confusión

Matriz de Confusión		Etiquetas reales		
		Positivo (P)	Negativo (N)	
Resultado del clasificador	Positivo (P)	VP	FP	P'
	Negativo (N)	FN	VN	N'
		P	N	

Tema 2: Aprendizaje Supervisado

2.1) Árboles de Decisión

- Definición

Los árboles de decisión son máquinas de aprendizaje supervisado que sirven para clasificar o aproximar.

Supongamos el siguiente problema

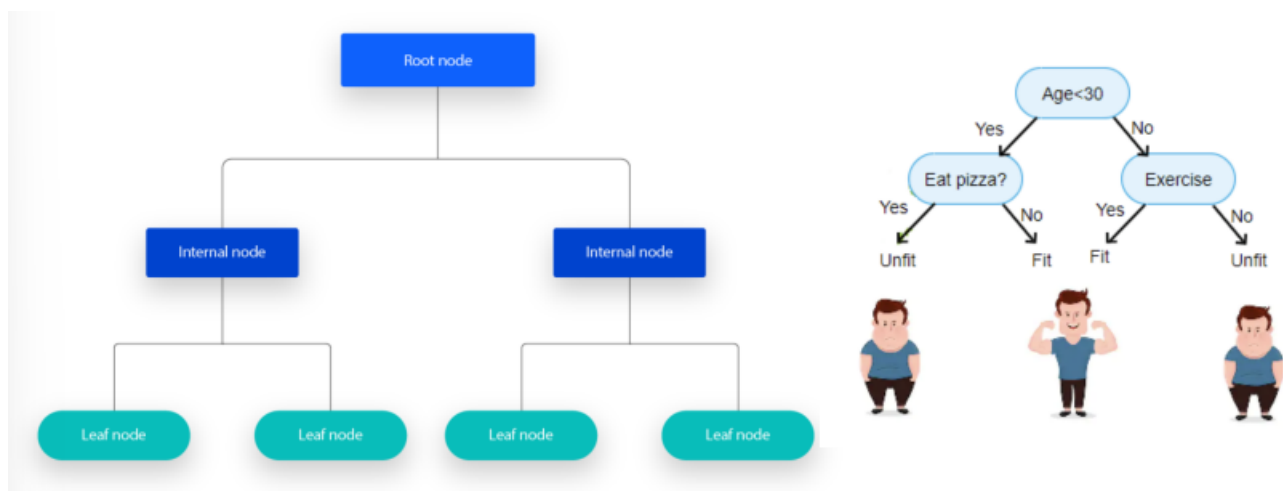
Paciente	Presión Arterial	Urea en sangre	Gota	Hipotiroidismo	Administrar Tratamiento
1	Alta	Alta	Sí	No	No
2	Alta	Alta	Sí	Sí	No
3	Normal	Alta	Sí	No	Sí
4	Baja	Normal	Sí	No	Sí
5	Baja	Baja	No	No	Sí
6	Baja	Baja	No	Sí	No
7	Normal	Baja	No	Sí	Sí
8	Alta	Normal	Sí	No	No
9	Alta	Baja	No	No	Sí
10	Baja	Normal	No	No	Sí
11	Alta	Normal	No	Sí	Sí
12	Normal	Normal	Sí	Sí	Sí
13	Normal	Alta	No	No	Sí
14	Baja	Normal	Si	Sí	No

- Planteamiento del problema: ¿Cuál es la **mejor secuencia de preguntas** para saber la clase a la que pertenece un objeto descrito por sus atributos?
- Evidentemente, la "mejor respuesta" es aquella que con el **menor número de preguntas**, devuelve una respuesta suficientemente buena.
- ¿Qué es mejor preguntar primero si tiene gota o cómo tiene la presión arterial?

2.1.1) Arquitectura

Un árbol de decisión es una estructura jerárquica que consta de un nodo raíz, ramas, nodos internos y nodos hoja.

- Comienzo con un **nodo raíz** sin ramas entrantes. Las ramas salientes del nodo raíz alimentan los nodos internos.
- Los **nodos internos** evalúan características disponibles para formar subconjuntos homogéneos, indicados por nodos hoja o nodos terminales.
- Los **nodos hoja** representan todos los resultados posibles dentro del conjunto de datos.



2.1.2) Ventajas y desventajas

- Pros

- Fáciles de entender e interpretar.
- Sirven también para establecer reglas
- No lineales
- Menos pre-procesado de los datos: son robustos ante presencia de datos erróneos (outlier), valores faltantes o tipo de datos.
- Es un método no paramétrico (por ejemplo, no hay suposición acerca del espacio de distribución y la estructura del clasificador).

- Contras

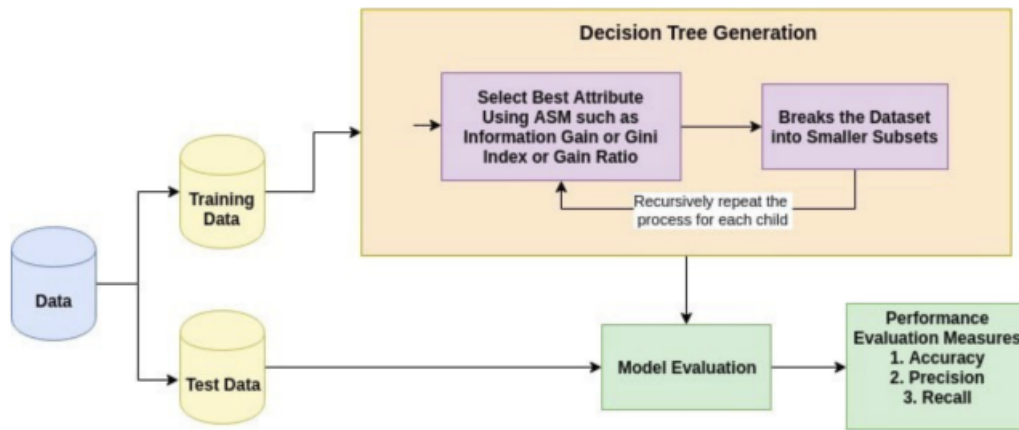
- **Sobreajuste:** Los árboles más pequeños son más fáciles de interpretar, pero los más grandes pueden resultar en sobreajuste.
- Pérdida de información al categorizar variables continuas.
- **Precisión:** Otros métodos (por ejemplo, SVM) a menudo tienen tasas de error 30% más bajas que los árboles básico (ID.3 y CART).
- **Inestabilidad:** un pequeño cambio en los datos puede modificar ampliamente la estructura del árbol (distintos conjuntos, distintos árboles). Varianza elevada.

- Definición alternativa: **recursividad**

Un árbol de decisión es una estructura recursiva formada por nodos, en el que existe:

- Un nodo raíz
- El nodo raíz tiene uno o más subnodos.
- Cada uno de los subnodos puede ser, a su vez, raíz de un árbol

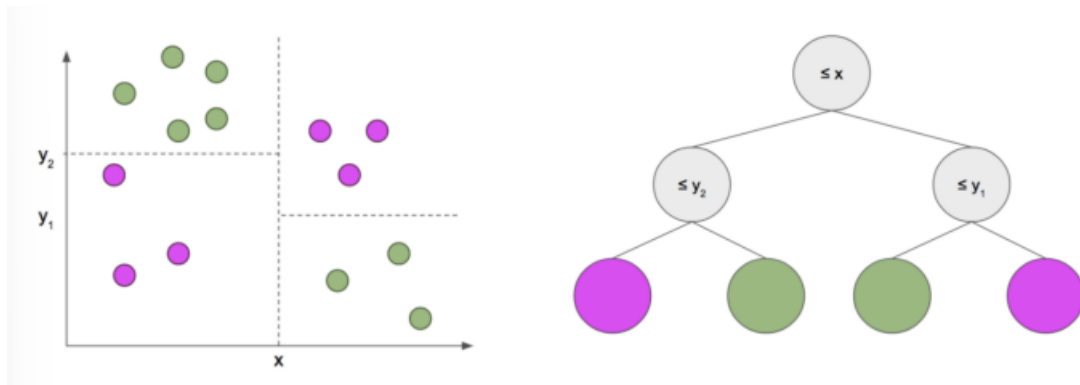
Esta característica recursiva hace que muchos de los algoritmos para crearlos se comporten también de manera recursiva.



2.1.3) Clasificación vs Regresión

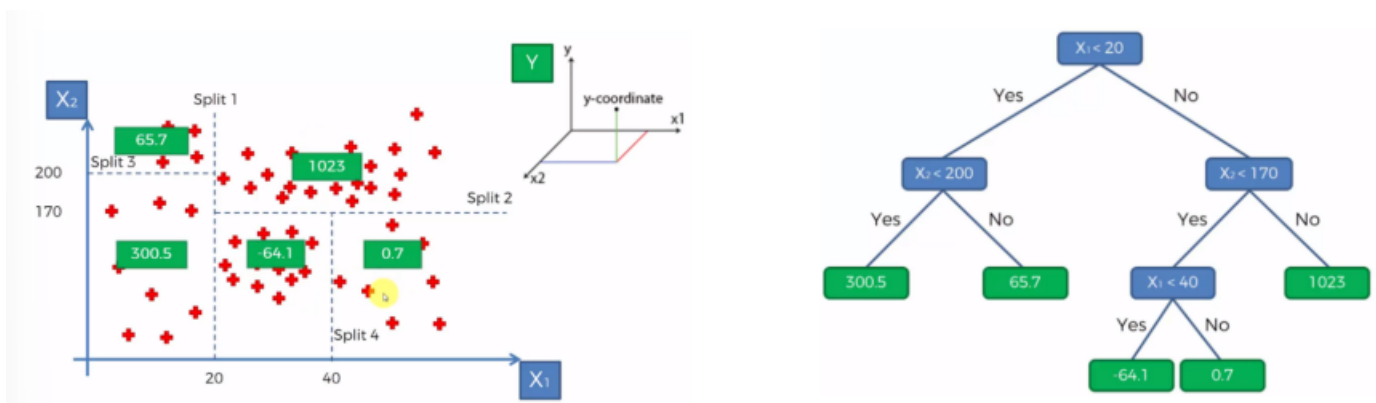
- Clasificación

- La variable dependiente es categórica.
- Los valores de los nodos hoja son la **moda** de las observaciones de la región



- Regresión

- La variable dependiente es continua.
- Los valores de los nodos hoja son la **media** de las observaciones de la región.



2.2) Construcción de árboles de decisión

2.2.1) Particiones

Cada nodo define una **partición** del conjunto de entrenamiento en función de los datos que representa.

Las particiones producen subconjuntos que son **exhaustivos** y **excluyentes**.

Cuestiones clave:

- **Tipos de particiones:** cuantos más, más posibilidad de encontrar patrones y, por tanto, los árboles más precisos y expresivos.
- **Número de particiones:** A más particiones mayor complejidad. Equilibrio entre complejidad y precisión.
- Selección del **mejor atributo** en cada paso.
- Selección del **mejor valor** de umbral de los valores.

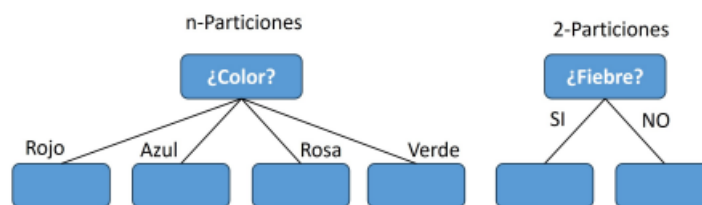
2.2.2) Particiones posibles

Los algoritmos más populares sólo proponen un tipo de partición para valores nominales y otro para valores numéricos:

- **Particiones nominales:** En el caso que tengamos un atributo x_i que tenga como posibles valores $\{v_1, v_2, \dots, v_n\}$ sólo es posible la partición

$$(x_1 = v_1, x_2 = v_2, \dots, x_n = v_n)$$

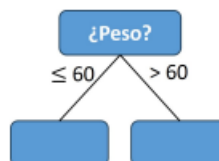
que da lugar a árboles con nodos con más de dos nodos hijos.



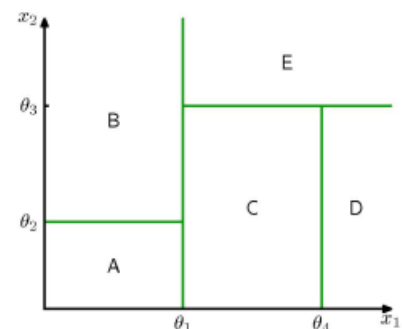
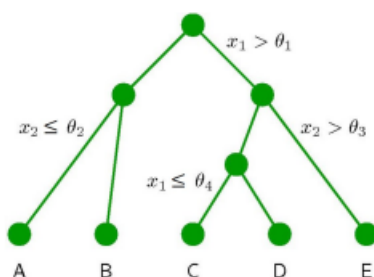
En el caso de árboles binarios se tienen que evaluar n particiones (una por cada posible valor), definidas por $(x_i = v_i, x_i \neq v_i)$.

- **Particiones numéricas:** Si el atributo x_i es numérico y continuo, se intenta definir particiones que separe las instancias en intervalos de la forma

$$(x_i \leq a, x_i > a)$$



eligiendo diferentes valores de a tenemos diferentes particiones. La expresividad resultante se conoce como *expresividad cuadrangular* y que no relacionan atributos (sólo un atributo cada vez).



2.3) ID3: Algoritmo básico de aprendizaje

El algoritmo básico de aprendizaje es el **ID3 (Iterative Dichotomiser 3)**, J. Ross Quinlan, investigador australiano que propuso el método en 1983

El método ID3 trata de encontrar una partición que asegure la **máxima capacidad predictiva y la máxima homogeneidad** de las clases

Medida de homogeneidad: la **entropía**

Repetición de **”cortes en dos”** hasta que se cumpla una determinada condición

2.3.1) Entropía

Para determinar el mejor atributo, el ID3 utiliza la **entropía**.

Sea S un conjunto de entrenamiento. Sea p_{\oplus} la proporción de instancias positivas en S y p_{\ominus} la proporción de instancias negativas en S . La **entropía de S** es:

$$H(S) = p_{\oplus} \log_2 \frac{1}{p_{\oplus}} + p_{\ominus} \log_2 \frac{1}{p_{\ominus}} = -p_{\oplus} \log_2 p_{\oplus} - p_{\ominus} \log_2 p_{\ominus}$$

(Relación de la entropía con los conceptos de desorden, equiprobabilidad y homogeneidad).