

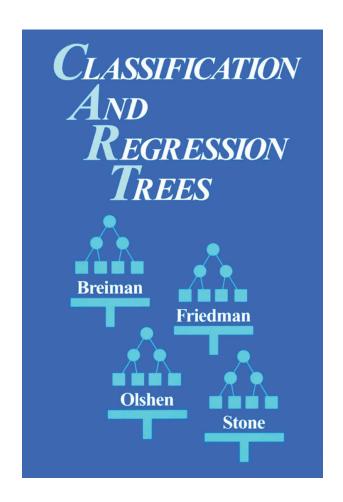
Programa Iberoamericano de Formación en Minería de Datos



## Aprendizaje Supervisado Árboles de Decisión

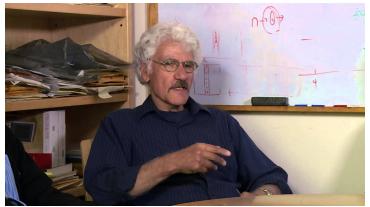
#### Método CART

### Classification And Regression Trees





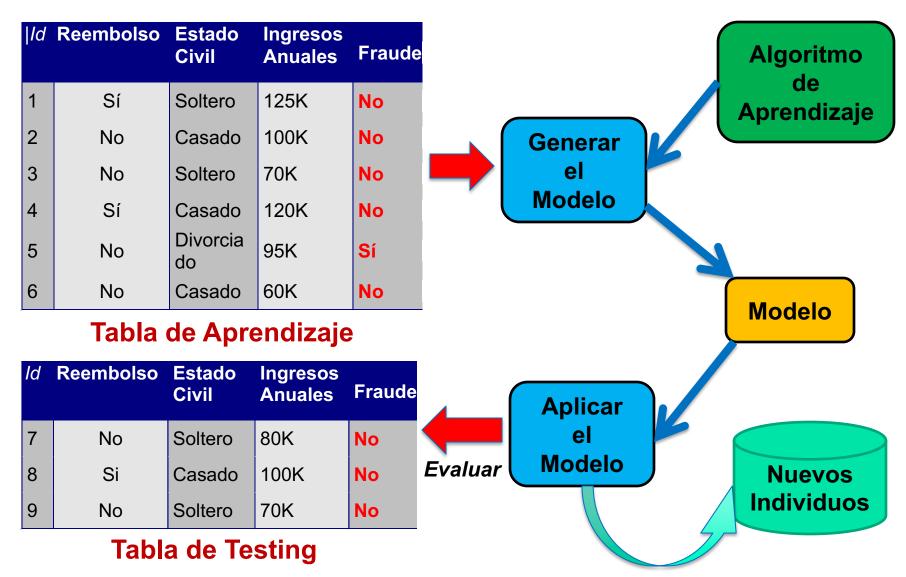
L. Brieman



J. Friedman



#### Modelo general de los métodos de Clasificación





#### Definición de Clasificación

- Dada una base de datos  $D = \{t_1, t_2, ..., t_n\}$  de tuplas o registros (individuos) y un conjunto de clases  $C = \{C_1, C_2, ..., C_m\}$ , el **problema de la clasificación** es encontrar una función  $f: D \to C$  tal que cada  $t_i$  es asignada una clase  $C_i$ .
- f: D → C podría ser una Red Neuronal, un Árbol de Decisión, un modelo basado en Análisis Discriminante, o una Red Beyesiana.



#### Ejemplo: Créditos en un Banco

Tabla de Aprendizaje

Variable
Discriminante

/OL	DEMARRR.DI	MExditoViviendaPeq					
	Id	MontoCredito	IngresoNeto	CoeficienteCre	MontoCuota	GradoAcademico	BuenPagador
•	1	2	4	3	1	4	1
	2	2	3	2	1	4	1
	3	4	1	1	4	2	2
	4	1	4	3	1	4	1
	5	3	3	1	3	2	2
	6	3	4	3	1	4	1
	7	4	2	1	3	2	2
	8	4	1	3	3	2	2
	9	3	4	3	1	3	1
	10	1	3	2	2	4	1
*	NULL	NULL	NULL	NULL	NULL	NULL	WULL

Con la Tabla de Aprendizaje se entrena (aprende) el modelo matemático de predicción, es decir, a partir de esta tabla se calcula la función **f** de la definición anterior.



### Ejemplo: Créditos en un Banco

**Tabla de Testing** 

Variable
Discriminante

OLDEMARR.DMEiviendaPeqPRED OLDEMARR.DMExditoViviendaPeq					/			
	Id	MontoCredito	IngresoNeto	CoeficienteCre	MontoCuota	GradoAcademico	BuenPagador	1
•	11	3	3	3	3	1	2	1
	12	2	2	2	2	1	1	
	13	2	2	3	2	1	1	
	14	1	3	4	3	2	2	
	15	1	2	4	2	1	1	
*	NULL	NULL	NULL	NULL	NULL	NULL	NULL	

- Con la Tabla de Testing se valida el modelo matemático de predicción, es decir, se verifica que los resultados en individuos que no participaron en la construcción del modelo es bueno o aceptable.
- Algunas veces, sobre todo cuando hay pocos datos, se utiliza la Tabla de Aprendizaje también como de Tabla Testing.



### Ejemplo: Créditos en un Banco

#### **Nuevos Individuos**

Variable Discriminante

OLDEMARR.DMExeditoViviendaNI							
	Id	MontoCredito	IngresoNeto	CoeficienteCre	MontoCuota	GradoAcademico	BuenPagador
	100	4	4	2	2	3	?
	101	1	4	3	2	4	?
	102	3	2	3	4	2	?
<b>*</b> *	NULL	NULL	NULL	NULL	NULL	NULL	NULL

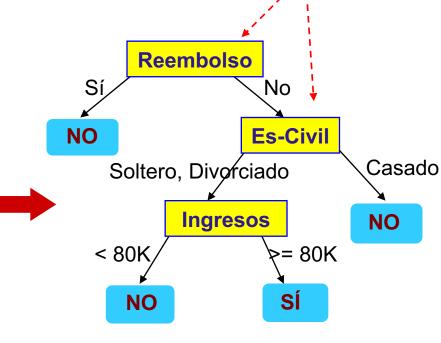
Con la Tabla de Nuevos Individuos se predice si estos serán o no buenos pagadores.



### Un ejemplo de un árbol de decisión

Id	Reembolso	Estado Civil	Ingresos Anuales	Fraude	Variables de División
1	Sí	Soltero	125K	No	
2	No	Casado	100K	No	Reembolso
3	No	Soltero	70K	No	Sí No
4	Sí	Casado	120K	No	NO Es-Civil
5	No	Divorcia do	95K	Sí	Soltero, Divorciado Casad
6	No	Casado	60K	No	Ingresos
7	Sí	Divorcia do	220K	No	< 80K >= 80K
8	No	Soltero	85K	Sí	NO
9	Sí	Casado	75K	No	
10	No	Soltero	90K	Sí	Modelo: Árbol de Decisión

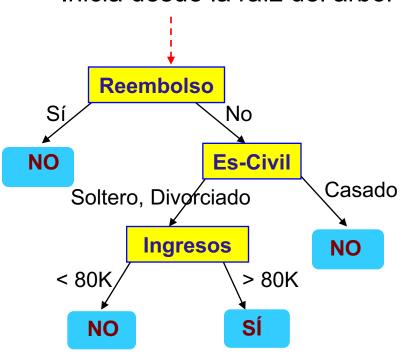
Tabla de Aprendizaje



Modelo: Arbol de Decisión



Inicia desde la raíz del árbol

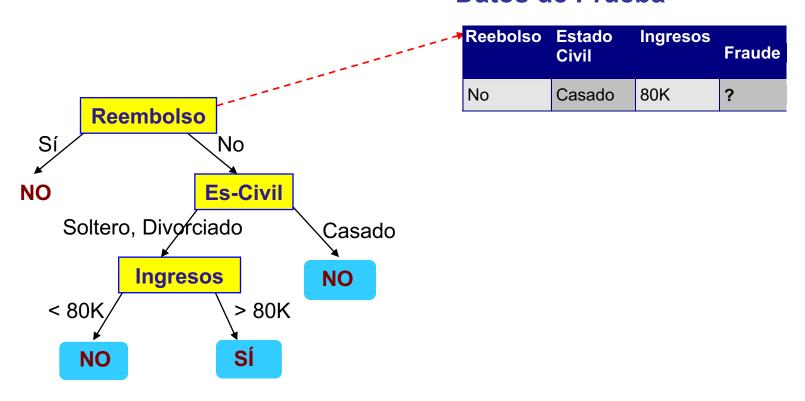


#### **Datos de Prueba**

Reebolso	Estado Civil	Ingresos	Fraude
No	Casado	80K	?

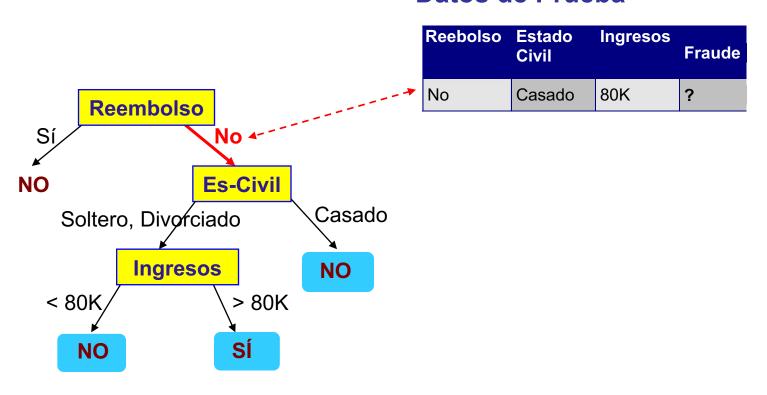


#### **Datos de Prueba**





#### **Datos de Prueba**



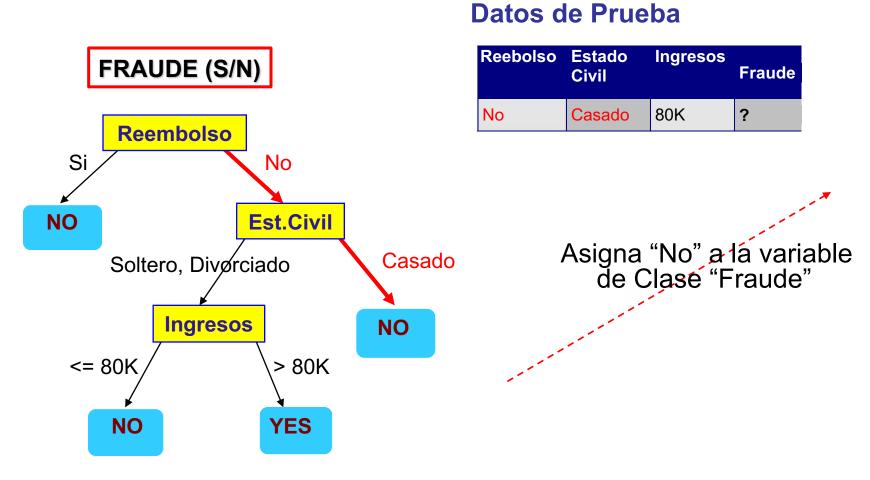


#### Datos de Prueba Reebolso Estado **Ingresos** Fraude Civil No-80K ? Casado Reembolso Sí No **Es-Civil** NO Soltero, Divorciado Casado **Ingresos** NO > 80K < 80K SÍ NO



#### Datos de Prueba Reebolso Estado **Ingresos Fraude** Civil No 80K ? Casado Reembolso Sí No **Es-Civil** NO Casado Soltero, Divorciado **Ingresos** NO > 80K < 80K SÍ NO





#### ¿Cómo se generan los árboles de decisión?

- Muchos algoritmos usan una versión con un enfoque "top-down" o "dividir y conquista" conocido como Algoritmo de Hunt.
- Sea D<sub>t</sub> el conjunto de registros de entrenamiento en un nodo t dado.
- Sea  $y_t = \{y_1, y_2, ..., y_c\}$  el conjunto de etiquetas de las clases.

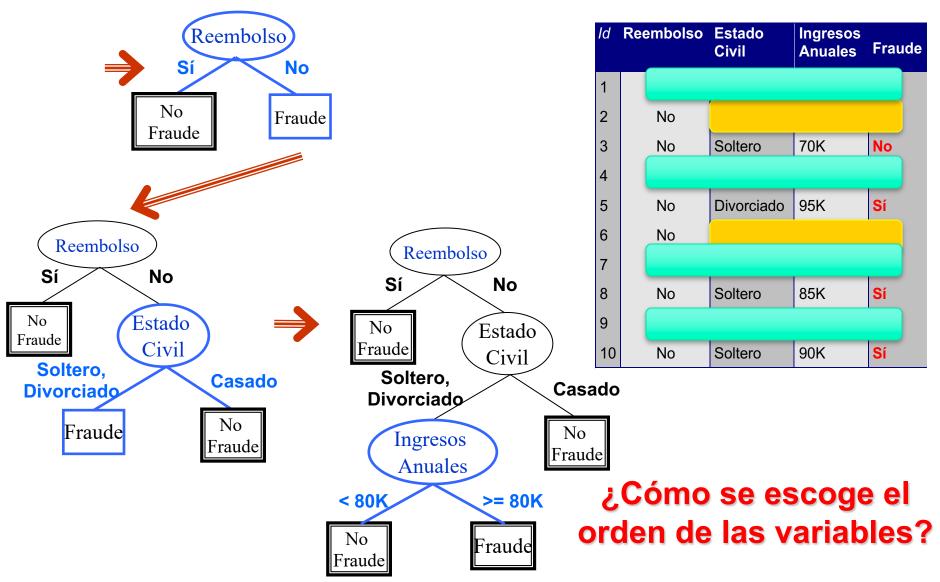


#### Algoritmo de Hunt:

- Si todos los registros D<sub>t</sub> pertenecen a la misma clase y<sub>t</sub>, entonces t es un nodo hoja que se etiqueta como y<sub>t</sub>
- Si D<sub>t</sub> contiene registros que pertenecen a más de una clase, se escoge una variable (atributo) para dividir los datos en subconjuntos más pequeños.
- Recursivamente se aplica el procedimiento a cada subconjunto.



### Un ejemplo del algoritmo de Hunt





### ¿Cómo aplicar el algoritmo de Hunt?

- Por lo general, se lleva a cabo de manera que la separación que se elige en cada etapa sea <u>óptima</u> de acuerdo con algún criterio.
- Sin embargo, puede no ser óptima al final del algoritmo (es decir no se encuentre un árbol óptimo como un todo). Aún así, este el enfoque computacional es eficiente por lo que es muy popular.



#### ¿Cómo aplicar el algoritmo de Hunt?

- ✓ Utilizando el enfoque de optimización aún se tienen que decidir tres cosas:
  - 1. ¿Cómo dividiremos las variables?
  - 2. ¿Qué variables (atributos) utilizar y en que orden? ¿Qué criterio utilizar para seleccionar la "mejor" división?
  - 3. ¿Cuándo dejar de dividir? Es decir, ¿Cuándo termina el algoritmo?



#### ¿Cómo aplicar el algoritmo de Hunt?

- Para la pregunta 1, se tendrán en cuenta sólo divisiones binarias tanto para predictores numéricos como para los categóricos, esto se explica más adelante (Método CART).
- Para la pregunta 2 se considerarán el Error de Clasificación, el Índice de Gini y la Entropía.
- La pregunta 3 tiene una respuesta difícil de dar porque implica la selección del modelo. Se debe tomar en cuenta qué tanto se quieren afinar las reglas generadas.



## Pregunta #1: Solamente se usarán divisiones Binarias (Método CART):

Nominales:



Ordinales: Como en las nominales, pero sin violar el orden

Tamaño

{Pequeño, \_\_\_\_\_ Mediano} Ó {Mediano, {Grande} Grande}

{Pequeño}

Numéricas: Frecuentemente se divide en el

punto medio



Tamaño



Sí

**Pregunta #2:** Se usarán los siguientes criterios de <u>IMPUREZA</u>: el <u>Error de Clasificación</u>, el <u>Índice</u> de Gini y la Entropía, para esto se define la siguiente probabilidad:

- p(j|t) = La probalidad de pertenecer a la clase "j" estando en el nodo t.
- Muchas veces simplemente se usa p<sub>i</sub>



### Pregunta #2: Se usarán el *Error de* Clasificación, el Índice de Gini y la Entropía

Error de clasificación: 
$$\underbrace{Error(t) = 1 - \max_{j} [p(j|t)]}_{j}$$

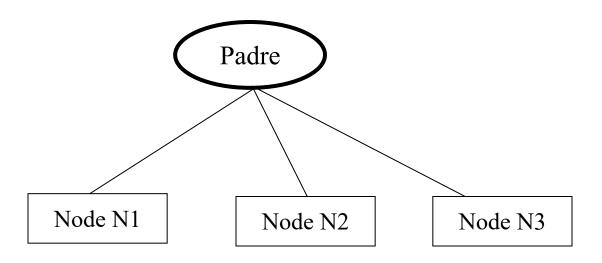
Índice de Gini:

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

Entropía: 
$$Entropía(t) = -\sum_{j} p(j|t) \log_2 p(j|t)$$



#### Ejemplo de cálculo de índices:



	N1	N2	N3
C1	0	1	2
C2	6	5	4



#### Ejemplo de cálculo de Gini

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

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

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



#### Ejemplo de cálculo de la *Entropía*

C1	0
C2	6

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

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

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

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

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

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



#### Ejemplo de cálculo del Error de Clasificación

C1	0
C2	6

Error Clasificación = 1-max[0/6,6/6]=0

C1	1
C2	5

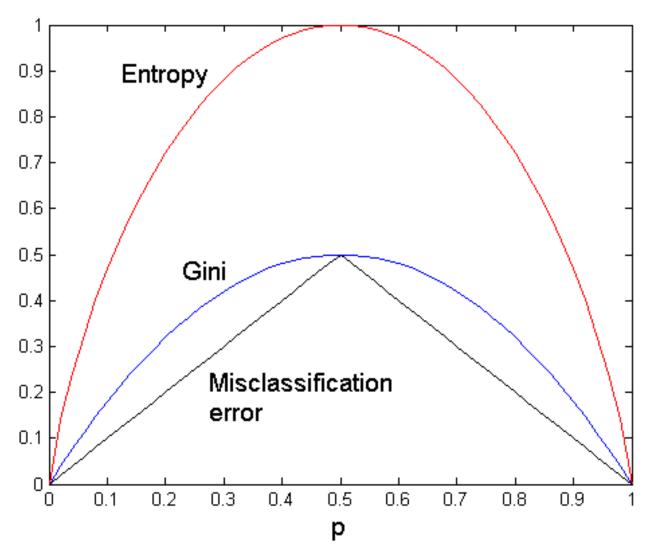
Error Clasificación = 1-max[1/6,5/6]= 0,167

C1	2
C2	4

Error Clasificación = 1-max[2/6,4/6]= 0,333



#### **Comparación Gráfica**





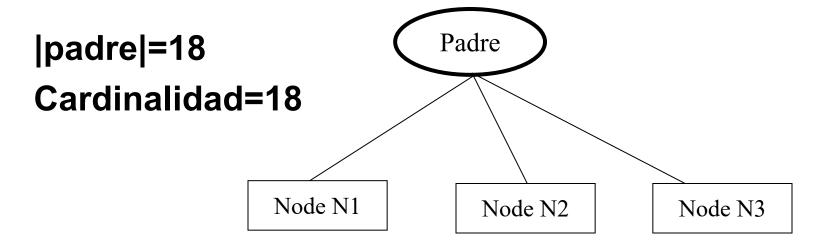
#### **Gini Split**

Después de que el índice de Gini se calcula en cada nodo, el valor total del índice de Gini se calcula como el promedio ponderado del índice de Gini en cada nodo:

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



### Ejemplo de cálculo GINI<sub>Split</sub>



	N1	N2	N3
C1	0	1	2
C2	6	5	4



### Ejemplo de cálculo de GINI<sub>split</sub>

C1	0
C2	6

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

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

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

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

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

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

$$GINI_{split} = (6/18)*0+(6/18)*0.278+(6/18)*0.444 = 0.24$$

En este caso todos los pesos son iguales porque todas las clases tienen 6 elementos



#### **Entropía Split**

Después de que el índice de Entropía se calcula en cada nodo, el valor total del índice de Entropía se calcula como el promedio ponderado del índice de Entropía en cada nodo:

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



#### Error de Clasificación Split

Después de que el Error de Clasificación (EC) se calcula en cada nodo, el valor total del índice del EC se calcula como el promedio ponderado del índice EC en cada nodo:

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



# Ejemplo con error de clasificación

Ejemplo con error de clasificación					
	N1	N2	N3	N4	
C1	0	4	2	1	
C2	6	4	3	5	

- N1 es un nodo completamente puro
- N2 es un nodo completamente impuro
  - N3 es un nodo bastante impuro
    - N4 es un nodo bastante puro



## Calculo para el nodo N1

Cálculos para N1	
C1	0
C2	6

#### **Probabilidades:**

- P(C1/N1)=0/6=0
- P(C2/N1)=6/6=1

Luego el error de clasificación es 1-max(p(j/t)):

$$EC(N1)=1-max(0,1)=0$$



## Calculo para el nodo N2

Cálculos para N2	
C1	4
C2	4

#### **Probabilidades:**

- P(C1/N2)=4/8=0.5
- P(C2/N2)=4/8=0.5

Luego el error de clasificación es 1-max(p(j/t)):

$$EC(N2)=1-max(0.5,0.5)=0.5$$



# Calculo para el nodo N3

Cálculos para N3	
C1	2
C2	3

### **Probabilidades:**

- P(C1/N3)=2/5=0.4
- P(C2/N3)=3/5=0.6

Luego el error de clasificación es 1-max(p(j/t)):

$$EC(N3)=1-max(0.4,0.6)=0.4$$



# Calculo para el nodo N4

Cálculos para N4	
C1	1
C2	5

#### **Probabilidades:**

- P(C1/N4)=1/6=0.1667
- P(C2/N4)=5/6=0.8333

Luego el error de clasificación es 1-max(p(j/t)):

EC(N3)=1-max(0.1667,0.8333)=0.1667



# Error de clasificación Split

## **Datos previos**

Total de individuos 25.

Individuos de N1=6, EC(N1)=0.

Individuos de N2=8, EC(N2)=0.5

Individuos de N3=5, EC(N3)=0.4.

Individuos de N4=6, EC(N4)=0.1667

ECS= (6/25)\*0+(8/25)\*0.5+(5/25)\*0.4+(6/25)\*0.1667=0.280008



# Información Ganada → IG<sub>Split</sub>

- ✓ Cada vez que se va a hacer una nueva división en el árbol (split the tree) se debe comparar el grado de impureza del nodo padre respecto al grado de impureza de los nodos hijos.
- ✓ Esto se calcula con el índice de Información Ganada (IG), que es la resta de la impureza del nodo padre menos el promedio ponderado de las impurezas de los nodos hijos.
- ✓ La idea en IG<sub>Split</sub> sea máximo y esto se logra si el promedio ponderado de las impurezas de los nodos hijos es mínimo.

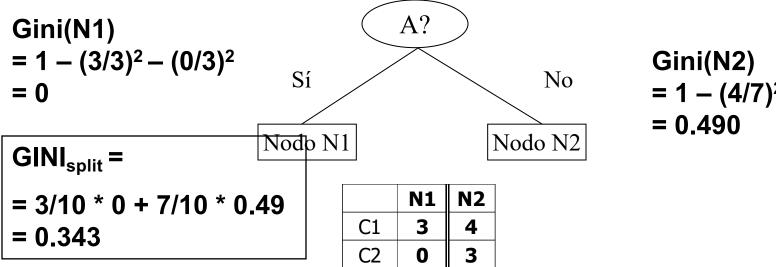
$$\Delta = IG_{split} = I(padre) - \left(\sum_{i=1}^{k} \frac{n_i}{n} I(i)\right)$$

• Donde I es el índice de GINI, la Entropía o el Error de Clasificación.



## Ejemplo: Información Ganada → IG<sub>Split</sub>

	Padre			
C1	7			
C2	3			
Gini = 0.42				

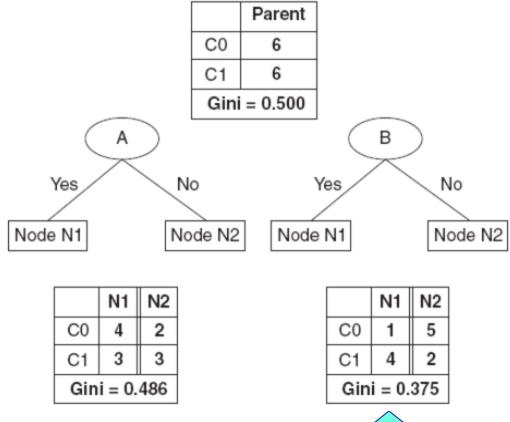


Gini(N2)  
= 
$$1 - (4/7)^2 - (3/7)^2$$
  
=  $0.490$ 

$$IG_{split} = I(padre) - \left(\sum_{i=1}^{k} \frac{n_i}{n} I(i)\right) = 0.42 - 0.343 = 0.077$$



# ¿Cómo escoger la mejor división?

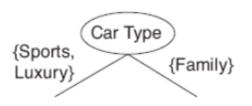


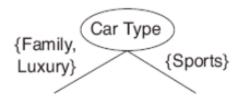
Se debe escoger la variable B ya que maximiza la Información Ganada al minimizar **GINI**<sub>split</sub>

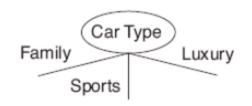




# ¿Cómo escoger la mejor división?







	Car Type					
	{Sports, Luxury}	{Family}				
CO	9	1				
C1	7	3				
Gini	0.468					

	Car Type					
	{Sports}	{Family, Luxury}				
C0	8	2				
C1	0	10				
Gini	0.167					

	Car Type								
	Family	Sports	Luxury						
C0	1	8	1						
C1	3	0	7						
Gini	0.163								

(b) Multiway split

(a) Binary split

Pero si se tiene solamente división. En caso de tener divisió binaria se escoge esta división binaria se escode estă division ya que maximiza, a Informacion ormacion Ganada al minimizar **GINI<sub>split</sub>** Ganada al minimizar **GINI**<sub>split</sub>

tiple e maximiza

Programa Iberoamericano de Formación en Minería de Datos



# ¿Cómo escoger la mejor división?

	Class		No		No	•	N	0	Ye	s	Ye	s	Υe	es	N	0	N	lo	N	0		No	
										Α	nnı	ual I	nco	ome	•								
Sorted Values →			60		70	)	75	5	85		90	,	9	5	10	00	12	20	12	25		220	
Split Positions→		5	5	6	5	7	2	8	0	8	7	9	2	9	7	11	0	12	22	17	2	23	0
ор		<=	>	<=	>	<=	>	<=	>	<=	>	<=	>	<=	>	<=	>	<=	>	<=	>	<=	>
	Yes	0	3	0	3	0	3	0	3	1	2	2	1	3	0	3	0	3	0	3	0	3	0
	No	0	7	1	6	2	5	3	4	3	4	3	4	3	4	4	3	5	2	6	1	7	0
	Gini	0.4	20	0.4	00	0.3	75	0.3	43	0.4	17	0.4	00	0.3	<u>00</u>	0.3	43	0.3	75	0.4	00	0.4	20

La variable "Annual Income" se debe dividir en "97" ya que maximiza la Información Ganada al minimizar **GINI**<sub>split</sub>

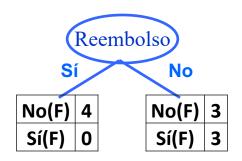


## ¿Por qué se escoge "Reembolso" como variable inicial?

## R/ Tiene el menor GINI<sub>split</sub>

(mayor información ganada) Empatado con Estado Civil,

pero aparece de primero



		Civil	Anuales	rrauue
1	Sí	Soltero	125K	No
2	No	Casado	100K	No
3	No	Soltero	70K	No
4	Sí	Casado	120K	No
5	No	Divorciado	95K	Sí
6	No	Casado	60K	No
7	Sí	Divorciado	220K	No
8	No	Soltero	85K	Sí
9	Sí	Casado	75K	No
10	No	Soltero	90K	Sí

Ingresos

Reembolso Estado

$$GINI(No) = 1-(3/6)^2-(3/6)^2 = 1-0.25-0.25 = 0.5$$

$$GINI(Si) = 1-(0/4)^2-(4/4)^2 = 1-0-1 = 0$$

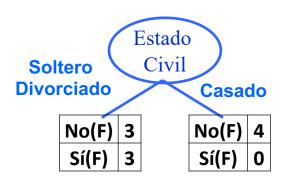
$$GINI_{split} = (4/10)*0+(6/10)*0.5 = 0.3$$



## ¿Por qué se escoge "Reembolso" como variable inicial?

## R/ Tiene el menor GINI<sub>split</sub>

(mayor información ganada) Empatado con Estado Civil, pero aparece de primero



ld	Reembolso	Estado Civil	Ingresos Anuales	Fraude
1	Sí	Soltero	125K	No
2	No	Casado	100K	No
3	No	Soltero	70K	No
4	Sí	Casado	120K	No
5	No	Divorciado	95K	Sí
6	No	Casado	60K	No
7	Sí	Divorciado	220K	No
8	No	Soltero	85K	Sí
9	Sí	Casado	75K	No
10	No	Soltero	90K	Sí

GINI(Casado) = 
$$1-(0/4)^2-(4/4)^2=0$$

GINI(Soltero/Divorciado) = 
$$1-(3/6)^2-(3/6)^2=1-0.25-0.25=0.5$$

$$GINI_{split} = (6/10)*0.5+(4/10)*0 = 0.3$$

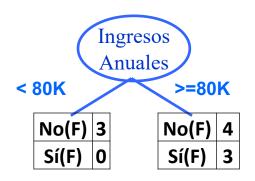


## ¿Por qué se escoge "Reembolso" como variable inicial?

## R/ Tiene el menor GINI<sub>split</sub>

(mayor información ganada) Empatado con Estado Civil,

pero aparece de primero



ld	Reembolso	Estado Civil	Ingresos Anuales	Fraude
1	Sí	Soltero	125K	No
2	No	Casado	100K	No
3	No	Soltero	70K	No
4	Sí	Casado	120K	No
5	No	Divorciado	95K	Sí
6	No	Casado	60K	No
7	Sí	Divorciado	220K	No
8	No	Soltero	85K	Sí
9	Sí	Casado	75K	No
10	No	Soltero	90K	Sí

$$GINI(>=80) = 1-(4/7)^2-(3/7)^2 = 1-0.326530612-0.183673469 = 0.489795918$$

$$GINI(<80) = 1-(0/3)^2-(3/3)^2 = 1-0-1 = 0$$

$$GINI_{split} = (3/10)*0+(7/10)*0.489795918 = 0.342857143$$



## Pregunta #3 ¿Cuándo dejar de dividir?

- Esta es una difícil ya que implica sutil selección de modelos.
- Una idea sería controlar el Error de Clasificación (o el Índice de Gini o la Entropía) en el conjunto de datos de prueba de manera que se detendrá cuando el índice selecciona comience a aumentar.
- La "Poda" (pruning) es la técnica más popular. Usada en el Método CART propuesto por Breiman, Friedman, Olshen, and Stone, 1984, (CART=Classification And Regression Trees)



# Algoritmo CART

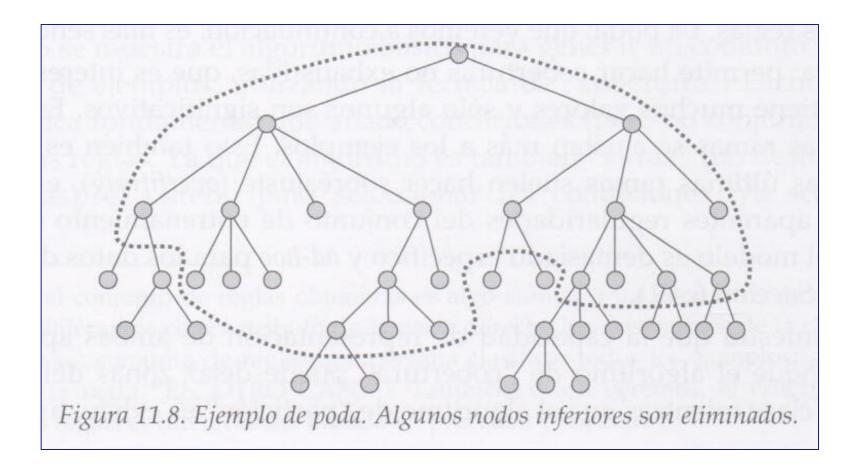
Para cada nodo v del Árbol hacer los pasos 1 y 2

- 1. Para *j*= 1,2,...,*p* calcular: (*p*=número de variables)
  - Todas las divisiones binarias correspondientes a la variable discriminante Y
  - La división binaria óptima d(j) correspondiente a la variable Y, es decir la división binaria maximiza el descenso de la impureza
- 2. Recursivamente calcular la mejor división binaria para d(1), d(2), ...,d(p)

FIN



# Árbol podado y reestructurado



# Ejemplo 1: IRIS.CSV

Ejemplo con la tabla de datos IRIS IRIS Información de variables:

- 1.sepal largo en cm
- 2.sepal ancho en cm
- 3.petal largo en cm
- 4.petal ancho en cm
- 5.clase:
  - Iris Setosa
  - Iris Versicolor
  - Iris Virginica

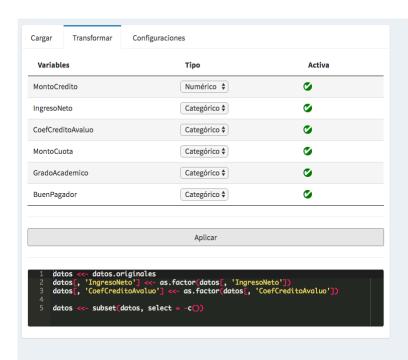


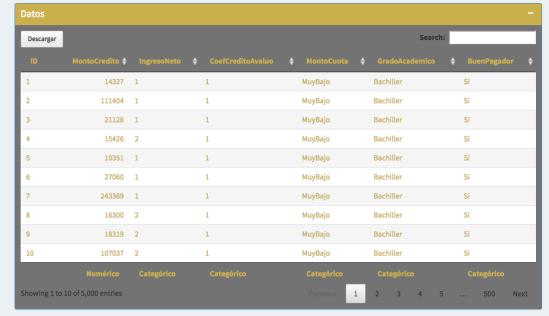
	Α	В	С	D	Е
1	s.largo	s.ancho	p.largo	p.ancho	tipo
2	5.1	3.5	1.4	0.2	setosa
3	4.9	3.0	1.4	0.2	setosa
4	4.7	3.2	1.3	0.2	setosa
5	4.6	3.1	1.5	0.2	setosa
6	5.0	3.6	1.4	0.2	setosa
7	5.4	3.9	1.7	0.4	setosa
8	4.6	3.4	1.4	0.3	setosa
9	5.0	3.4	1.5	0.2	setosa
10	4.4	2.9	1.4	0.2	setosa
11	4.9	3.1	1.5	0.1	setosa
12	5.4	3.7	1.5	0.2	setosa
13	4.8	3.4	1.6	0.2	setosa
14	4.8	3.0	1.4	0.1	setosa
15	4.3	3.0	1.1	0.1	setosa
16	5.8	4.0	1.2	0.2	setosa
17	5.7	4.4	1.5	0.4	setosa
18	5.4	3.9	1.3	0.4	setosa
19	5.1	3.5	1.4	0.3	setosa
20	5.7	3.8	1.7	0.3	setosa
21	5.1	3.8	1.5	0.3	setosa
22	5.4	3.4	1.7	0.2	setosa
23	5.1	3.7	1.5	0.4	setosa
24	4.6	3.6	1.0	0.2	setosa
25					



# Ejemplo 2: Credit-Scoring

MuestraAprendizaje5000V2.csv







## Descripción de Variables

#### **MontoCredito**

Numérica

#### **MontoCuota**

1=Muy Bajo

2=Bajo

3=Medio

4=Alto

#### IngresoNeto

1=Muy Bajo

2=Bajo

3=Medio

4=Alto

#### **GradoAcademico**

1=Bachiller

2=Licenciatura

3=Maestría

4=Doctorado

#### CoeficienteCreditoAvaluo

1=Muy Bajo

2=Bajo

3=Medio

4=Alto

#### **BuenPagador**

1=NO

2=Si





Programa Iberoamericano de Formación en Minería de Datos

Gracias....