



APRENDIZAJE SUPERVISADO

Tema 5.3 – Otros algoritmos de clasificación

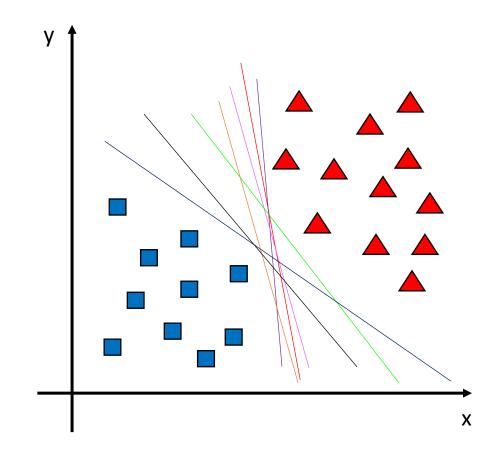


José Gabriel García Pardo josegabriel.garciap@campusviu.es

1. Support Vector Machine (SVM)

2. Bagging – Random Forest

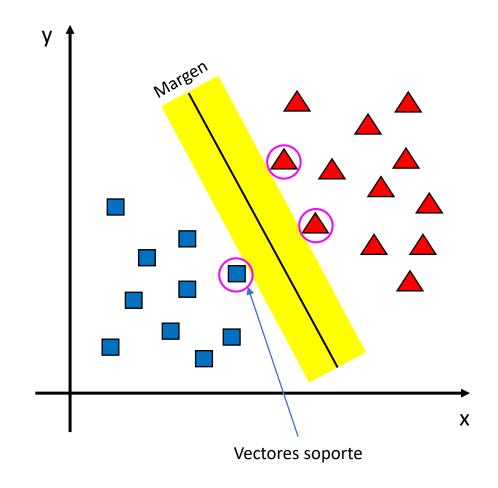
- Las máquinas de vectores soporte (SVM) son clasificadores no paramétricos basados en funciones discriminantes linearles.
- Son clasificadores dicotómicos, ya que se limitan a discriminar entre 2 clase distintas. No obstante, esto no implica que no se puedan abordar problemas multiclase utilizando este tipo de algoritmo.
- Los clasificadores SVM consisten en hallar un hiperplano óptimo capaz de separar el espacio muestral en dos regiones, de manera que cada región pertenezca a una clase.
- Para cada hiperplano se calcula el margen, que se define como la distancia entre el hiperplano y los dos puntos más cercanos de cada clase.
- El **hiperplano óptimo** es aquel que maximiza el margen.
- A los dos puntos más cercanos de cada clase (los que tocan con el límite del margen) se les llama vectores soporte.
- De esta manera, quedan definidos un **hiperplano positivo** y un **hiperplano negativo.**



1. Support Vector Machine (SVM)

2. Bagging – Random Forest

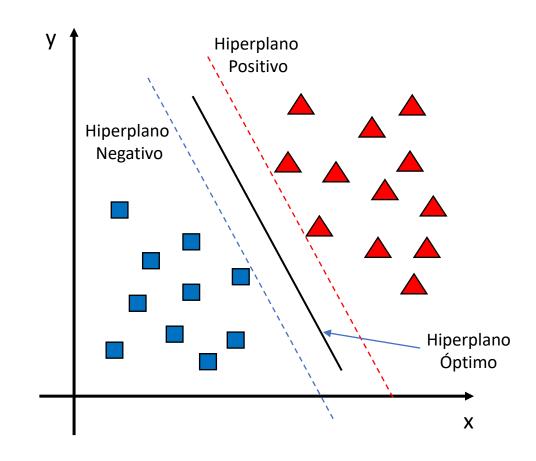
- Las **máquinas de vectores soporte (SVM**) son clasificadores no paramétricos basados en funciones discriminantes linearles.
- Son clasificadores dicotómicos, ya que se limitan a discriminar entre 2 clase distintas. No obstante, esto no implica que no se puedan abordar problemas multiclase utilizando este tipo de algoritmo.
- Los clasificadores SVM consisten en hallar un hiperplano óptimo capaz de separar el espacio muestral en dos regiones, de manera que cada región pertenezca a una clase.
- Para cada hiperplano se calcula el margen, que se define como la distancia entre el hiperplano y los dos puntos más cercanos de cada clase.
- El **hiperplano óptimo** es aquel que maximiza el margen.
- A los dos puntos más cercanos de cada clase (los que tocan con el límite del margen) se les llama vectores soporte.
- De esta manera, quedan definidos un hiperplano positivo y un hiperplano negativo.



1. Support Vector Machine (SVM)

2. Bagging – Random Forest

- Las **máquinas de vectores soporte (SVM)** son clasificadores no paramétricos basados en funciones discriminantes linearles.
- Son clasificadores dicotómicos, ya que se limitan a discriminar entre 2 clase distintas. No obstante, esto no implica que no se puedan abordar problemas multiclase utilizando este tipo de algoritmo.
- Los clasificadores SVM consisten en hallar un hiperplano óptimo capaz de separar el espacio muestral en dos regiones, de manera que cada región pertenezca a una clase.
- Para cada hiperplano se calcula el margen, que se define como la distancia entre el hiperplano y los dos puntos más cercanos de cada clase.
- El **hiperplano óptimo** es aquel que maximiza el margen.
- A los dos puntos más cercanos de cada clase (los que tocan con el límite del margen) se les llama vectores soporte.
- De esta manera, quedan definidos un hiperplano positivo y un hiperplano negativo.



1. Support Vector Machine (SVM)

2. Bagging – Random Forest

3. Boosting - Adaboost

- Se obtiene el coeficiente *w*, que es un vector perpendicular a la frontera de decisión definida por cada hiperplano.
- Para que el margen sea el máximo posible, medimos la distancia entre los vectores soporte de cada hiperplano calculado.

$$margen = (x_{+} - x_{-}) \cdot \frac{\overrightarrow{w}}{||w||}$$

Esto se reduce a:

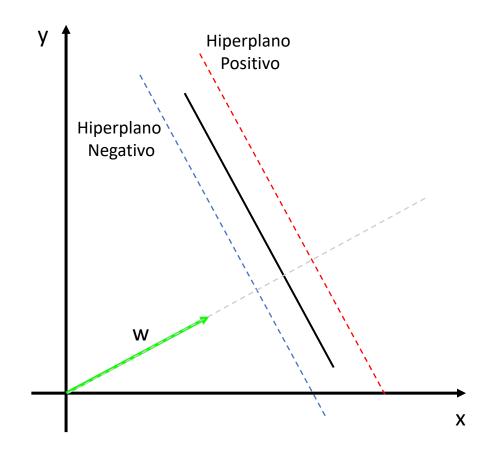
$$margen = \frac{2}{||\vec{w}||}$$

- Por tanto, para obtener el hiperplano óptimo, el objetivo es minimizar ||w|| para que el margen sea el máximo posible.
- No obstante, esto esta sujeto a la siguiente condición, que se cumple para todo $1 \le i \le n$:

$$y_i(w \cdot x_i + b) \ge 1$$

Para los puntos en el borde:

$$y_i(w \cdot x_i + b) - 1 = 0$$



1. Support Vector Machine (SVM)

2. Bagging – Random Forest

3. Boosting - Adaboost

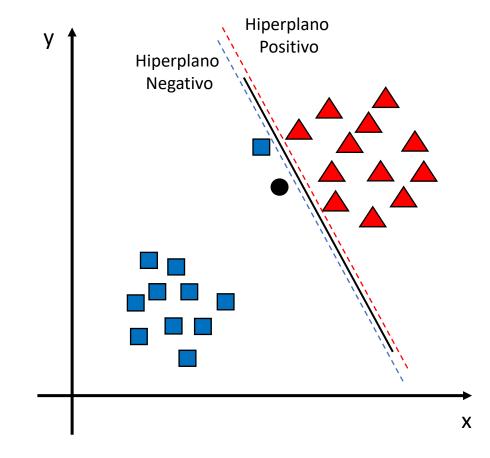
- En casos más complejos, el algoritmo SVM introduce una variable de holgura capaz de minimizar los errores de predicción, permitiendo cometer errores de clasificación durante el entrenamiento.
- De esta manera, la optimización del margen sería:

$$\frac{1}{2}||\vec{w}||^2 + C\sum_{i=1}^N \varsigma_i, \qquad con \ \varsigma_i \ge 0$$

Aquí, *C* es un hiperparámetro de regularización que controla la compensación entre la penalización de las clasificaciones erróneas (teniendo en cuenta las variables de holgura) y el ancho del margen.

- Como se puede observar, valores pequeños de *C* permiten que los errores de clasificación tengan menos peso, mientras que valores grandes de *C* le dan más peso a los errores.
- Ahora, la optimización del margen queda sujeta a la siguiente condición:

$$y_i(w \cdot x_i + b) \ge 1 - \varsigma_i$$



1. Support Vector Machine (SVM)

2. Bagging – Random Forest

3. Boosting - Adaboost

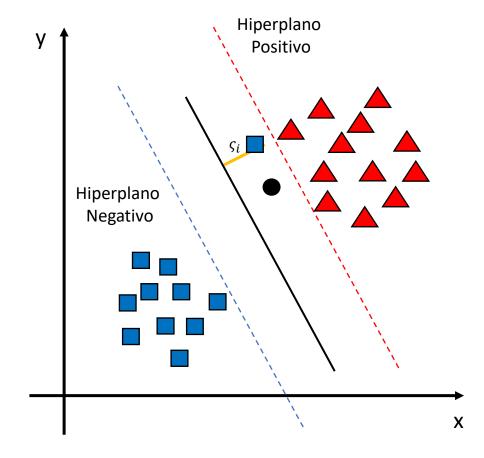
- En casos más complejos, el algoritmo SVM introduce una variable de holgura capaz de minimizar los errores de predicción, permitiendo cometer errores de clasificación durante el entrenamiento.
- De esta manera, la optimización del margen sería:

$$\frac{1}{2}||\vec{w}||^2 + C\sum_{i=1}^N \varsigma_i, \qquad con \ \varsigma_i \ge 0$$

Aquí, *C* es un hiperparámetro de regularización que controla la compensación entre la penalización de las clasificaciones erróneas (teniendo en cuenta las variables de holgura) y el ancho del margen.

- Como se puede observar, valores pequeños de *C* permiten que los errores de clasificación tengan menos peso, mientras que valores grandes de *C* le dan más peso a los errores.
- Ahora, la optimización del margen queda sujeta a la siguiente condición:

$$y_i(w \cdot x_i + b) \ge 1 - \varsigma_i$$



1. Support Vector Machine (SVM)

2. Bagging – Random Forest

3. Boosting - Adaboost

- Cuando los datos no son linealmente separables puede aplicarse el kernel trick usando una función kernel (cuadrático, gaussiano, etc.).
- El *kernel trick* permite **proyectar un espacio muestral** *D*-dimensional a otro espacio *M*-dimensional, donde M>D

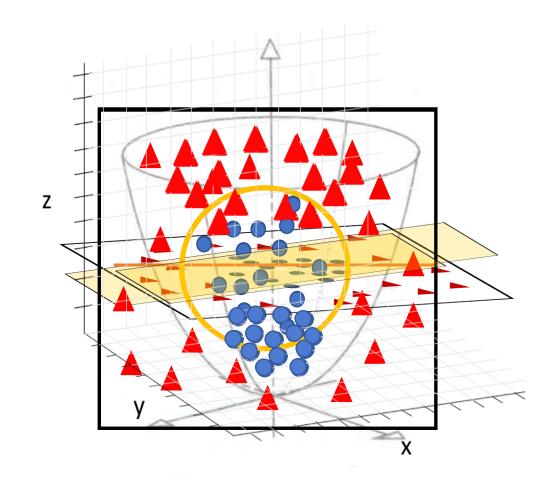
$$\phi \colon \mathbb{R}^D \to \mathbb{R}^M$$

- Esto permite **separar de manera lineal** aquellos datos que, originalmente, no eran linealmente separables.
- En este nuevo escenario, la optimización del margen es la misma que en el caso anterior:

$$\frac{1}{2}||\vec{w}||^2 + C\sum_{i=1}^N \varsigma_i, \qquad con \ \varsigma_i \ge 0$$

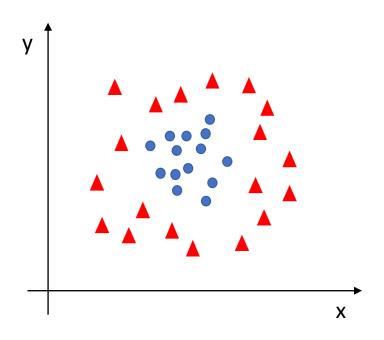
Sin embargo, ahora está sujeto a la siguiente condición:

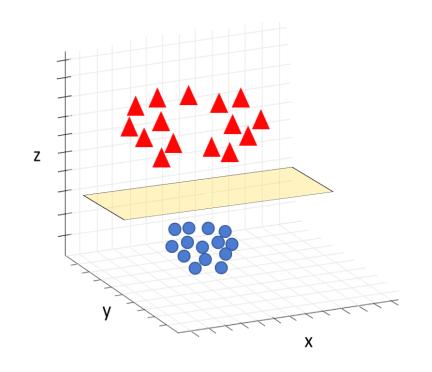
$$y_i(w \cdot \phi(x_i) + b) \ge 1 - \varsigma_i$$

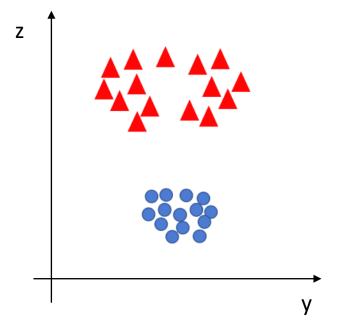


1. Support Vector Machine (SVM)

2. Bagging – Random Forest







1. Support Vector Machine (SVM)

2. Bagging – Random Forest

3. Boosting - Adaboost

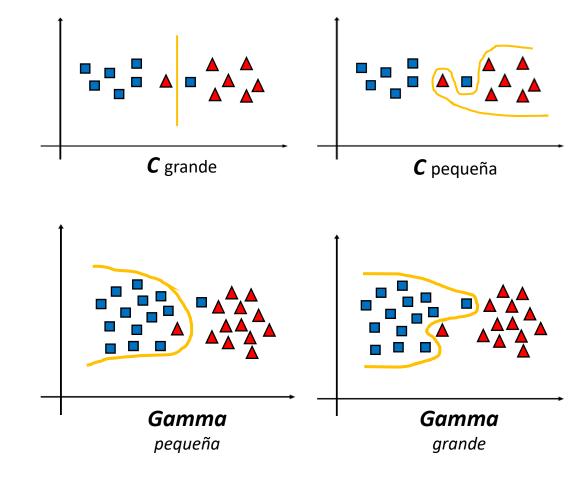
HIPERPARÁMETROS

 $C \rightarrow$ parámetro de regularización que controla la compensación entre la penalización de las clasificaciones erróneas (teniendo en cuenta las variables de holgura) y el ancho del margen. Se dice que **menor C implica un menor error** y **mayor C, un mayor error.** Sin embargo, esto no implica que el modelo obtenido sea mejor con una C menor (ver ejemplo). Normalmente se usan valores en el rango de $C \in [0.01, 100]$

Gamma → el parámetro gamma se utiliza con la función RBF (radial basiss function) de kernel gaussiano. Si se utiliza un kernel lineal o uno polinomial, no es necesario utilizar gamma, únicamente C. El parámetro gamma permite definir el grado de curvatura de la frontera de decisión de manera que, a mayor gamma, mayor curvatura. Normalmente se usan valores en el rango de $gamma \in [0.01, 100]$

$$\gamma = \frac{1}{2\sigma^2}$$

Gaussian RBF = $e^{-\gamma \cdot ||x-x'||}$

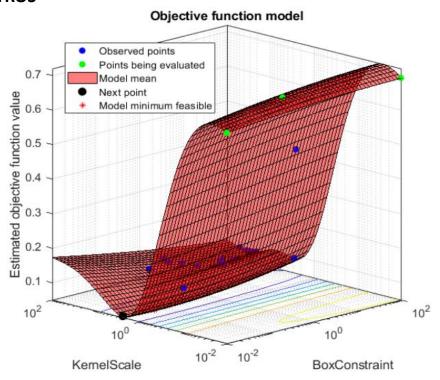


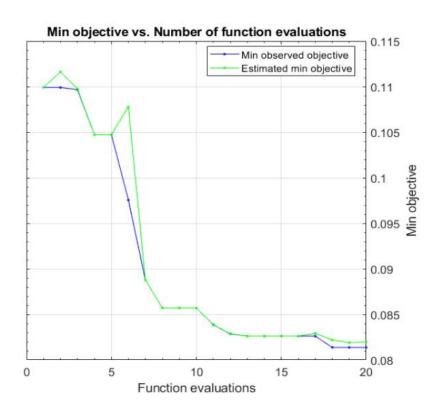
1. Support Vector Machine (SVM)

2. Bagging – Random Forest

3. Boosting - Adaboost

HIPERPARÁMETROS





https://www.mdpi.com/1099-4300/21/4/356

1. Support Vector Machine (SVM)

2. Bagging – Random Forest

3. Boosting - Adaboost

VENTAJAS

- El clasificador SVM utiliza un método de optimización convexa (convex optimization) que garantiza una convergencia a un mínimo global y no a un mínimo local.
- El algoritmo SVM es adecuado tanto para problemas lineales como no lineales usando el kernel trick.
- Modelos basados en SVM funcionan bien independientemente de la dimensionalidad del espacio de características.
- SVM funciona de manera eficaz en conjuntos de datos pequeños, ya que su rendimiento no está supeditado al uso de todos los datos.

INCONVENIENTES

- SVM no es adecuado para conjuntos de datos muy grandes ya que presentan un coste computacional elevado.
- SVM es menos efectivo en conjuntos de datos más ruidosos, cuando existen clases superpuestas.

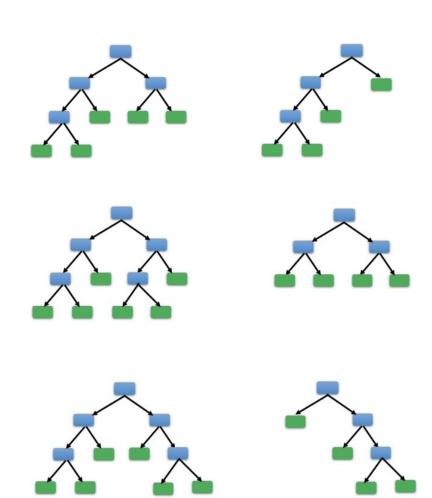
1. Support Vector Machine (SVM)

2. Bagging – Random Forest

3. Boosting - Adaboost

BAGGING – Bootstrap aggregating

- Es una técnica de clasificación que consiste en dividir el conjunto de entrenamiento en varios subconjuntos con repetición (boostrapped datasets).
- Se entrenan tantos clasificadores como subconjuntos haya.
- La clasificación final se obtiene promediando los resultados de todos los clasificadores.
- Esta técnica permite reducir la varianza y minimizar el overfitting.
- Se puede usar cualquier clasificador, pero los más utilizados son los árboles de decisión.
- El **método más conocido** dentro de las **técnicas de** *bagging* es el llamado *random forest.*



1. Support Vector Machine (SVM)

2. Bagging – Random Forest

3. Boosting - Adaboost

BAGGING - Bootstrap aggregating

- El algoritmo *RANDOM FOREST* no solo utiliza el concepto de *bagging* al utilizar **distintos subconjuntos de datos**, sino que también **utiliza distinto número de características** en cada clasificador. De esta manera, se realiza un *feature selection* de forma **automática**.
- El método *random forest* se basa en el uso de *weak learners* (clasificadores con al menos un 51% de éxito) para construir el *strong learner*.

Paso 1 – Crear un bootstrapped dataset

Id	SepalLengthCm	SepalWidthCm	PetalLengthCm	PetalWidthCm	Species
1	5.1	3.5	1.4	0.2	Iris-setosa
2	4.9	3	1.4	0.2	Iris-setosa
3	4.7	3.2	1.3	0.2	Iris-setosa
4	4.6	3.1	1.5	0.2	Iris-setosa
5	5	3.6	1.4	0.2	Iris-setosa
6	5.4	3.9	1.7	0.4	Iris-setosa
7	4.6	3.4	1.4	0.3	Iris-setosa
8	5	3.4	1.5	0.2	Iris-setosa
9	4.4	2.9	1.4	0.2	Iris-setosa
10	4.9	3.1	1.5	0.1	Iris-setosa
11	5.4	3.7	1.5	0.2	Iris-setosa
12	4.8	3.4	1.6	0.2	Iris-setosa
13	4.8	3	1.4	0.1	Iris-setosa
14	4.3	3	1.1	0.1	Iris-setosa
15	5.8	4	1.2	0.2	Iris-setosa
16	5.7	4.4	1.5	0.4	Iris-setosa
17	5.4	3.9	1.3	0.4	Iris-setosa
18	5.1	3.5	1.4	0.3	Iris-setosa
19	5.7	3.8	1.7	0.3	Iris-setosa

Bootstrapped dataset

Id	SepalLengthCm	SepalWidthCm	PetalLengthCm	PetalWidthCm	Species
2	4.9	3	1.4	0.2	Iris-setosa
6	5.4	3.9	1.7	0.4	Iris-setosa
9	4.4	2.9	1.4	0.2	Iris-setosa
11	5.4	3.7	1.5	0.2	Iris-setosa
18	5.1	3.5	1.4	0.3	Iris-setosa

1. Support Vector Machine (SVM)

2. Bagging – Random Forest

3. Boosting - Adaboost

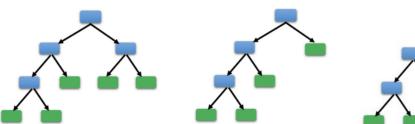
BAGGING – Bootstrap aggregating

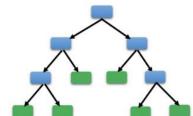
Paso 2 – Considerar solo un subconjunto de variables en cada etapa

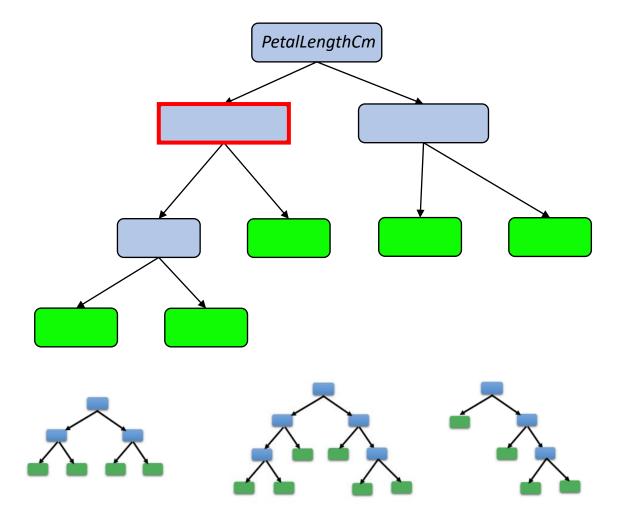
Bootstrapped dataset

Id	SepalLengthCm	SepalWidthCm	PetalLengthCm	PetalWidthCm	Species
2	4.9	3	1.4	0.2	Iris-setosa
6	5.4	3.9	1.7	0.4	Iris-setosa
9	4.4	2.9	1.4	0.2	Iris-setosa
11	5.4	3.7	1.5	0.2	Iris-setosa
18	5.1	3.5	1.4	0.3	Iris-setosa

Paso 3 – Repetir pasos 1 y 2 muchas veces







1. Support Vector Machine (SVM)

2. Bagging – Random Forest

3. Boosting - Adaboost

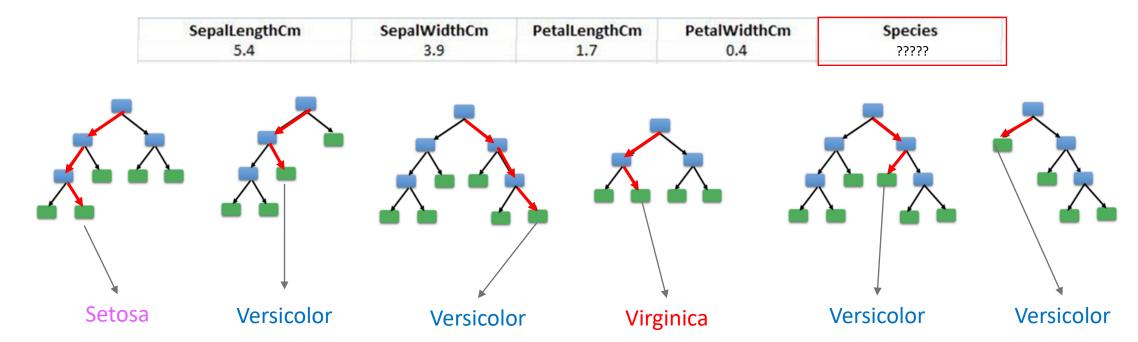
BAGGING - Bootstrap aggregating

Setosa	Versicolor	Virginica
1	4	1



Paso 4 – Predicción de un nuevo registro

Se aplica una técnica de majority voting teniendo en cuenta todos los árboles construidos para determinar la predicción final.



1. Support Vector Machine (SVM)

2. Bagging – Random Forest

3. Boosting - Adaboost

BAGGING - Bootstrap aggregating

• **VENTAJAS**:

- Eficiente sin ajustar hiperparámetros en problemas de clasificación y regresión
- Estabilidad y robustez en la predicción, ya que al utilizar muchos árboles prevalece el promedio de las votaciones.
- Posibilidad de utilizar gran cantidad de características
- Tiende a reducir el riesgo de overfitting.

INCONVENIENTES

- Coste computacional más elevado que construir un solo árbol de decisión.
- Inconsistencia cuando se utilizan datasets pequeños.
- Difícil interpretabilidad.

https://scikit-learn.org/stable/modules/generated/sklearn.ensemble.RandomForestClassifier.html

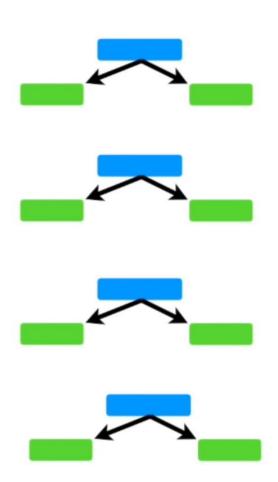
1. Support Vector Machine (SVM)

2. Bagging – Random Forest

3. Boosting - Adaboost

BOOSTING

- Es una **técnica de clasificación** similar al método *bagging,* pero el **entrenamiento** se lleva a cabo **en serie**, en lugar de en paralelo.
- El algoritmo se entrena de manera iterativa dando más peso en cada iteración al error cometido durante la iteración anterior.
- La clasificación final se obtiene promediando los resultados de todos los clasificadores de manera ponderada, a diferencia del método bagging.
- Esta técnica permite reducir la varianza y el sesgo (bias).
- Se puede usar cualquier clasificador, pero los más utilizados son los árboles de decisión.
- El método más conocido dentro de las técnicas de boosting es el llamado Adaboost.



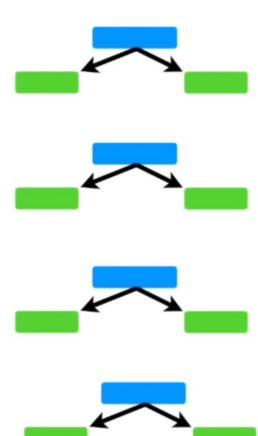
1. Support Vector Machine (SVM)

2. Bagging – Random Forest

3. Boosting - Adaboost

BOOSTING - ADABOOST

- A diferencia del algoritmo *RandomForest*, que crea árboles de diferentes tamaños, en el algoritmo *Adaboost* solo se crean árboles compuestos por un solo nodo (cuadro azul) y dos hojas (cuadros verdes), lo que se denomina stump. De esta manera, se crea lo que se conoce como *Forest of Stumps*. Los *stumps* no son buenos clasificadores por sí solos, por eso **son weak learners.**
- En el algoritmo RandomForest todos los árboles contribuían equitativamente en la predicción final, mientras que **Adaboost** aplica la técnica de **majority voting** de manera ponderada, por lo que algunos árboles contribuyen más que otros en la decisión final.
- A diferencia del algoritmo RandomForest, donde cada árbol proporcionaba una predicción independiente, en *Adaboost* la metodología es secuencial. Es decir, el **error** cometido en uno de los stumps repercute en el comportamiento del siguiente.





1. Support Vector Machine (SVM)

2. Bagging – Random Forest

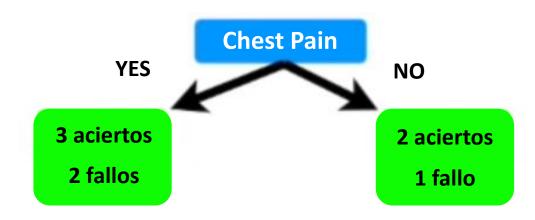
3. Boosting - Adaboost

BOOSTING - ADABOOST

Intentamos predecir si el paciente tendrá una enfermedad cardiaca o no, es decir, un problema de clasificación binario. Para eso, se tienen en cuenta 3 atributos (dolor de pecho, bloqueo de arterias y peso del paciente).

En una primera iteración, todas las instancias tienen la misma ponderación. Como hay 8 instancias en nuestro dataset, cada instancia tiene una importancia de 1/8.

El primer stump se constuiría analizando el valor que toma el primer atributo, en este caso *Chest Pain* (dolor de pecho).



Chest Pain	Blocked Arteries		Heart Disease		Sampl Weigh
Yes	Yes	205	Yes		1/8
No	Yes	180	Yes		1/8
Yes	No	210	Yes		1/8
Yes	Yes	167	Yes		1/8
No	Yes	156	No		1/8
No	Yes	125	No		1/8
Yes	No	168	No	_	1/8
Yes	Yes	172	No		1/8

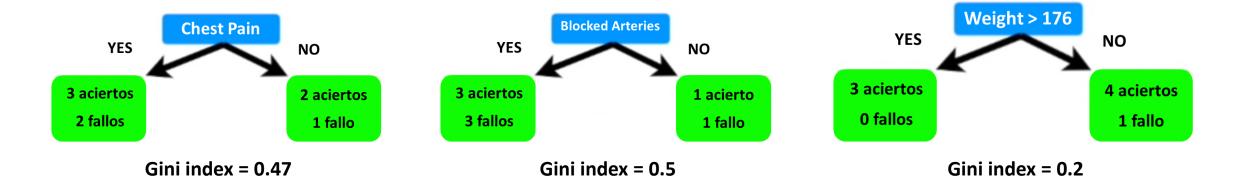
1. Support Vector Machine (SVM)

2. Bagging – Random Forest

3. Boosting - Adaboost

BOOSTING - ADABOOST

Se repite el mismo procedimiento para todas las variables y se calcula el índice de Gini para cada uno de los stumps.



El stump que tenga un menor índice de Gini será el primer stump del Forest of Stumps. En este caso, el stump "weight>176".

Para ponderar cada stump y determinar cómo de importante es cada uno en la predicción de la clase, se utiliza la siguiente ecuación:

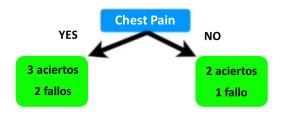
Importancia =
$$\frac{1}{2} \log(1 - \text{Total Error})$$
 siendo el error total igual al número de fallos cometidos entre el total de los registros

1. Support Vector Machine (SVM)

2. Bagging – Random Forest

3. Boosting - Adaboost

BOOSTING - ADABOOST

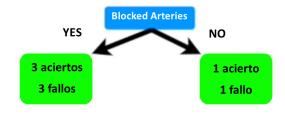




$$E_T = \frac{3}{8} = 0.375$$



$$E_T = \frac{3}{8} = 0.375$$
 \implies $Importancia = \frac{1}{2} log \left(\frac{1 - 0.375}{0.375} \right) = 0.255$





$$E_T = \frac{4}{8} = 0.5$$



$$\Rightarrow E_T = \frac{4}{8} = 0.5 \qquad \Rightarrow Importancia = \frac{1}{2} \log \left(\frac{1 - 0.5}{0.5} \right) = 0$$





$$E_T = \frac{1}{8} = 0.125$$



$$E_T = \frac{1}{8} = 0.125$$
 \implies $Importancia = \frac{1}{2} \log \left(\frac{1 - 0.125}{0.125} \right) = 0.973$

1. Support Vector Machine (SVM)

2. Bagging – Random Forest

3. Boosting - Adaboost

BOOSTING - ADABOOST

Para ponderar el algoritmo de manera que se le otorgue mayor peso al error cometido que a los aciertos se aplica el siguiente algoritmo:

En los registros donde se cometen errores:

$$weight_{t+1} = weigth_t \cdot e^{importancia}$$

En los registros donde no se cometen errores:

$$weight_{t+1} = weigth_t \cdot e^{-importancia}$$

En el caso que estamos viendo, sería:

$$weight_2 = \frac{1}{8} \cdot e^{0.97} = 0.33$$
, para el caso incorrecto

$$weight_2 = \frac{1}{8} \cdot e^{-0.97} = 0.05$$
, para los casos correctos

		Patient Weight	Heart Disease
		205	Yes
		180	Yes
	No	210	Yes
	Yes	167	Yes
	Yes	156	No
		125	No
		168	No
Yes	Yes	172	No

Sample Weight	New Weight
1/8	0.05
1/8	0.05
1/8	0.05
1/8	0.33
1/8	0.05
1/8	0.05
1/8	0.05
1/8	0.05

1. Support Vector Machine (SVM)

2. Bagging – Random Forest

3. Boosting - Adaboost

BOOSTING - ADABOOST

Para normalizar los pesos, se divide cada valor entre el sumatorio de los "new weights" para dar lugar a la nueva columna "norm weight". De esta manera, los pesos normalizados constituirán el nuevo "sample weight" que se utilizará para construir el siguiente stump.

Para construir el siguiente stump, se define un conjunto de datos vacío de las mismas dimensiones que el original. Después, se selecciona aleatoriamente un valor entre 0 y 1, y se añade el registro correspondiente en función de la suma ponderada de la columna de sample weight. Por ejemplo, si el valor aleatorio es 0.13, se añadirá al nuevo dataset el registro 2.

Chest Pain	Blocked Arteries	Patient Weight	Heart Disease	Sample Weight
Yes	Yes	205	Yes	0.07
No	Yes	180	Yes	0.07
Yes	No	210	Yes	0.07
Yes	Yes	167	Yes	0.49
No	Yes	156	No	0.07
No	Yes	125	No	0.07
Yes	No	168	No	0.07
Yes	Yes	172	No	0.07

0 - 0.07	
0.07 - 0.14	
0.14 - 0.21	
0.21 – 0.70	
0.70 - 0.77	
0.77 - 0.84	
0.84 – 0.91	
0.91 - 1	

Finalmente, se obtiene un nuevo dataset donde aparece, con una frecuencia mayor, los registros predichos de manera errónea durante el paso anterior.

A partir de aquí, se repiten todos los pasos y, de esta manera, el error cometido por un stump repercute en la construcción del siguiente stump.

Chest Pain	Blocked Arteries	Patient Weight	Heart Disease
No	Yes	156	No
Yes	Yes	167	Yes
No	Yes	125	No
Yes	Yes	167	Yes
Yes	Yes	167	Yes
Yes	Yes	172	No
Yes	Yes	205	Yes
Yes	Yes	167	Yes

New Weight	Norm Weigh
0.05	0.07
0.05	0.07
0.05	0.07
0.33	0.49
0.05	0.07
0.05	0.07
0.05	0.07
0.05	0.07

eight

1. Support Vector Machine (SVM)

2. Bagging – Random Forest

3. Boosting - Adaboost

Boosting – Adaboost

VENTAJAS:

- Fácil implementación.
- Permite corregir errores de manera iterativa usando weak classifiers.
- Mejora el rendimiento combinando weak learners.
- No produce overfitting.

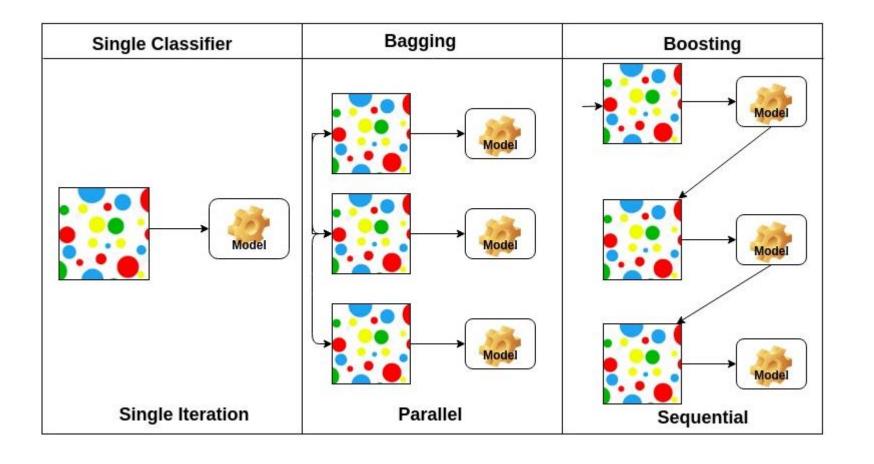
INCONVENIENTES

- Es sensible a datos ruidosos.
- Es poco robusto frente a outliers
- Es computacionalmente menos eficiente que otros algoritmos debido a su entrenamiento iterativo.

https://scikit-learn.org/stable/modules/generated/sklearn.ensemble.AdaBoostClassifier.html

1. Support Vector Machine (SVM)

2. Bagging – Random Forest







APRENDIZAJE SUPERVISADO

Tema 5.3 – Otros algoritmos de clasificación



José Gabriel García Pardo josegabriel.garciap@campusviu.es