Métodos No Lineales

Universidad Católica del Uruguay

Arboles de Decisión

Árboles de Decisión

Universidad Católica del Uruguay

- Muy utilizado y popular
- Aproxima funciones que toman valores discretos.
- La función aprendida se representa como un árbol
- Robusto ante datos con ruido
- Aprende expresiones disyuntivas: los árboles aprendidos se pueden también representar como reglas *if-then* (intuitivas)
- Numerosas aplicaciones: diagnósticos médicos, causas de fallo en equipos, evaluación de riesgos de créditos en la concesión de préstamos...
- Árbol de clasificación

Representación como árboles

- Cada nodo (no terminal) especifica un test de algún atributo de la instancia
- Cada rama corresponde a un posible valor del atributo
- Cada nodo terminal indica la clase en la que se clasifica
- Instancias no vistas se clasifican recorriendo el árbol: pasándoles el test en cada nodo, por orden desde el nodo raíz hasta algún nodo hoja, que da su clasificación

Ejemplo: ¿Vamos a jugar al tenis?

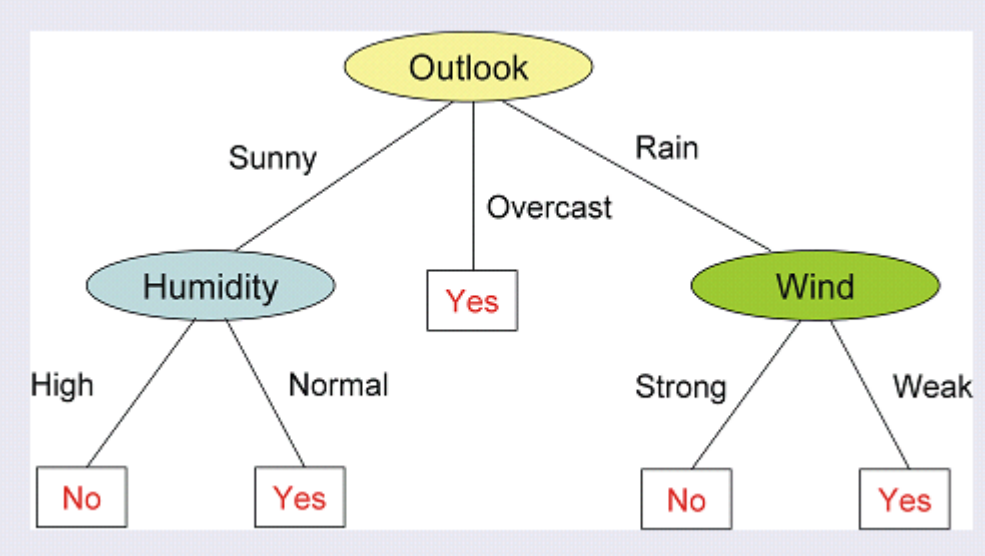
Universidad Católica del Uruguay

- Tarea: decidir si se va a jugar al tenis.

- Criterio: se va a jugar al tenis ...
  - si va a llover, sólo si no hay mucho viento.
  - si va a estar soleado pero no muy húmedo.
  - si va a estar nublado.
  - no en cualquier otro caso.

Ejemplo: JugarTennis

- Clasificar las mañanas de sábado en si son o no adecuadas para jugar al tenis – supongamos que hemos creado (**¿?**) el siguiente árbol de decisión:



- **Instancia**: EstadoDelTiempo=SOLEADO, Temperatura=CALUROSO, Humedad=ALTA, Viento=FUERTE
- Entra por el camino izquierdo y se predice JugarTennis=No

Ejemplo: JugarTennis

Universidad Católica del Uruguay

- El árbol representa una disyunción de conjunciones de restricciones sobre los valores de los atributos de las instancias
- Un camino = una conjunción de *tests* de atributos
- Todo el árbol = disyunción de estas conjunciones
- Este árbol es:

(EstadoDelTiempo=SOLEADO ^ Humedad=Normal)
v (EstadoDelTiempo=CUBIERTO)
v (EstadoDelTiempo=LLUVIOSO ^ Viento=SUAVE)

¿Vamos a jugar al tenis?

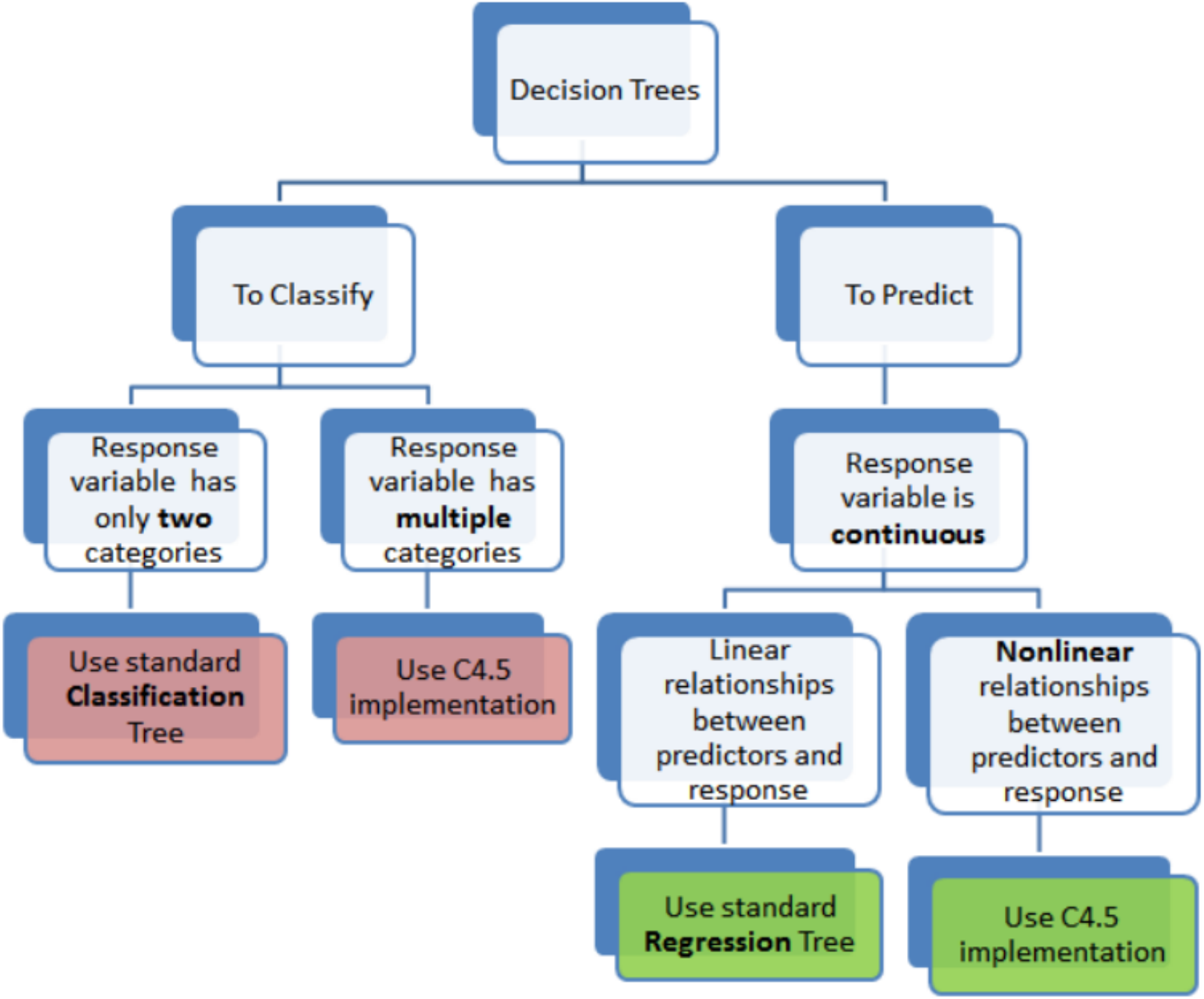
Universidad Católica del Uruguay

```
SI (EstadoDelTiempo== SOLEADO){
        SI (Humedad == ALTA)
                DEVOLVER NO;
        SINO, SI (Humedad == NORMAL)
                DEVOLVER SI;
} SINO SI(EstadoDelTiempo == CUBIERTO){
        DEVOLVER SI;
} SINO SI (EstadoDelTiempo == LLUVIOSO){
        SI (Viento == FUERTE)
                DEVOLVER NO;
        SINO SI (Viento == SUAVE)
                DEVOLVER SI;
}
```

Tipos de árboles

Universidad Católica del Uruguay

- Arboles de clasificación: valores de salida discretos
  - CLS, ID3, C4.5, ID4, ID5, C4.8, C5.0
- Arboles de regresión: valores de salida continuos
  - CART, M5, M5’


Decision Trees
To Classify
To Predict
Response variable has only **two** categories
Response variable has **multiple** categories
Response variable is **continuous**
Use standard **Classification** Tree
Use C4.5 implementation
Linear relationships between predictors and response
Nonlinear relationships between predictors and response
Use standard **Regression** Tree
Use C4.5 implementation

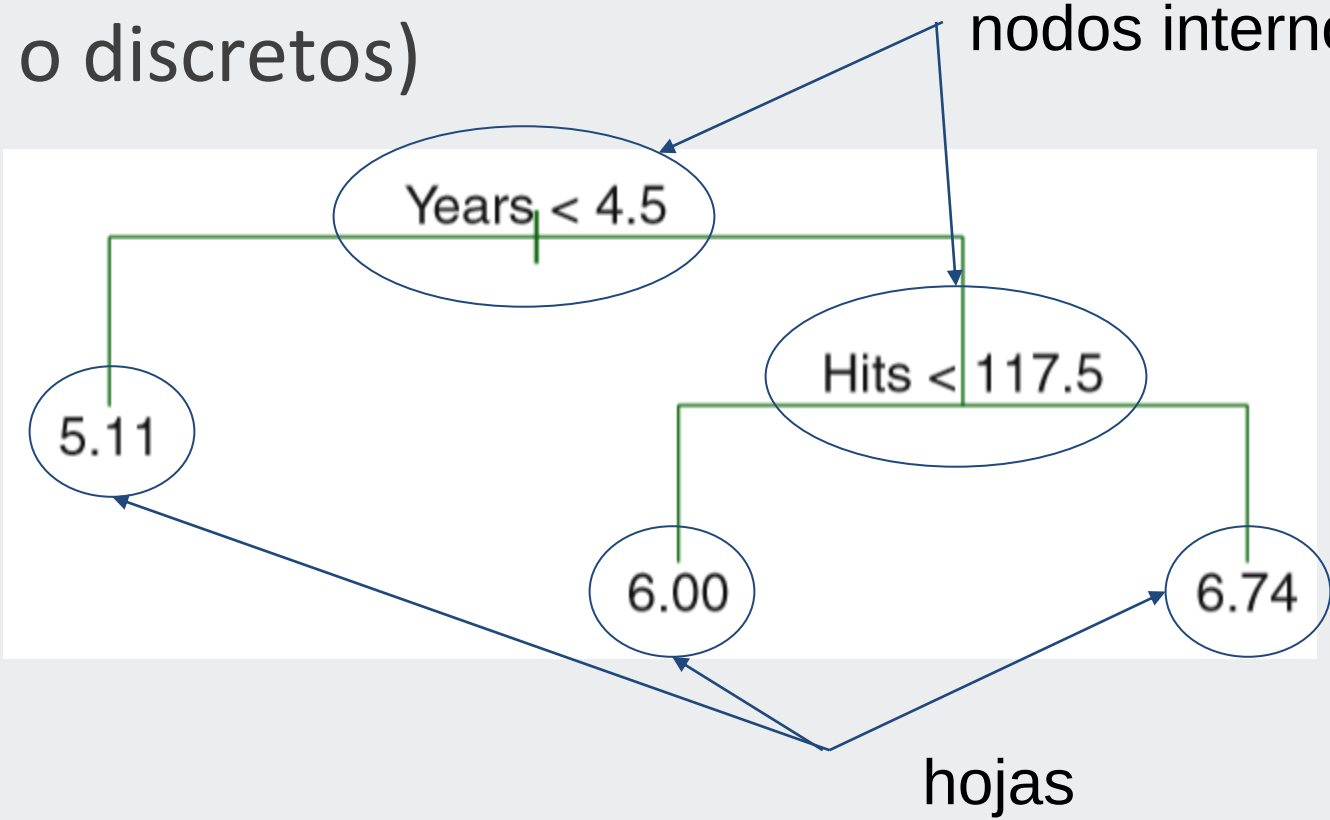
AD para Clasificación, modelo básico: ID3 “Iterative dicotomiser” [Quinlan, 1986]

Universidad Católica del Uruguay

- Basado en el algoritmo CLS (Concept Learning Systems) [Hunt et al., 1966], que usaba sólo atributos binarios
- Búsqueda ávida
- Construir el árbol de arriba a abajo, preguntando: ¿Qué ***atributo*** seleccionar como nodo ***raíz***?
- Se evalúa cada atributo para determinar cuán bien clasifica los ***ejemplos*** por sí mismo
- Se selecciona el ***mejor*** como nodo
- Repetir usando los ***ejemplos*** asociados con el nodo
- Parar cuando el árbol ***clasifica correctamente todos los ejemplos*** o cuando ***se han usado todos los atributos***
- Etiquetar el nodo hoja con la clase de los ejemplos

Árboles de decisión - CART

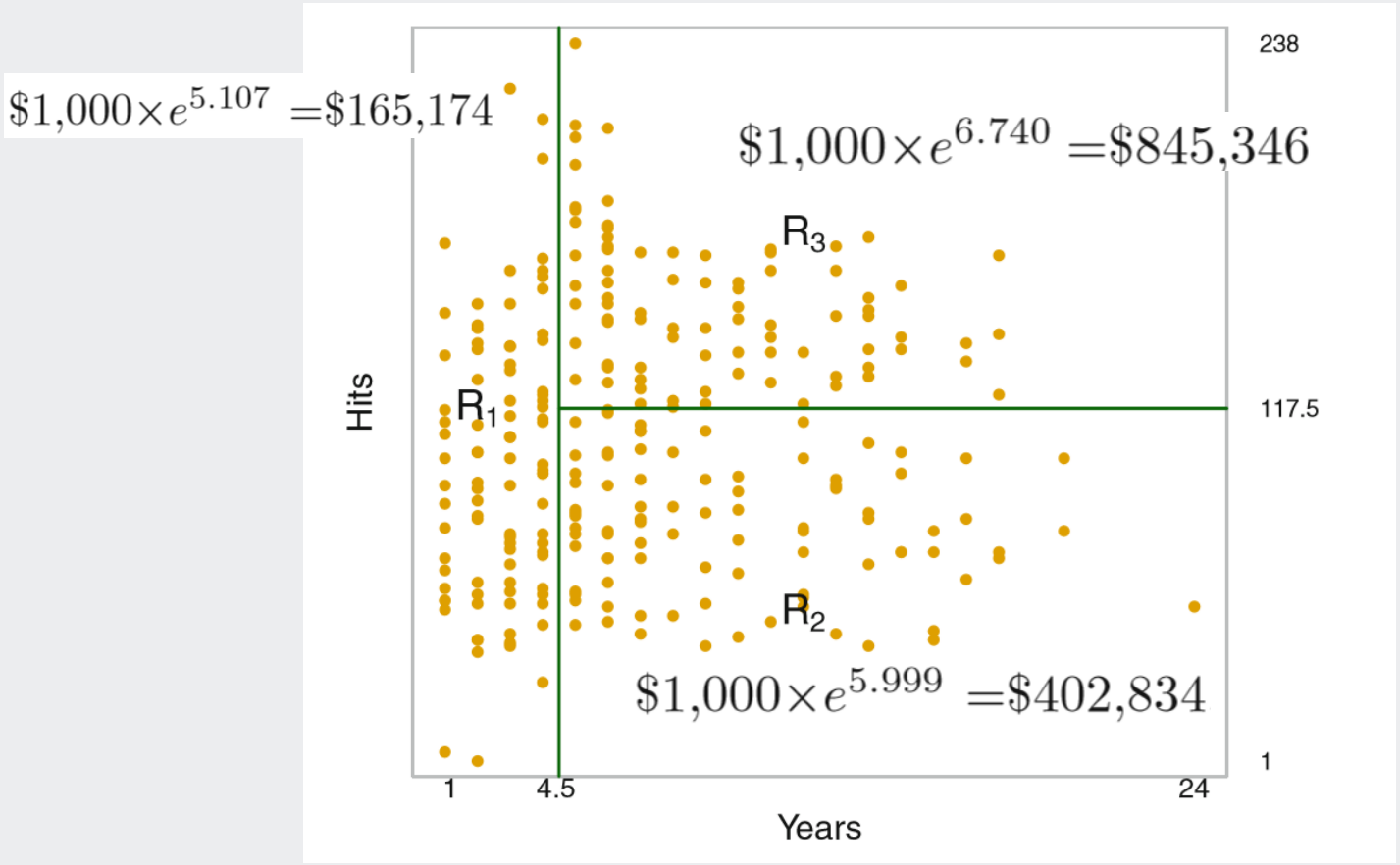
- CART: Classification And Regression Tree
- El modelo de predicción se representa mediante un árbol binario (predictores continuos o discretos)



Ejemplo: predicción del salario de un bateador
Predictores: Años de jugador y hits de la temporada anterior (salario transformado mediante logaritmo, en miles)

Árboles de decisión para regresión

- Segmentación producida en el espacio de predictores:



Arboles de Clasificación

Algoritmo básico: ID3 “Iterative dicotomiser “[Quinlan, 1986]

Universidad Católica del Uruguay

- Basado en el algoritmo CLS (Concept Learning Systems) [Hunt et al., 1966], que usaba sólo atributos binarios
- Búsqueda ávida
- Construir el árbol de arriba a abajo, preguntando: ¿Qué ***atributo*** seleccionar como nodo ***raíz***?
- Se evalúa cada atributo para determinar cuán bien clasifica los ***ejemplos*** por sí mismo
- Se selecciona el ***mejor*** como nodo
- Repetir usando los ***ejemplos*** asociados con el nodo
- Parar cuando el árbol ***clasifica correctamente todos los ejemplos*** o cuando ***se han usado todos los atributos***
- Etiquetar el nodo hoja con la clase de los ejemplos

Algoritmo básico

Funcion APRENDER_ARBOL_DECISION (***ejemplos, atributos, valor_defecto***): ARBOL_DECISION

COM

si *ejemplos* está vacío **entonces devolver** *valor_defecto*

si no

si todos los elementos de ***ejemplos*** tienen la misma clasificación **entonces**

devolver la clasificación

si no si *atributos* esta vacío **entonces devolver** VALOR_MAYORIA (*ejemplos)*

si no

mejor = ELEGIR_ATRIBUTO (atributos, ejemplos)

arbol <- un nuevo árbol de decisión, cuya raíz es ***mejor***

m <- VALOR_MAYORIA(*ejemplos)*

para cada valor v_i de ***mejor*** hacer

ejemplos(i) <- {elementos de ejemplos con *mejor* = v_i}

subarbol = APRENDER_ARBOL_DECISION(*ejemplos(i)*, *atributos – mejor, m*)

añadir una rama a *arbol* con la etiqueta v_i y el subárbol *subarbol*

devolver *arbol*

FIN

ID3

- Paso clave: ¿cómo seleccionar el atributo?
- Nos gustaría el más útil para clasificar ejemplos; el que los separa bien
- ID3 escoge la variable más efectiva usando la ***ganancia de información*** (maximizarla)
- Mide cuán bien un atributo separa los ejemplos de entrenamiento de acuerdo a su clasificación objetivo, y selecciona el mejor.
- Reducción esperada en ***entropía*** (incertidumbre), causada al particionar los ejemplos de acuerdo a este atributo

Entropía o cantidad esperada de información

- Medida de la homogeneidad de un conjunto de muestras.
- En teoría de la información: medida de la incertidumbre sobre una fuente de mensajes.
- Sea una fuente **S** que puede producir ***n*** mensajes diferentes $\{m_1, m_2, \ldots, m_n\}$. Los mensajes son independientes, y la probabilidad de producir el mensaje $\boldsymbol{m_i}$ es $\boldsymbol{p_i}$.
- Para tal fuente **S** con distribución de probabilidades de los mensajes $P = (p_1, p_2, \ldots p_n)$, la entropía E(P) es:

$$E(P) = -\sum_{i=1}^{n} p_i * \log_2(p_i)$$

Entropía

Universidad Católica del Uruguay

- Si un conjunto ***T*** de registros de una base de datos se particiona en *k* clases $\{C_1, C_2, \ldots, C_k\}$ sobre la base de un cierto atributo, entonces la **cantidad media de información necesaria** para identificar la clase de un registro es $E(P_T)$, donde P_T es la distribución de probabilidades de las clases:

$$P_T = \left(\frac{|C_1|}{|T|}, \frac{|C_2|}{|T|}, \ldots, \frac{|C_k|}{|T|} \right)$$

Entropía

- Dado un conjunto **S** con ejemplos positivos y negativos de un concepto objetivo, (problema de **2 clases**) la entropía del conjunto **S** con respecto a esta clasificación binaria es

$$\mathbf{E(S) = - p(\mathit{P})\log_2 p(\mathit{P}) - p(\mathit{N})\log_2 p(\mathit{N})}$$

- La clase C_1 corresponde a *P – positivos-* y la clase C_2 corresponde a *N – negativos - .*

Pregunta: ¿cuál es la entropía del conjunto completo de Jugar Tenis?

ESTADO DEL TIEMPO	TEMPERATURA	HUMEDAD	VIENTO	¿JUGAR?
Cubierto	Caluroso	Alta	suave	SI
Cubierto	Caluroso	Normal	suave	SI
Soleado	Caluroso	Alta	suave	No
Soleado	Caluroso	Alta	fuerte	No
Cubierto	Frio	Normal	fuerte	SI
Lluvioso	Frio	Normal	suave	SI
Lluvioso	Frio	Normal	fuerte	No
Soleado	Frio	Normal	suave	SI
Cubierto	Templado	Alta	fuerte	SI
Lluvioso	Templado	Alta	suave	SI
Lluvioso	Templado	Normal	suave	SI
Lluvioso	Templado	Alta	fuerte	No
Soleado	Templado	Alta	suave	No
Soleado	Templado	Normal	fuerte	SI

a)0.991
b)0.940
c)0.494
d)0.302

Ejemplo

- Para los datos de “Jugar Tenis”, donde *jugar* es el atributo de salida, tenemos para el conjunto de datos completo:

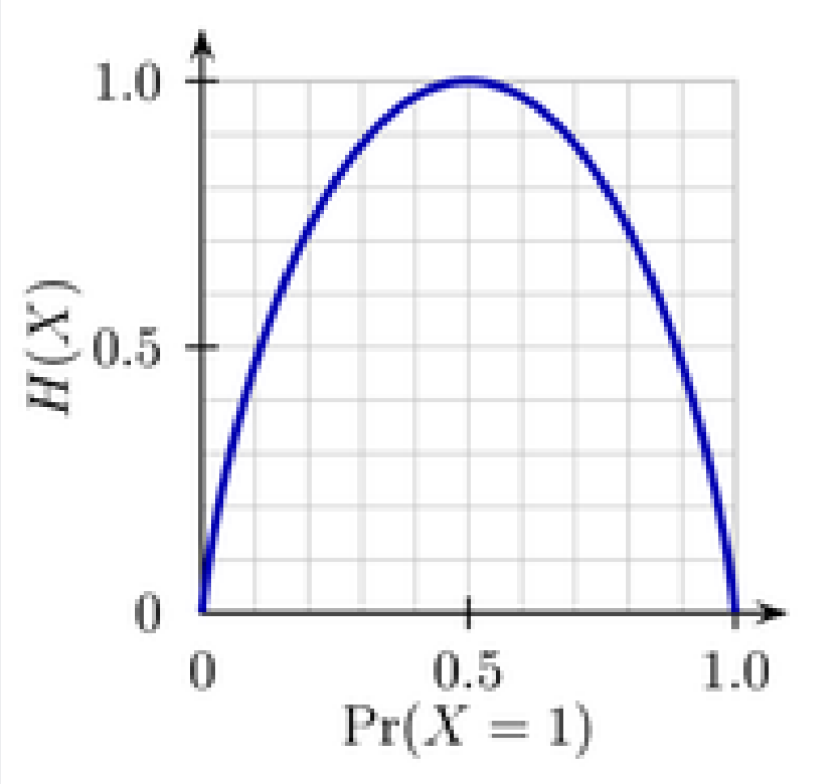
$$P_T = \left(\frac{9}{14}, \frac{5}{14}\right)$$

- Usando la ecuación de la entropía tenemos:

$$\text{E(T)} = \text{E}(P_T) = -\left(\frac{9}{14}\log\left(\frac{9}{14}\right) + \frac{5}{14}\log\left(\frac{5}{14}\right)\right) = 0.94$$

Entropía

- La entropía es 0 si la salida es ya conocida o el mensaje es invariante.
- La entropía es máxima si no tenemos conocimiento alguno sobre el sistema (o si cualquier resultado es igualmente posible)



Entropía de un sistema de clase 2

Ganancia de Información

- La ganancia de información mide la **reducción esperada de la entropía**, o incertidumbre.

$$Gain(S, A) = Entropy(S) - \sum_{v \in Values(A)} \frac{|S_v|}{|S|} Entropy(S_v)$$

- Values(A) es el conjunto de todos los posibles valores del atributo **A** , y $\mathbf{S_v}$ el subconjunto de **S** para el cual el atributo **A** tiene valor **v**

$$\mathbf{S_v = \{s \text{ in } S \mid A(s) = v\}.}$$

- El primer término es entonces solamente la entropía del conjunto **S** original.
- El segundo término es el valor esperado de la entropía luego de particionar **S** utilizando el atributo **A**
- **Elegimos entonces el atributo que mayor ganancia de información brinda**

Ejemplo:

- Calcular la ganancia de información debida a particionar el conjunto de acuerdo al atributo Temperatura
- Temperatura tiene tres valores
  - Frio
  - Templado
  - Caluroso
  - $|T_{Frio}| = 4$, $|T_{Templado}| = 6$, $|T_{Caluroso}| = 4$

$$E(\text{temperatura},T) = \frac{4}{14} E(T_{Frio}) + \frac{6}{14} E(T_{Templado}) + \frac{4}{14} E(T_{Caluroso})$$

Ganancia (temperatura, T) = 0.940 - 0.911

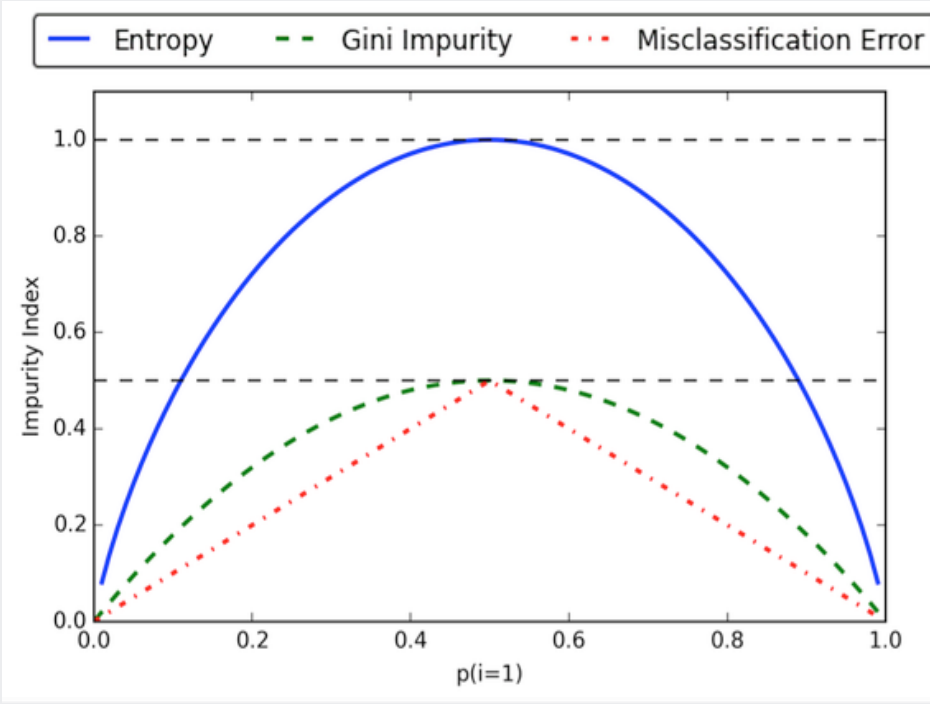
Criterios de “impureza” usados para el split

Cada split trata de hacer el nodo hijo más puro

Gini

Ganancia de información (Entropía)

Error de clasificación



Pre-Pruning – criterios para detener el algoritmo

Universidad Católica del Uruguay

En datasets reales, no es muy probable que obtengamos nodos terminales 100% homogéneos. Necesitamos indicar al algoritmo *cuándo parar:*

- Ningún atributo satisface un umbral de ganancia de información mínimo
- Se ha alcanzado una profundidad máxima
- Hay menos ejemplos que un cierto mínimo en el subárbol actual

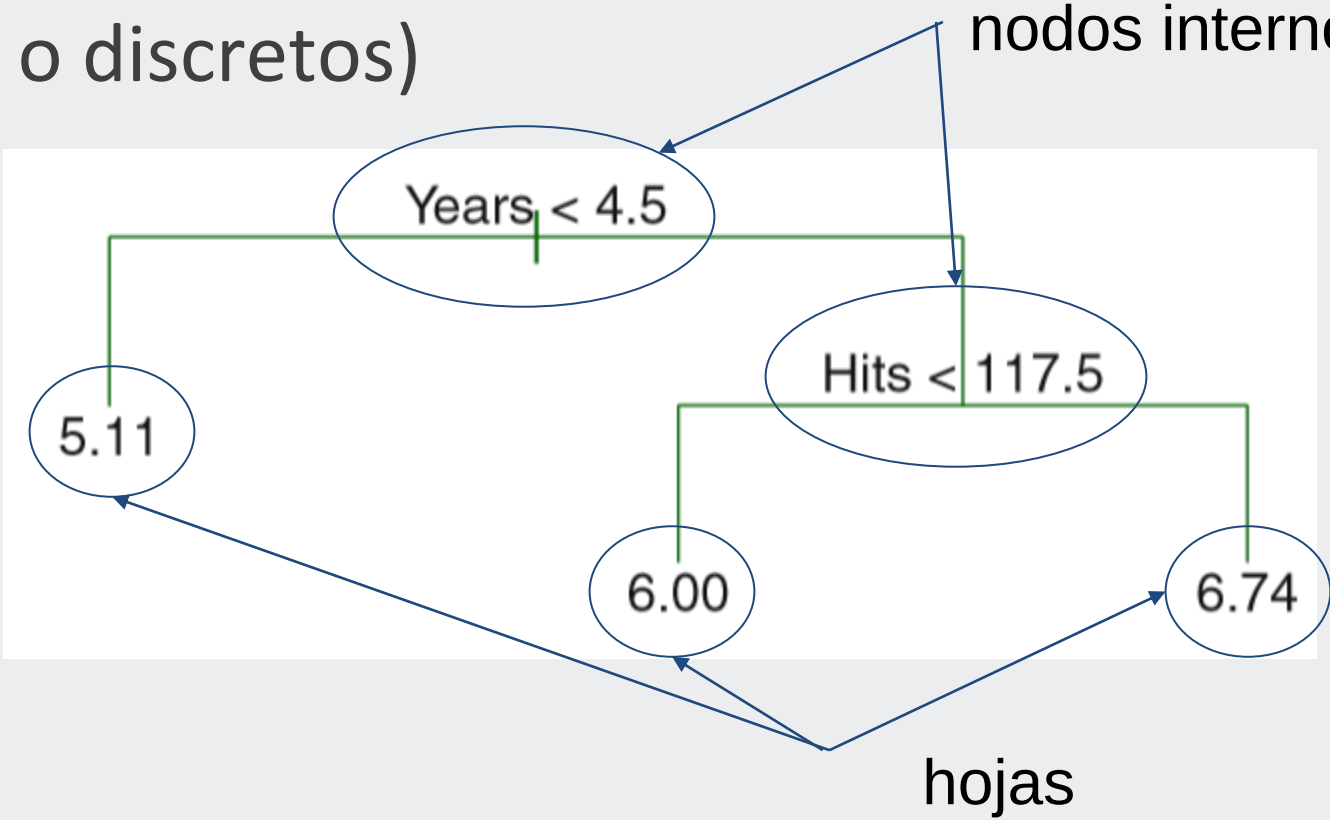
Pruning - poda

- Permitir al árbol crecer hasta el máximo, y *después* podar las ramas que no cambien efectivamente el error de clasificación – *post-pruning*
- A veces puede ser una mejor opción
- Requiere cómputos adicionales

Arboles CART

Árboles de decisión - CART

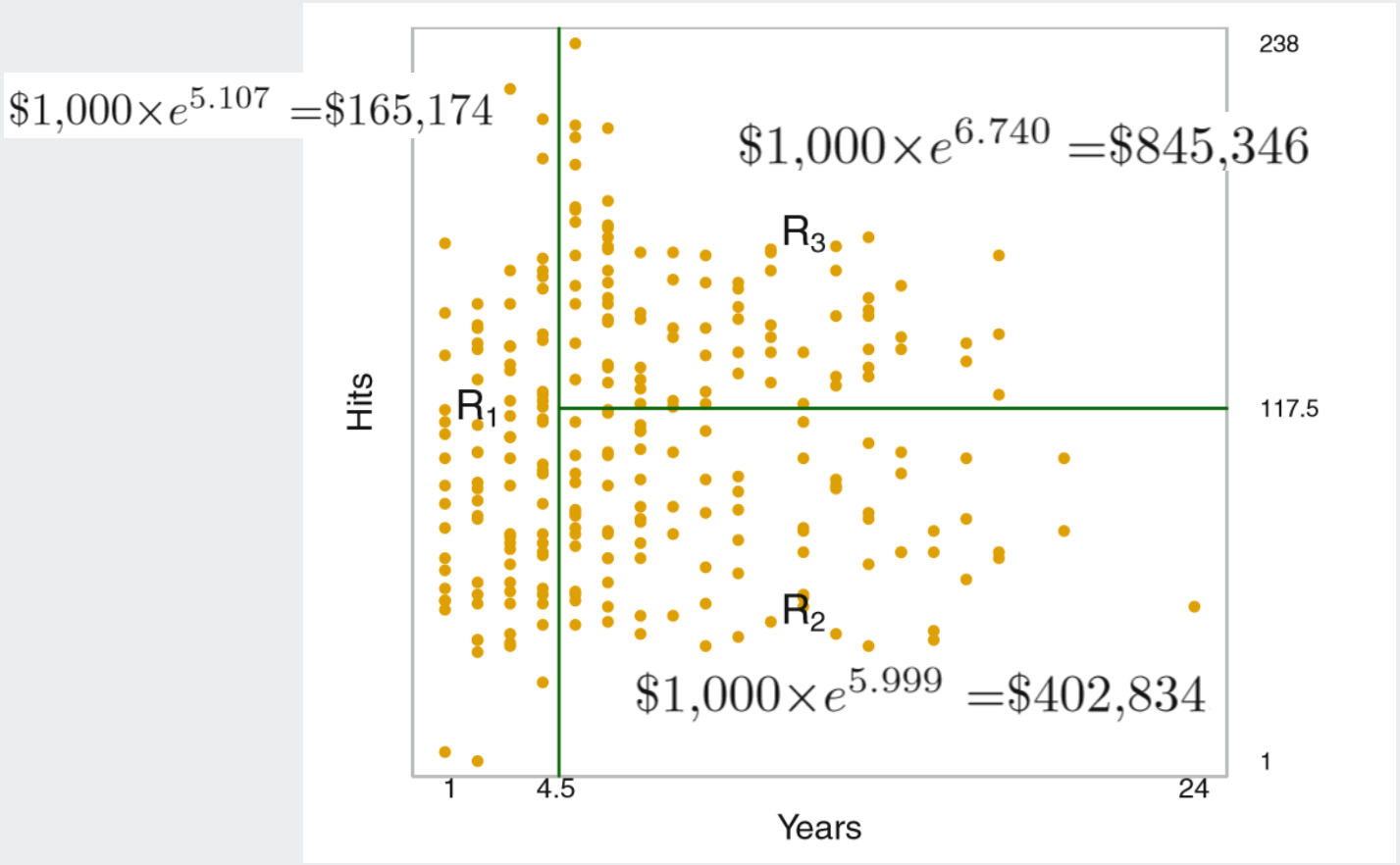
- CART: Classification And Regression Tree
- El modelo de predicción se representa mediante un árbol binario (predictores continuos o discretos)



Ejemplo: predicción del salario de un bateador
Predictores: Años de jugador y hits de la temporada anterior (salario transformado mediante logaritmo, en miles)

Árboles de decisión para regresión

- Segmentación producida en el espacio de predictores:



Árboles de decisión para regresión

Universidad Católica del Uruguay

- En regresión, el valor definido para cada región es el promedio de todos los elementos del entrenamiento que caen en la hoja.
- Ventajas:
  - son sencillos de interpretar
  - provee información intrínseca de cuáles son los predictores más informativos
- Desventajas
  - rendimiento inferior a otros clasificadores
  - muy dependiente de los datos que se usan en el entrenamiento

CART - Árbol de regresión- Construcción

- ¿Cómo determinar las variables y los valores de decisión para los nodos internos?
- Dado el conjunto de datos S, para cada predictor considerar todos los valores de decisión que divida a los datos en S1 y S2 y que minimiza:

$$\text{SSE} = \sum_{i \in S_1} (y_i - \bar{y}_1)^2 + \sum_{i \in S_2} (y_i - \bar{y}_2)^2$$

valor medio de los elementos que caen en S1 y S2 respectivamente

se busca que los valores en S1 y S2 sean lo más homogéneos posible

CART - Árbol de regresión Construcción

Universidad Católica del Uruguay

- El mismo procedimiento es aplicado recursivamente con S1 y S2 hasta que cada subconjunto tenga un tamaño definido (ej: 20 elementos o menos). Este procedimiento es tedioso de aplicar en forma exhaustiva.
- Enfoque tradicional:
  - top-down (comienza por el tope del árbol-todos los elementos pertenecen a la misma región)
  - greedy: el mejor particionamiento se realiza en cada paso (en lugar de ver hacia adelante y elegir un split que mejore el modelo pero en una instancia futura)

CART - Árbol de regresión
Poda

- El procedimiento puede producir árboles que sobreajustan a los datos de entrenamiento
- Solución: dejar crecer el árbol (lo denominamos T_0) y “podarlo”, obteniendo el mejor subárbol posible
  - se puede evaluar cada subárbol candidato mediante cross-validation
  - sin embargo encontrar el subárbol indicado puede ser computacionalmente costoso
  - propuesta: cost–complexity prunning

CART - Árbol de regresión
Cost-complexity prunning

- Se define un parámetro α al cual corresponde un subárbol $T \subset T_0$ tal que:

$$\sum_{m=1}^{|T|} \sum_{i:\, x_i \in R_m} (y_i - \hat{y}_{R_m})^2 + \alpha |T|$$

promedio de los valores de la variable dependiente que caen en el nodo terminal asociado a la región Rm

para cada región (nodo terminal u hoja)

para cada elemento que cae en la región (u hoja) Rm

- $|T|$: cantidad de nodos terminales de T

CART - Árbol de regresión
Cost-complexity prunning - Algoritmo

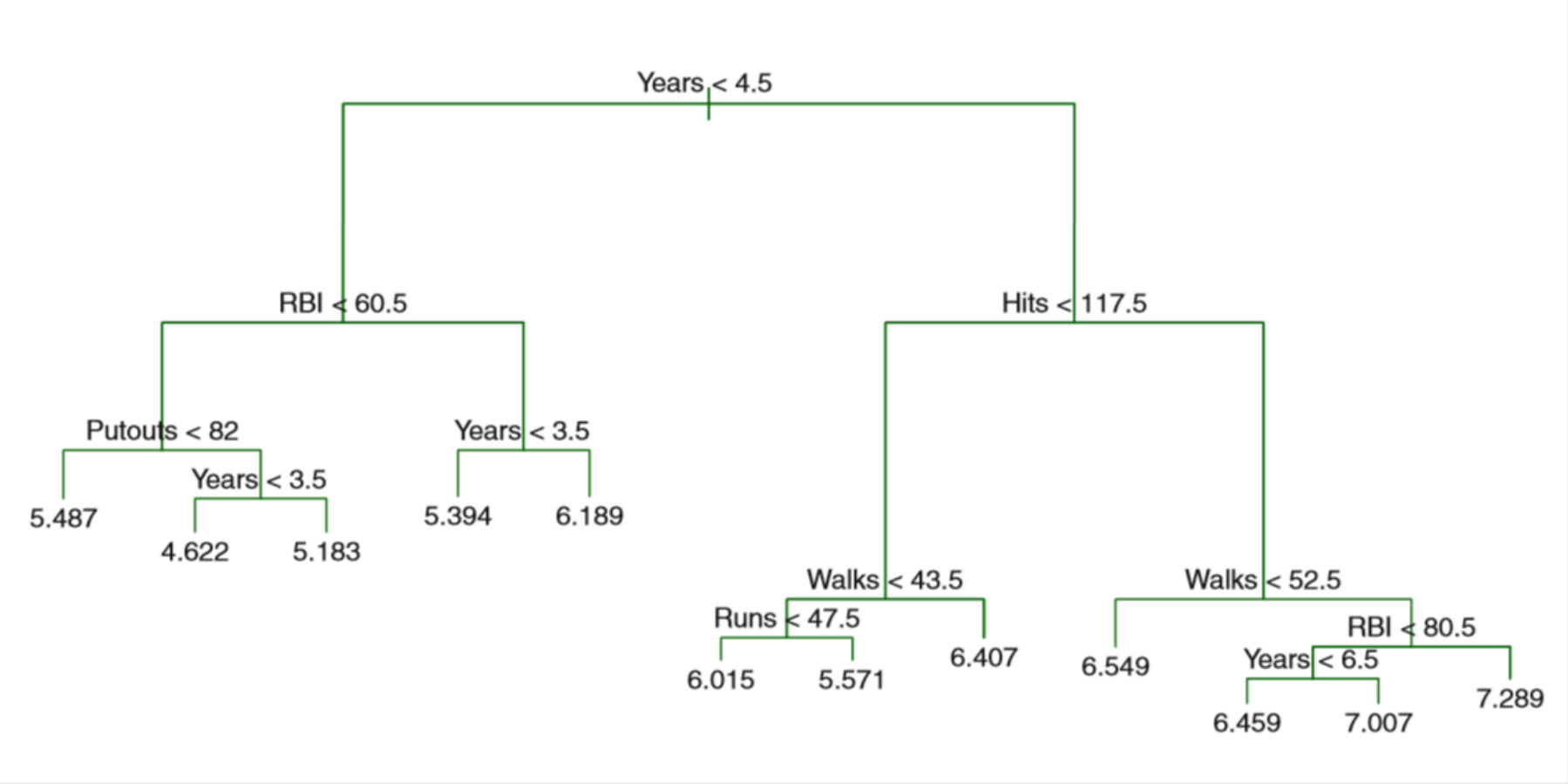
Universidad Católica del Uruguay

1. Desarrollar en forma completa un árbol (T_0)
2. Generar los diferentes subárboles resultantes de podar T_0 a partir de distintos valores de α
3. Para determinar α óptimo usar CV. Para cada k-fold k=1..K:
   a. calcular el cost-complexity prunning sobre el entrenamiento de los k-1 folds
   b. calcular el MSE sobre el k-fold

   Elegir el α asociado al MSE más bajo
4. Retornar el subárbol correspondiente al α óptimo

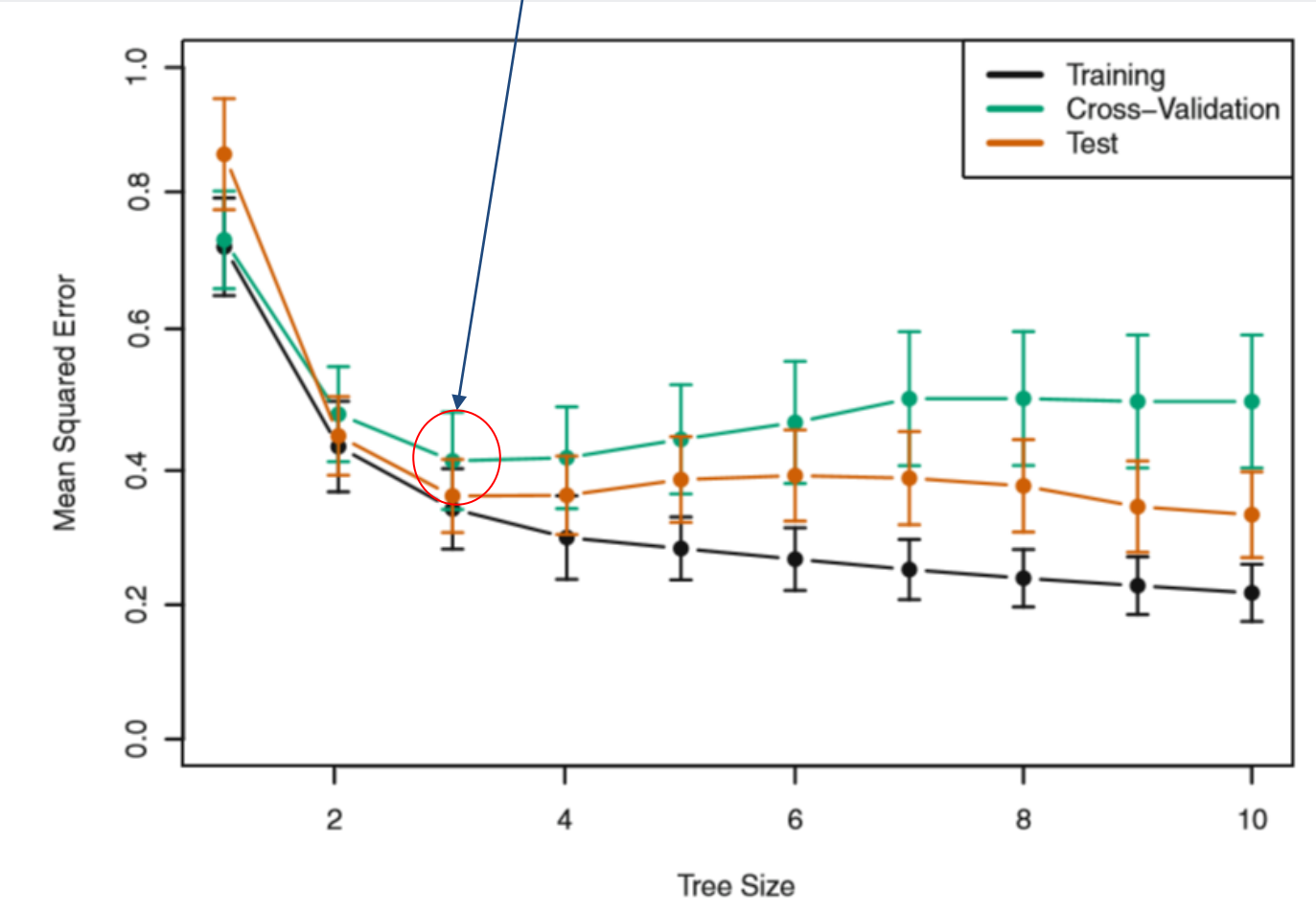
CART - Árbol de regresión
Ejemplo de Poda

- Ejemplo: árbol de bateadores desarrollado en forma completa (9 atributos en dataset original)



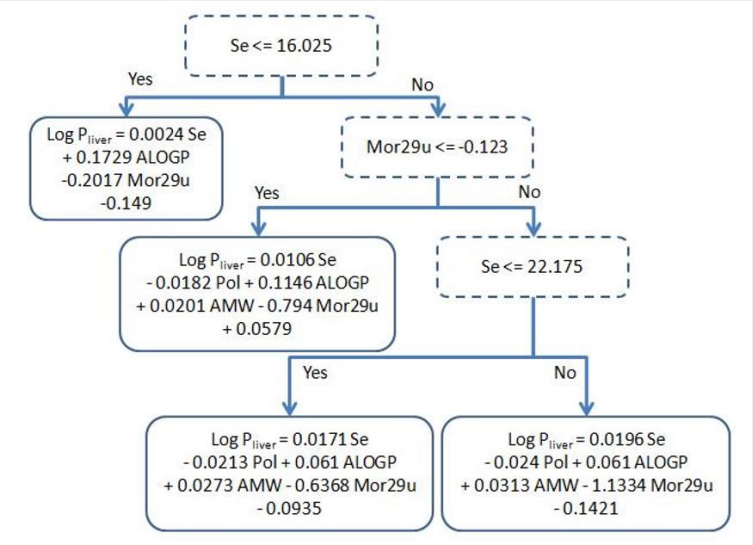
CART - Árbol de regresión
Ejemplo de Poda

- el error mínimo en CV se da podando hasta tener 3 nodos terminales

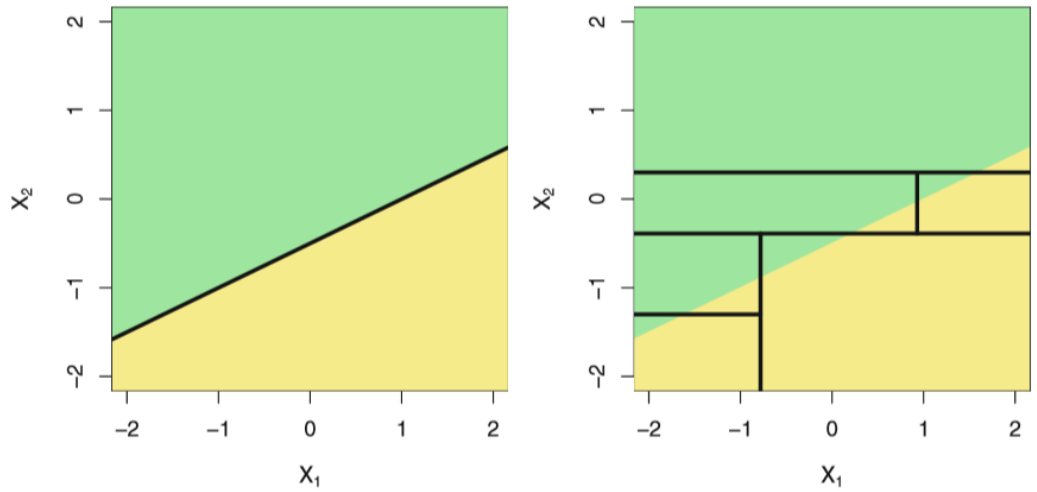


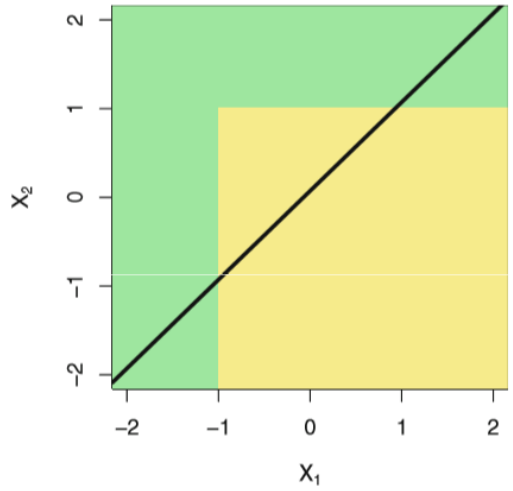
CART - Árbol de regresión

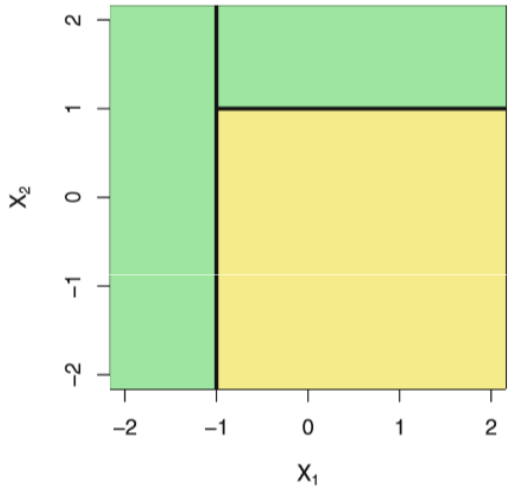
- Un árbol de decisión indica como valor de predicción de una hoja a la media de los valores que caen en ella.
- Cómo mejorarlo?
  - Modelo M5p (prime): en cada hoja realiza una regresión lineal ajustando los coeficientes con las tuplas que corresponden a la misma.



Árboles de decisión - Comparación







Ejemplo: modelos que se ajustan mejor a un problema particular.

CART - Árbol de regresión
Poda

- El parámetro α puede ser elegido mediante cross-validation (CV)
  - elegir el α_i que minimiza CV(α_i) (para diferentes valores de α_i)

- opción: one standard error rule (1SE Rule)
  - elige el subárbol tal que el error en CV está a una distancia de un error standard del árbol óptimo
  - http://www.stat.cmu.edu/~ryantibs/datamining/lectures/19-val2.pdf
  - mejora la generalización