# Clasificación – Conceptos Básicos y Técnicas

IDM - 2021

### Clasificación: Definición

- Dada una colección de registros (conjunto de entrenamiento)
  - Cada registro esta caracterizado por una tupla (x,y), donde x es el conjunto de atributos e y es la etiqueta de clase
    - $\bullet$  x: atributo, predictor, variable independiente, entrada
    - ◆ y: clase, respuesta, variable dependiente, salida

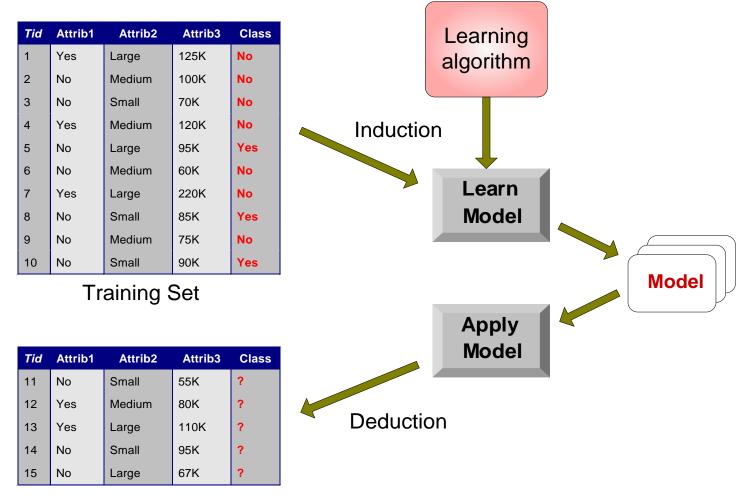
#### ? Tarea:

- **Aprender** un modelo que mapea cada conjunto de atributos x en una de las etiquetas predefinidas de clase y

### Ejemplos de Tareas de Clasificación

Tarea	Conjunto de Atributos, <b>x</b>	Etiqueta de Clase, y
Categorizar correos electrónicos	Features extraídas del correo electrónico (encabezado y contenido)	spam o no-spam
Identificar celulas tumorales	Features extraídas de escaneos MRI	Células malignas o benignas
Catalogar Galaxias	Features extraidas de imagenes obtenidas por telescopios	Elípticas, espirales, o galaxias irregulares.

#### Aproximación General a la construcción de un Modelo de Clasificación



Test Set

### **Tecnicas de Clasificacion**

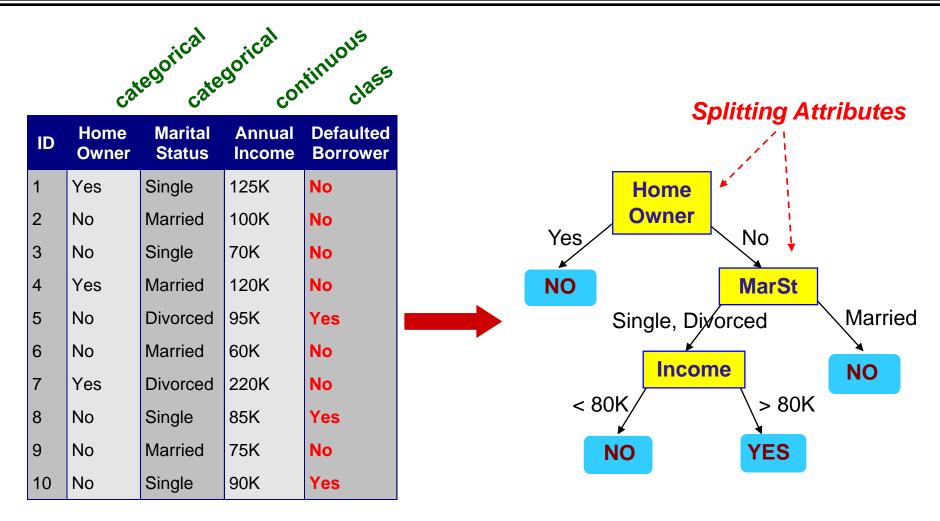
- Clasificadores Base
  - Métodos basados en Arboles de Decisión
  - Métodos Basados en Reglas
  - Vecino Mas cercano
  - Redes Neuronales
  - Deep Learning
  - Naïve Bayes y Redes de Creencias Bayesianas
  - Support Vector Machines (Maquinas de Soporte Vectorial)
- □ Clasificadores en Conjunto (Ensemble Classifiers)
  - Boosting, Bagging, Random Forests

Matriz de Confusión para un		Clase P	redicha
problema de 2	problema de 2 clases		clase = 0
Clase Conocida	clase = 1	f <sub>11</sub>	f <sub>10</sub>
	clase = 0		f <sub>00</sub>

$$Accuracy = \frac{\# \ de \ Predicciones \ Correctas}{\# \ de \ Predicciones} = \frac{f_{11} + f_{10}}{f_{11} + f_{10} + f_{01} + f_{00}}$$

$$Tasa\ de\ error = \frac{\#\ de\ Predicciones\ Incorrectas}{\#\ de\ Predicciones} = \frac{f_{10} + f_{01}}{f_{11} + f_{10} + f_{01} + f_{00}}$$

# Ejemplo de un Árbol de Decisión



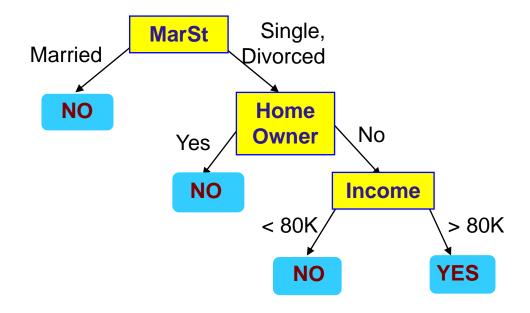
**Training Data** 

**Model: Decision Tree** 

## Otro Ejemplo de un Árbol de Decisión

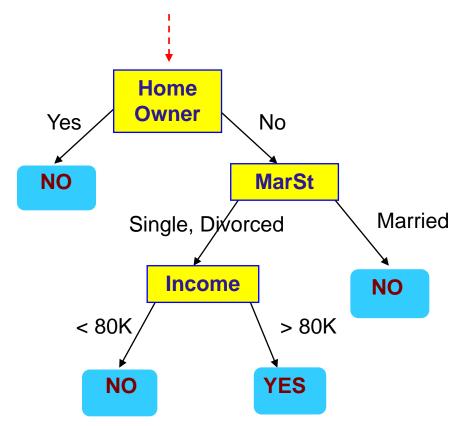
categorical continuous

ID	Home Owner	Marital Status	Annual Income	Defaulted Borrower
1	Yes	Single	125K	No
2	No	Married	100K	No
3	No	Single	70K	No
4	Yes	Married	120K	No
5	No	Divorced	95K	Yes
6	No	Married	60K	No
7	Yes	Divorced	220K	No
8	No	Single	85K	Yes
9	No	Married	75K	No
10	No	Single	90K	Yes



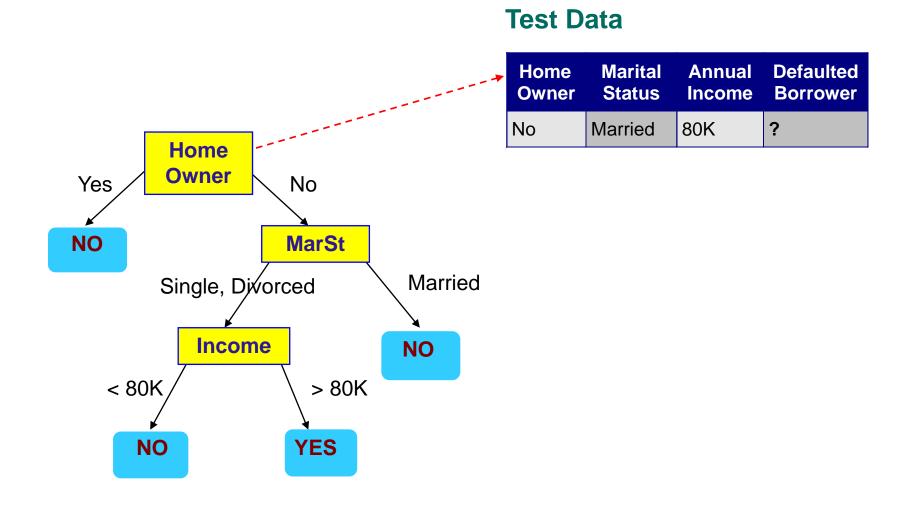
Puede existir mas de un árbol que ajuste al mismo conjunto de datos!!!

Comenzar desde la raíz del árbol

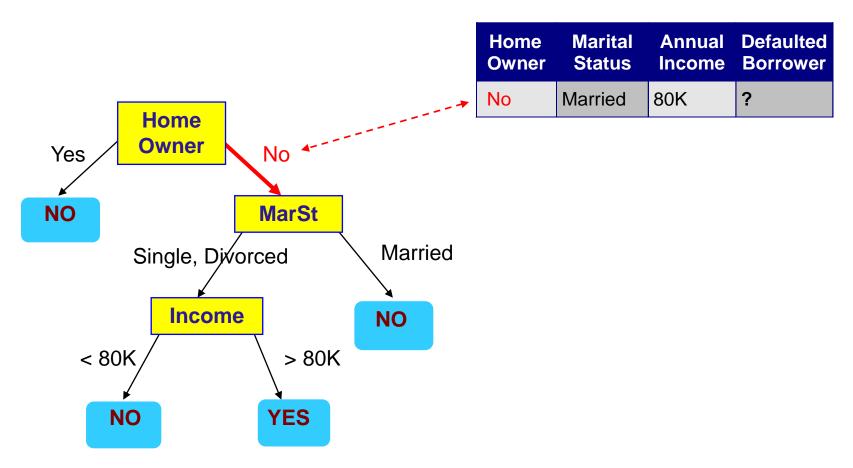


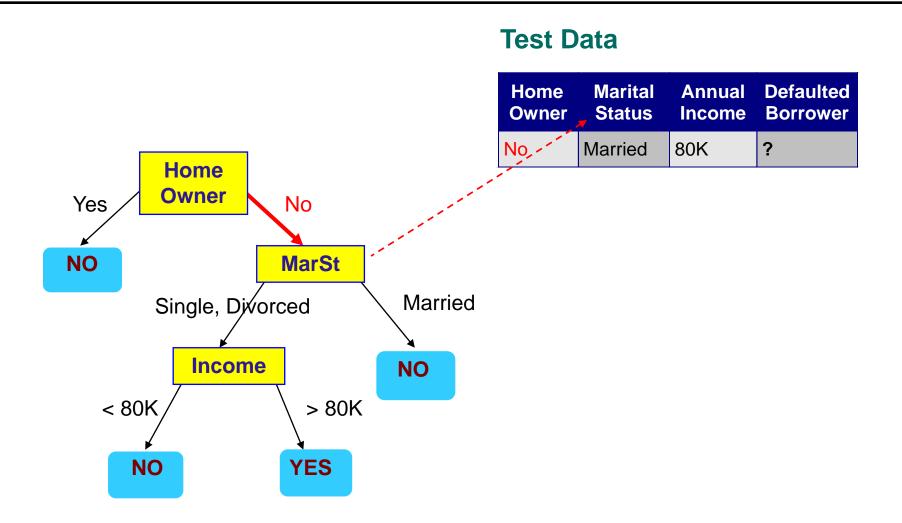
#### **Test Data**

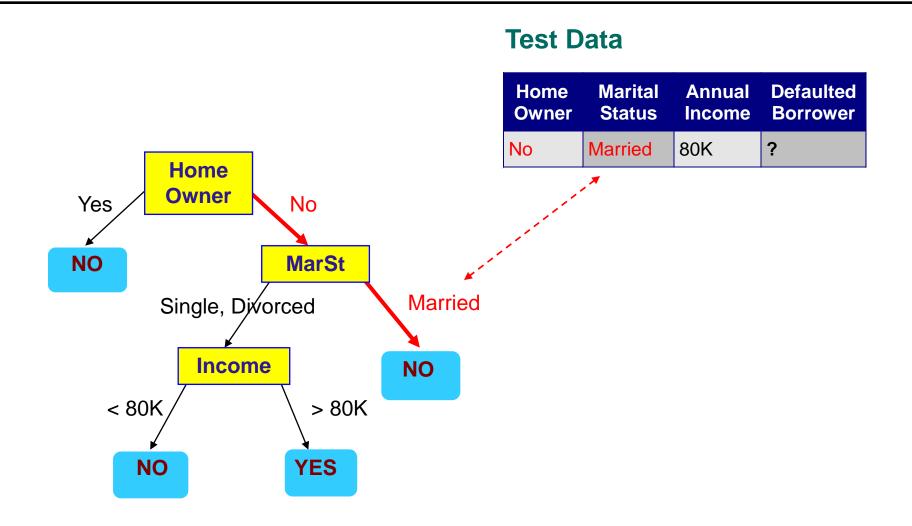
			Defaulted Borrower
No	Married	80K	?

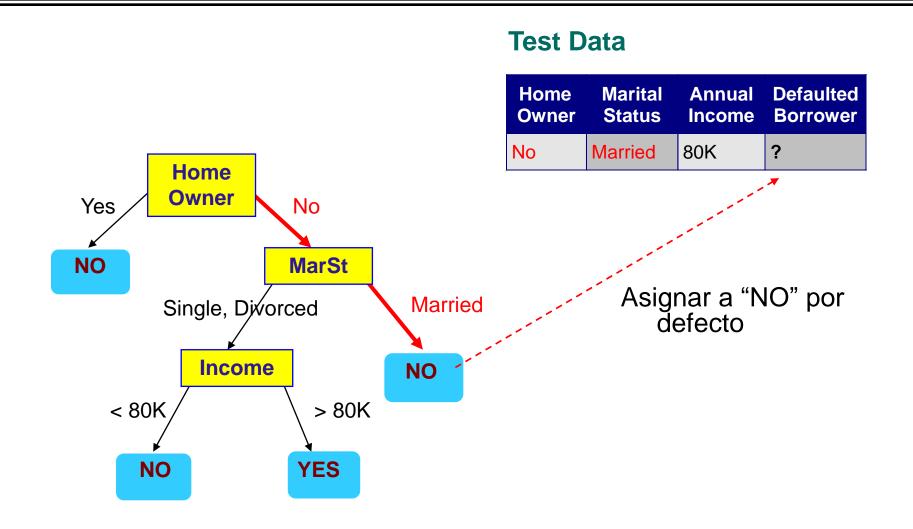




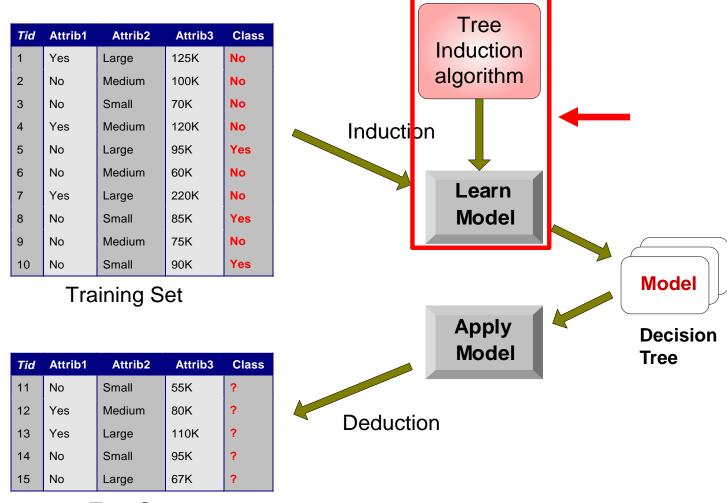








#### Tarea de Clasificación de un Árbol de Decisión



Test Set

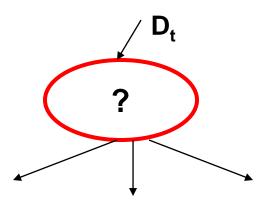
### Inducción de Arboles de Decisión

- Varios Algoritmos:
  - Algoritmo de Hunt (uno de los primeros)
  - CART
  - ID3, C4.5, C5.0
  - SLIQ, SPRINT

### Estructura General del Algoritmo de Hunt

- Sea D<sub>t</sub> el conjunto de registros de entrenamiento que llegan a un nodo t
- Procedimiento General:
  - Si  $D_t$  contiene registros que pertenecen a la misma clase  $y_t$ , entonces t es un nodo hoja que se etiqueta como  $y_t$
  - Si D<sub>t</sub> contiene registros que pertenecen a mas de una clase, utilice un test de atributo para partir los datos en subconjuntos mas pequeños. Aplique recursivamente el procedimiento a cada subconjunto.

ID	Home Owner	Marital Status	Annual Income	Defaulted Borrower
1	Yes	Single	125K	No
2	No	Married	100K	No
3	No	Single	70K	No
4	Yes	Married	120K	No
5	No	Divorced	95K	Yes
6	No	Married	60K	No
7	Yes	Divorced	220K	No
8	No	Single	85K	Yes
9	No	Married	75K	No
10	No	Single	90K	Yes



Defaulted = No

(7,3)

(a)

ID	Home Owner	Marital Status	Annual Income	Defaulted Borrower
1	Yes	Single	125K	No
2	No	Married	100K	No
3	No	Single	70K	No
4	Yes	Married	120K	No
5	No	Divorced	95K	Yes
6	No	Married	60K	No
7	Yes	Divorced	220K	No
8	No	Single	85K	Yes
9	No	Married	75K	No
10	No	Single	90K	Yes

Defaulted = No **(7,3)** 

(a)

Owner

Yes

No

Defaulted = No

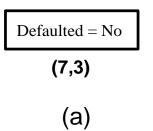
(3,0)

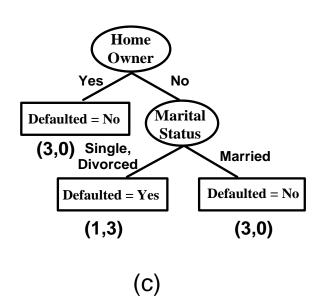
(4,3)

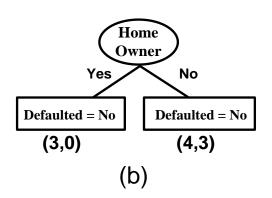
(b)

Home

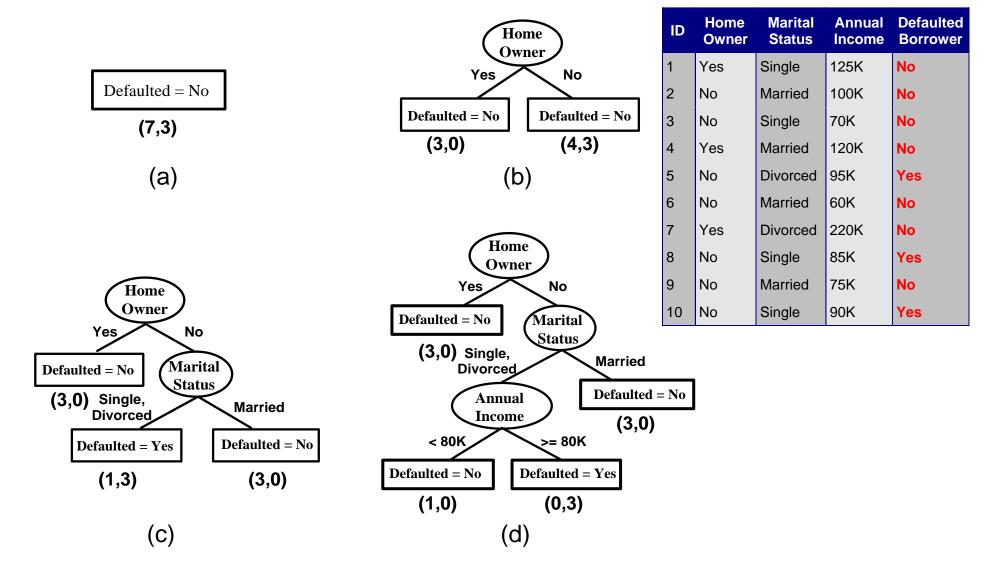
ID	Home Owner	Marital Status	Annual Income	Defaulted Borrower
1	Yes	Single	125K	No
2	No	Married	100K	No
3	No	Single	70K	No
4	Yes	Married	120K	No
5	No	Divorced	95K	Yes
6	No	Married	60K	No
7	Yes	Divorced	220K	No
8	No	Single	85K	Yes
9	No	Married	75K	No
10	No	Single	90K	Yes







Home Owner	Marital Status	Annual Income	Defaulted Borrower
Yes	Single	125K	No
No	Married	100K	No
No	Single	70K	No
Yes	Married	120K	No
No	Divorced	95K	Yes
No	Married	60K	No
Yes	Divorced	220K	No
No	Single	85K	Yes
No	Married	75K	No
No	Single	90K	Yes
	Owner Yes No No Yes No No No No Yes No No Yes No	OwnerStatusYesSingleNoMarriedNoSingleYesMarriedNoDivorcedNoMarriedYesDivorcedNoSingleNoMarried	OwnerStatusIncomeYesSingle125KNoMarried100KNoSingle70KYesMarried120KNoDivorced95KNoMarried60KYesDivorced220KNoSingle85KNoMarried75K



#### Decisiones de Diseño de un Algoritmo de Inducción de Arboles de Decisión

- Como se deben partir los registros de entrenamiento (split)?
  - Método para especificar la condición de test
    - depende del tipo de atributo
  - Medida para evaluar la bondad de una condición de testeo

- Como debe para el procedimiento de split?
  - Dejar de dividir si todos los registros pertenecen a la misma clase o tienen valores idénticos de los atributos.
  - Terminación temprana

### Métodos para expresar las condiciones de Testeo

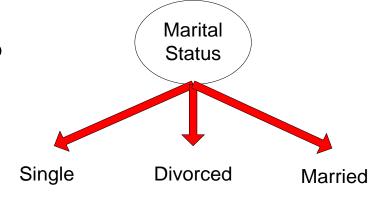
- Dependen del tipo de atributo
  - Binario
  - Nominal
  - Ordinal
  - Continuo

- Dependen de la cantidad de formas de realizar el split
  - Split de 2-vias
  - Split Multi-via

### Condicion de Testeo para Atributos Nominales

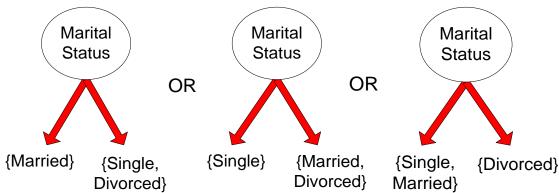
### Split Multi-vía:

 Utilizar tantas particiones como valores distintos.



#### Split Binario:

 Divide los valores en dos subconjuntos



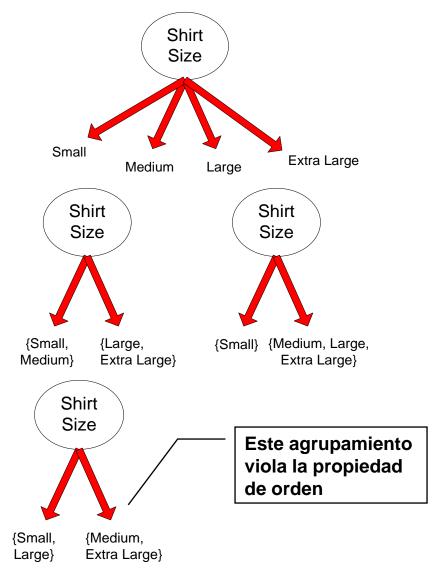
### Condición de Testeo para Atributos Ordinales

### Split Multi-vía:

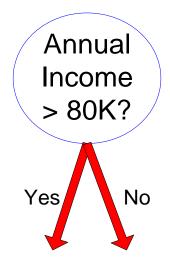
 Utilizar tantas particiones como valores distintos

#### Split Binario:

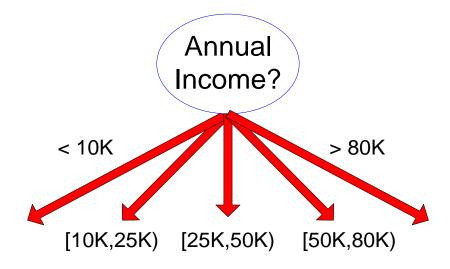
- Divide los valores en dos subconjuntos
- Preserva la propiedad de orden entre los valores de los atributos



### Condición de Testeo para Atributos Continuos



(i) Binary split



(ii) Multi-way split

#### Particionamiento Basado en Atributos Continuos

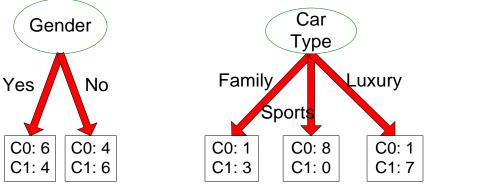
### □ Diferentes formas de atacar el problema

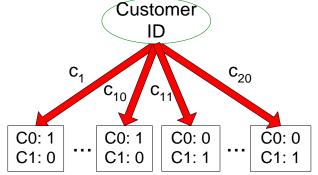
- Discretizando a alguna forma de atributo ordinal o categórico
   Se pueden construir rangos mediante mecanismos de intervalos iguales, frecuencia igual (percentiles), clustering, etc.
  - ◆ Estático discretizar una vez al comienzo
  - Dinámico repetir en cada nodo
- Decisión Binaria: (A < v) or  $(A \ge v)$ 
  - considerar todos los posibles splits y encontrar el mejor.
  - puede ser computacionalmente intensivo

### Como determinar el mejor split?

Antes de Partir: 10 registros de la clase 0, 10 registros de la clase 1

Customer Id	Gender	Car Type	Shirt Size	Class
1	M	Family	Small	C0
2	$\mathbf{M}$	Sports	Medium	C0
3	$\mathbf{M}$	Sports	Medium	C0
4	M	Sports	Large	C0
5	$\mathbf{M}$	Sports	Extra Large	C0
6	M	Sports	Extra Large	C0
7	F	Sports	Small	C0
8	F	Sports	Small	C0
9	F	Sports	Medium	C0
10	F	Luxury	Large	C0
11	$\mathbf{M}$	Family	Large	C1
12	M	Family	Extra Large	C1
13	$\mathbf{M}$	Family	Medium	C1
14	$\mathbf{M}$	Luxury	Extra Large	C1
15	F	Luxury	Small	C1
16	F	Luxury	Small	C1
17	F	Luxury	Medium	C1
18	F	Luxury	Medium	C1
19	F	Luxury	Medium	C1
20	F	Luxury	Large	C1





Cual condición de testeo es la mejor?

## Como determinar el mejor split

- Aproximación Voraz:
  - Nodos con clases puras son preferidos.
- I Se necesita de una medida de la impureza del nodo:

C0: 5

C1: 5

C0: 9

C1: 1

Alto nivel de impureza

Bajo nivel de impureza

### Medidas de la Impureza de un Nodo

Índice de Gini

$$GINI(t) = 1 - \sum_{j} [p(j|t)]^{2}$$

Entropía

$$Entropy(t) = -\sum_{j} p(j | t) \log p(j | t)$$

Error de Clasificación

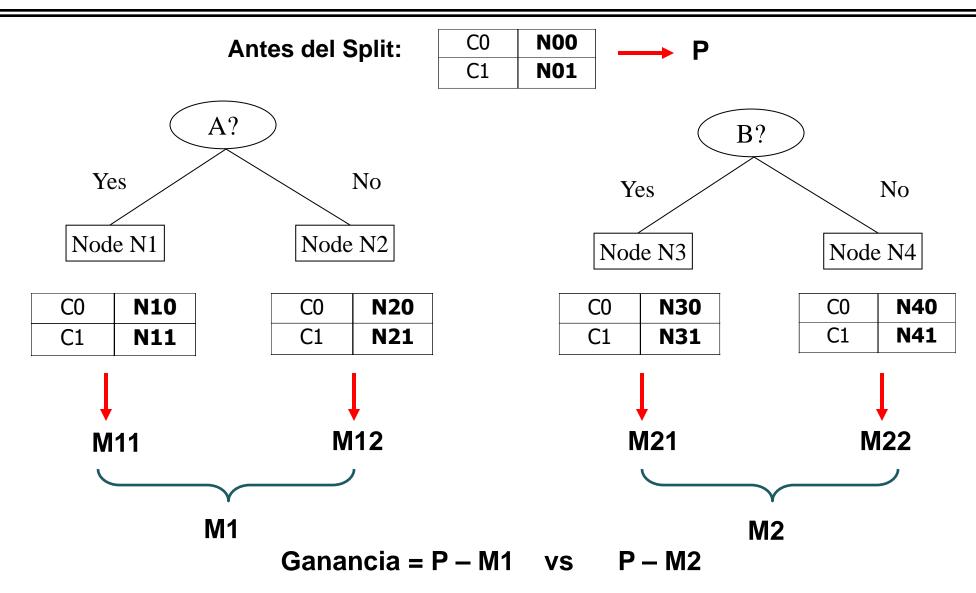
$$Error(t) = 1 - \max_{i} P(i \mid t)$$

### Como encontrar el mejor Split

- 1. Calcular la medida de impureza (P) antes del Split.
- 2. Calcular la medida de impureza (M) después del Split.
  - Calcular la medida de impureza para cada nodo hijo.
  - M es la impureza ponderada de los hijos
- 3. Elegir la condición de testeo del atributo que produce la mayor ganancia.

o equivalentemente, la menor medida de impureza luego del Split (M)

### Encontrando el mejor Split



## Medida de Impureza: GINI

El índice de Gini para un dado nodo t es:

$$GINI(t) = 1 - \sum_{j} [p(j|t)]^{2}$$

(NOTA:  $p(j \mid t)$  es la frecuencia relativa de la clase j en el nodo t).

- Máximo (I  $I/n_c$ ) cuando los registros están igualmente distribuidos entre todas las clases, implicando la información menos interesante.
- Mínimo (0.0) cuando todos los registros pertenecen a una sola clase, implicando la información mas interesante

## Medida de Impureza: GINI

□ Índice de Gini para un dado nodo t :

$$GINI(t) = 1 - \sum_{j} [p(j|t)]^{2}$$

(NOTA:  $p(j \mid t)$  es la frecuencia relativa de la clase j en el nodo t).

- Para un problema de 2 clases (p, I p):
  - GINI =  $I p^2 (I p)^2 = 2p (I-p)$

C1	0
C2	6
Gini=0.000	

C1	1
C2	5
Gini=0.278	

### Cálculo del Índice de Gini para un único Nodo

$$GINI(t) = 1 - \sum_{j} [p(j|t)]^{2}$$

$$P(C1) = 0/6 = 0$$
  $P(C2) = 6/6 = 1$   
 $Gini = 1 - P(C1)^2 - P(C2)^2 = 1 - 0 - 1 = 0$ 

P(C1) = 
$$1/6$$
 P(C2) =  $5/6$   
Gini =  $1 - (1/6)^2 - (5/6)^2 = 0.278$ 

P(C1) = 
$$2/6$$
 P(C2) =  $4/6$   
Gini =  $1 - (2/6)^2 - (4/6)^2 = 0.444$ 

# Cálculo del Índice de Gini para una colección de Nodos

Cuando un nodo p se parte en k particiones (hijos)

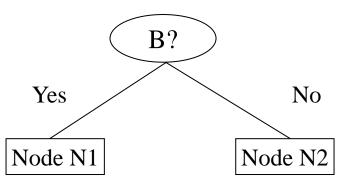
$$GINI_{split} = \sum_{i=1}^{k} \frac{n_i}{n} GINI(i)$$

donde,  $n_i$  = cantidad de registros en el hijo i,  $n_i$  = cantidad de registros en el nodo padre p.

- Elegir el atributo que minimiza el promedio ponderado del Índice de Gini de los nodos hijos
- El Índice de Gini se utiliza en los algoritmos de inducción de arboles de decisión CART, SLIQ, SPRINT

# Atributos Binarios: Cálculo del Índice de GINI

- Partir en dos particiones
- ☐ Efecto de particiones ponderadas:
  - Se buscan particiones grandes y puras.



	Parent		
C1	7		
C2	5		
Gini = 0.486			

Gini(N1) =  $1 - (5/6)^2 - (1/6)^2$ = 0.278

Gini(N2) =  $1 - (2/6)^2 - (4/6)^2$ = 0.444

	N1	N2		
C1	5	2		
C2	1	4		
Gini=0 361				

Gini Ponderado de N1 N2 = 6/12 \* 0.278 + 6/12 \* 0.444

= 0.361

Ganancia = 0.486 - 0.361 = 0.125

# Atributos Categóricos: Cálculo del Índice de GINI

- Para cada valor distinto, calcular los conteos de cada clase en el dataset
- Utilizar la matriz de conteo para tomar la decisión.

Split multi-vía

	CarType				
	Family Sports Luxury				
C1	1	8	1		
C2	3	0	7		
Gini	0.163				

Split Binario (encontrar la mejor partición de valores)

	CarType			
	{Sports, Luxury} {Family}			
C1	9	1		
C2	7	3		
Gini	0.468			

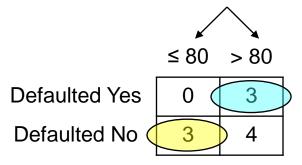
	CarType		
	{Sports}	{Family, Luxury}	
C1	8	2	
C2	0	10	
Gini	0.167		

#### Cual de estos es mejor?

- Utilizar Decisiones Binarias Basándose en un valor.
- Existen varias elecciones para el valor de partición
  - Numero de valores posibles para el split
     Numero de valores distintos
- Cada valor de Split tiene una matriz de conteo asociado con él
  - Las clases de conteo en cada una de las particiones, A < v and A ≥ v
- El método mas simple para elegir el mejor valor de v
  - Para cada v, escanear la base de datos para encontrar la matriz de conteo y calcular el índice de Gini
  - Computacionalmente Ineficiente! Repite muchas veces el mismo trabajo.

ID	Home Owner	Marital Status	Annual Income	Defaulted
1	Yes	Single	125K	No
2	No	Married	100K	No
3	No	Single	70K	No
4	Yes	Married	120K	No
5	No	Divorced	95K	Yes
6	No	Married	60K	No
7	Yes	Divorced	220K	No
8	No	Single	85K	Yes
9	No	Married	75K	No
10	No	Single	90K	Yes

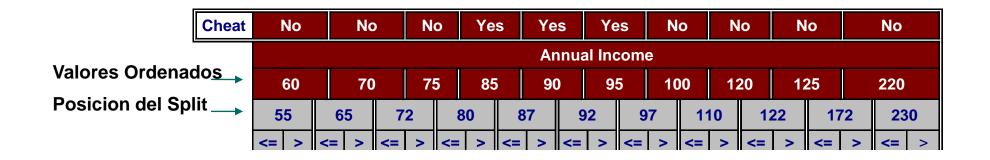
#### **Annual Income?**



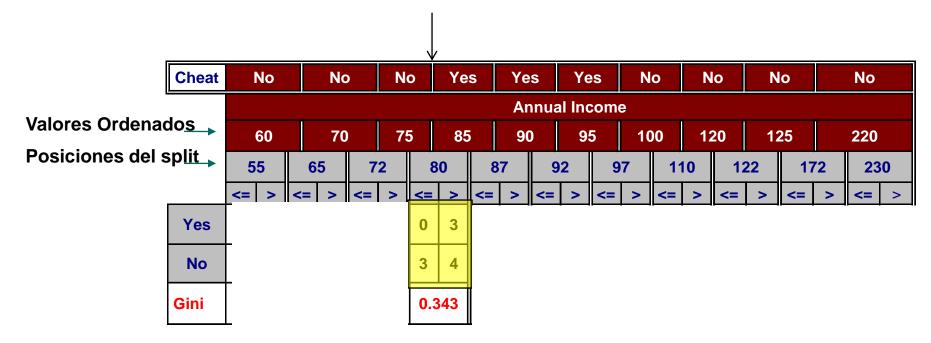
- Cálculo eficiente: Para cada atributo,
  - Ordenar los valores
  - Linealmente escanear los valores, y en cada momento actualizar la matriz de conteo y calcular el índice de GINI
  - Elegir la ubicación del Split que obtiene el menor valor para el índice de GINI

	Cheat	No	No	No	Yes	Yes	Yes	No	No	No	No
						Annua	al Incom	е			
Valores Ordenac	do <u>s</u>	60	70	75	85	90	95	100	120	125	220

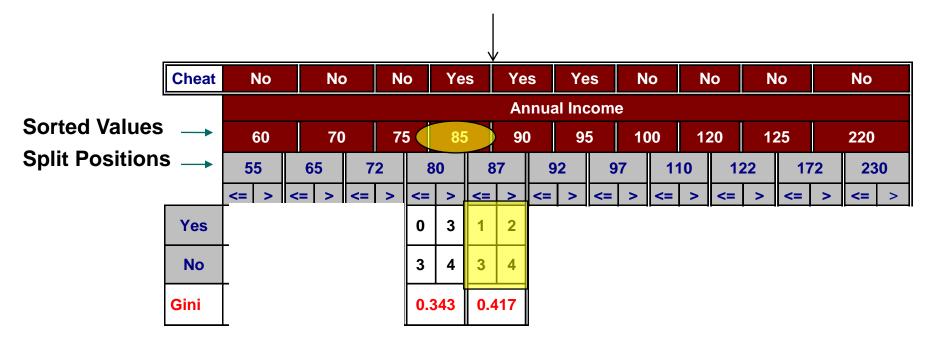
- Cálculo eficiente: Para cada atributo,
  - Ordenar los valores
  - Linealmente escanear los valores, y en cada momento actualizar la matriz de conteo y calcular el índice de GINI
  - Elegir la ubicación del Split que obtiene el menor valor para el índice de GINI



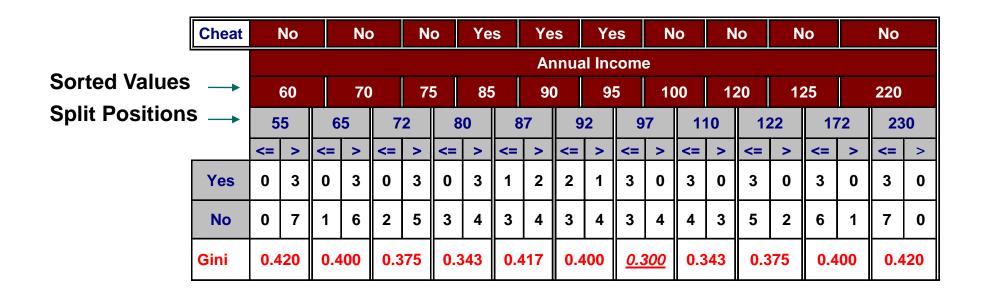
- Cálculo eficiente: Para cada atributo,
  - Ordenar los valores
  - Linealmente escanear los valores, y en cada momento actualizar la matriz de conteo y calcular el índice de GINI
  - Elegir la ubicación del Split que obtiene el menor valor para el índice de GINI



- Cálculo eficiente: Para cada atributo,
  - Ordenar los valores
  - Linealmente escanear los valores, y en cada momento actualizar la matriz de conteo y calcular el índice de GINI
  - Elegir la ubicación del Split que obtiene el menor valor para el índice de GINI



- Cálculo eficiente: Para cada atributo,
  - Ordenar los valores
  - Linealmente escanear los valores, y en cada momento actualizar la matriz de conteo y calcular el índice de GINI
  - Elegir la ubicación del Split que obtiene el menor valor para el índice de GINI



# Medida de Impureza: Entropía

La entropía en un dado nodo t:

$$Entropy(t) = -\sum_{j} p(j | t) \log p(j | t)$$

(NOTA:  $p(j \mid t)$  es la frecuencia relativa de la clase j en el nodo t).

- Máximo (log n<sub>c</sub>) cuando todos los registros están igualmente distribuidos entre todas las clases, implicando la menor cantidad de información.
- Mínimo (0.0) cuando todos los registros pertenecen a la misma clase, implicando la máxima información.
- Los cálculos basados en entropía son similares a los cálculos del índice de GINI

# Calculo de la Entropía para un único nodo

$$Entropy(t) = -\sum_{j} p(j | t) \log_{2} p(j | t)$$

$$P(C1) = 0/6 = 0$$
  $P(C2) = 6/6 = 1$   
Entropy =  $-0 \log 0 - 1 \log 1 = -0 - 0 = 0$ 

$$P(C1) = 1/6$$
  $P(C2) = 5/6$ 

Entropy = 
$$-(1/6) \log_2 (1/6) - (5/6) \log_2 (1/6) = 0.65$$

$$P(C1) = 2/6$$
  $P(C2) = 4/6$ 

Entropy = 
$$-(2/6) \log_2 (2/6) - (4/6) \log_2 (4/6) = 0.92$$

### Calculando la Ganancia de Información Después del Split

Ganancia de Información:

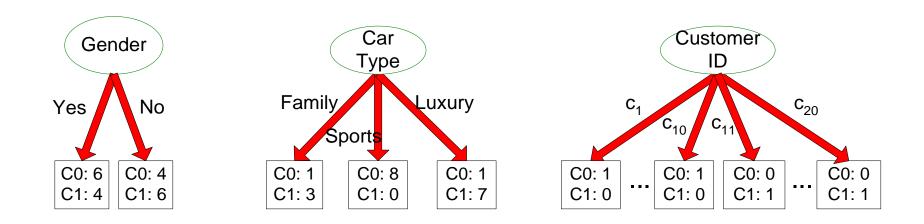
$$GAIN_{split} = Entropy(p) - \left(\sum_{i=1}^{k} \frac{n_{i}}{n} Entropy(i)\right)$$

Nodo padre, p es partido en k particiones; n<sub>i</sub> es la cantidad de registros en la partición i

- Elegir el Split que obtenga la mayor reducción (maximiza la GANANCIA)
- Usada en los algoritmos de inducción de arboles de decisión ID3 y C4.5

### Problema con una gran cantidad de particiones

Las medidas de impureza de los nodos tienden a preferir splits que resulten en una gran cantidad de particiones, cada una de ellas pequeña pero pura.



 El ID de cliente tiene la mayor ganancia de información porque la entropía de todos sus hijos es cero

# Gain Ratio (Razon de Ganancia)

#### Gain Ratio:

$$GainRATIO_{split} = \frac{GAIN_{split}}{SplitINFO} SplitINFO = -\sum_{i=1}^{k} \frac{n_i}{n} \log \frac{n_i}{n}$$

Nodo Padre, p se parte en k particiones n<sub>i</sub> es el numero de registros en la partición i

- Ajusta la Ganancia de Información por la entropía de la partición (SplitINFO).
  - Se penaliza una alta entropía de la partición (gran cantidad de pequeñas particiones)!!
- Lo utiliza el algoritmo C4.5
- Desinada para sobreponerse a las desventajas de la ganancia de información.

### **Gain Ratio**

#### Gain Ratio:

$$GainRATIO_{split} = \frac{GAIN_{split}}{SplitINFO} SplitINFO = -\sum_{i=1}^{k} \frac{n_{i}}{n} \log \frac{n_{i}}{n}$$

El nodo padre, p se parte en k particiones n<sub>i</sub> es la cantidad de registros en la particion i

	CarType				
	Family	Sports	Luxury		
C1	1	8	1		
C2	3	0	7		
Gini	0.163				

	CarType			
	{Sports, Luxury} {Family			
C1	9	1		
C2	7	3		
Gini	0.468			

	CarType			
	{Sports} {Family Luxury			
C1	8	2		
C2	0	10		
Gini	0.167			

SplitINFO = 0.97

# Medida de Impureza: Error de Clasificacion

El Error de Clasificación en el nodo t :

$$Error(t) = 1 - \max_{i} P(i \mid t)$$

- Máximo (I  $I/n_c$ ) cuando todos los registros están igualmente distribuidos entre todas las clases, implicando la menor cantidad de información.
- Mínimo (0) cuando todos los registros pertenecen a una sola clase, implicando la información mas interesante.

### Calculando el error en único nodo

$$Error(t) = 1 - \max_{i} P(i \mid t)$$

$$P(C1) = 0/6 = 0$$
  $P(C2) = 6/6 = 1$ 

Error = 
$$1 - \max(0, 1) = 1 - 1 = 0$$

$$P(C1) = 1/6$$
  $P(C2) = 5/6$ 

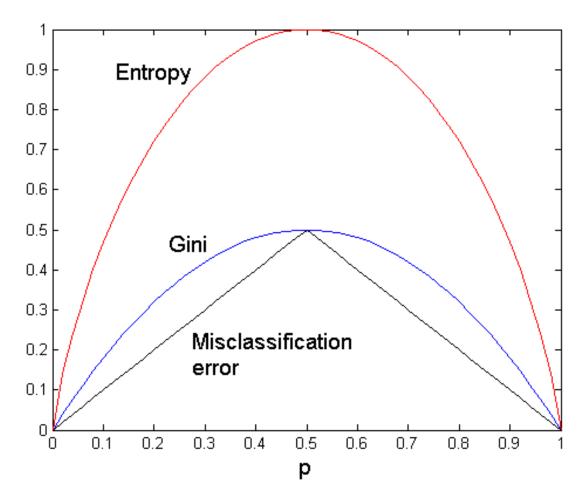
Error = 
$$1 - \max(1/6, 5/6) = 1 - 5/6 = 1/6$$

$$P(C1) = 2/6$$
  $P(C2) = 4/6$ 

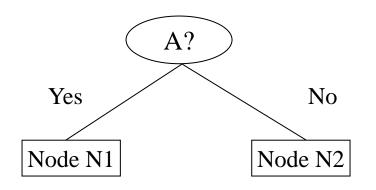
Error = 
$$1 - \max(2/6, 4/6) = 1 - 4/6 = 1/3$$

# Comparación entre las medidas de impureza

### Para un problema de 2 clases:



## Error de Clasificación vs. Índice de GINI



	Parent	
C1	7	
C2	3	
Gini = 0.42		

Gini(N1)  
= 
$$1 - (3/3)^2 - (0/3)^2$$
  
= 0

Gini(N2)  
= 
$$1 - (4/7)^2 - (3/7)^2$$
  
= 0.489

	N1	N2		
C1	3	4		
C2	0	3		
Gini=0.342				

Gini(Hijos)

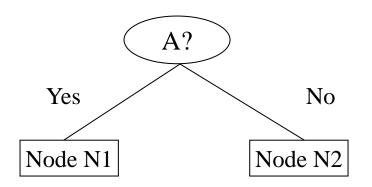
= 3/10 \* 0

+ 7/10 \* 0.489

= 0.342

Gini mejora pero el error permanece igual!!

## Error de Clasificación vs. Índice de GINI



	Parent	
C1	7	
C2	3	
Gini = 0.42		

	N1	N2	
C1	3	4	
C2	0	3	
Gini=0.342			

	N1	<b>N2</b>	
C1	3	4	
C2	1	2	
Gini=0.416			

El error de clasificación en los tres casos = 0.3!

### Clasificación basada en arboles de decisión

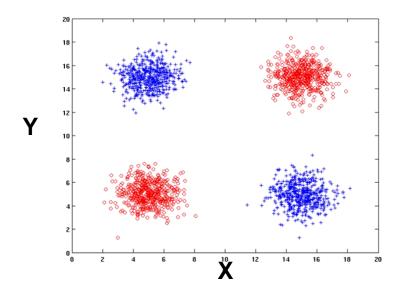
### Ventajas:

- Poco costosos para armar
- Extremadamente rápidos para clasificar registros no vistos.
- Fáciles de interpretar para arboles pequeños
- Robustos con relación al ruido (especialmente cuando se utilizan métodos para evitar el sobre-ajuste)
- Pueden manejar fácilmente atributos redundantes o irrelevantes (siempre que los mismos no interactúen)

### Desventajas:

- El espacio de arboles de decisión posibles es exponencialmente grande. Las aproximaciones voraces son muchas veces incapaces de encontrar el mejor árbol.
- No tiene en cuenta interacciones entre los atributos
- Cada frontera de decisión involucra únicamente a un solo atributo.

# Interacciones...

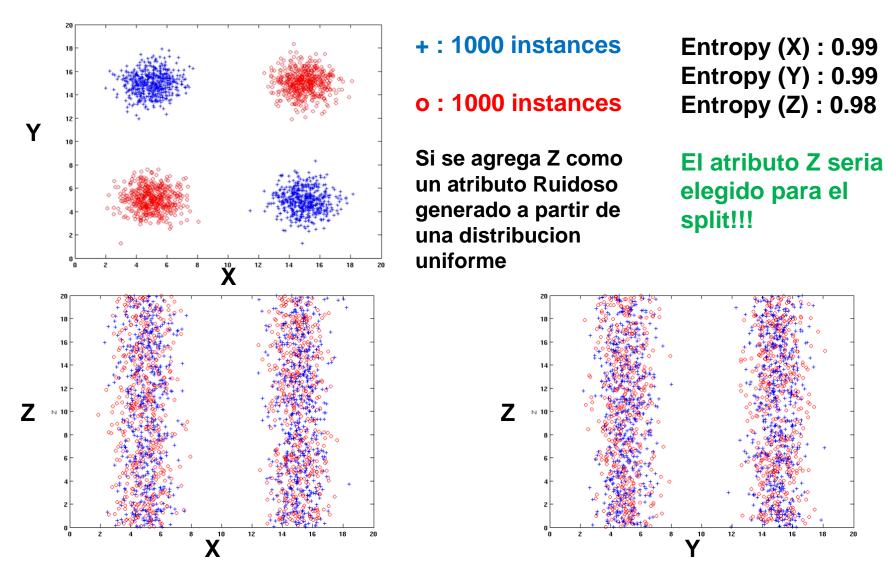


+: 1000 instances

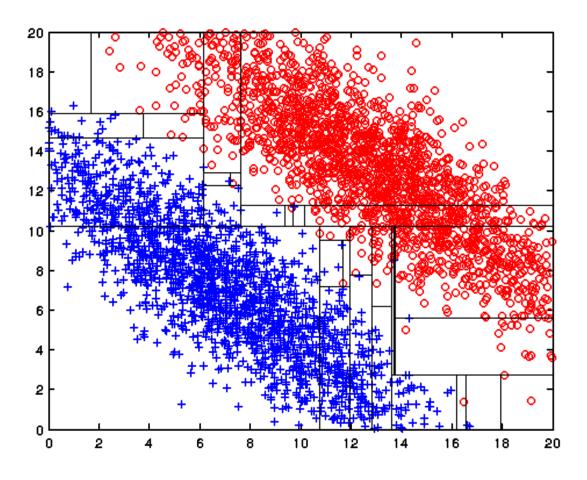
Entropy (X): 0.99 Entropy (Y): 0.99

o: 1000 instances

### **Interacciones**



#### Limitaciones de fronteras de decisión basadas en un único atributo



Tanto las clases positiva (+) como negativa (o) fueron generadas a partir de una distribución Gaussiana sesgada con centros en (8,8) y (12,12) respectivamente.