# Laboratorio de datos Clasificación

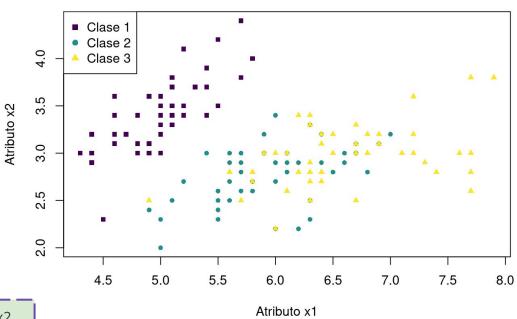
Primer Cuatrimestre 2023

### Contenido

- Clasificación
- Método básico de umbral Ejemplos con Iris
- Árboles de decisión
- Bias y Varianza
- Ensambles
- Ejemplos con Iris
- Ejercicio con árboles de la Ciudad

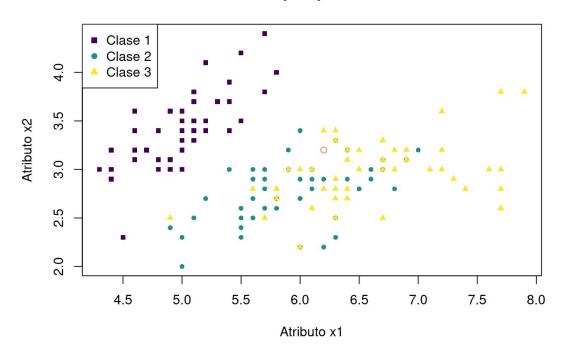
# Ejemplo

#### Scatterplot por clases



- Variables explicativas x1, x2
- Variable a explicar categórica

#### Scatterplot por clases



¿Qué clase le asignamos a la nueva observación?

# Clasificación

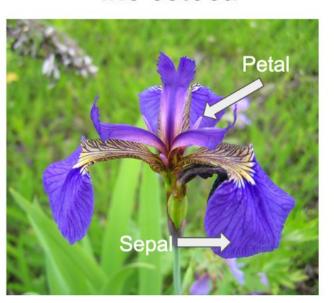
- A partir de los atributos (variables explicativas) determinan la etiqueta en la variable categórica Y.
- Aprendizaje supervisado: contamos con un conjunto de entrenamiento en el cual conocemos las etiquetas - valores de la variable Y.
- Evaluación del modelo: medida relacionada con la cantidad de elementos bien o mal clasificados.
- + En el caso de las variables sí/no, hablamos de falsos positivos, o falsos negativos.

# Métodos posibles (hay más)

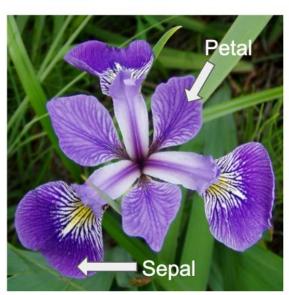
- + Umbral  $(x_1 > c)$
- + Regresión logística
- + Árboles de decisión
- + Support Vector Machines (SVM)
- + K-Nearest Neighbors (KNN)

## Dataset de flores - Iris

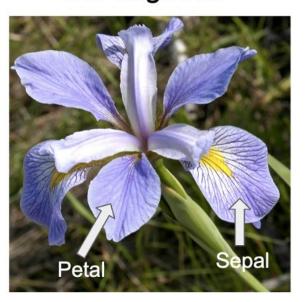
### Iris setosa



Iris versicolor



Iris virginica

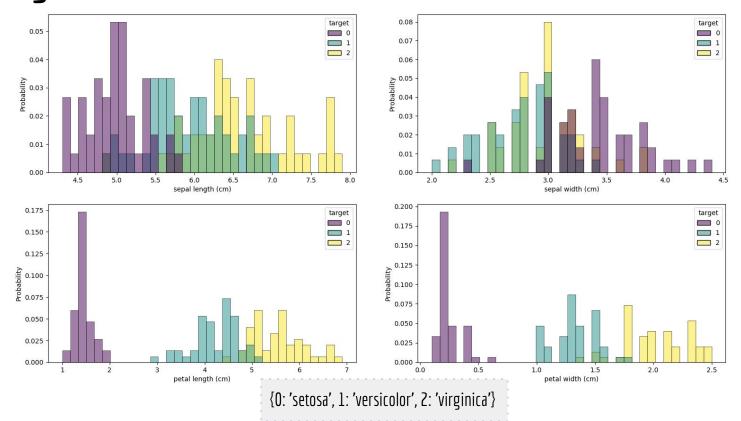


50 muestras de cada una de tres especies de flores *Iris: setosa, versicolor y virginica*. De cada flor se midieron 4 atributos: largo y ancho del sépalo y del pétalo.

*Fisher - 1936* 

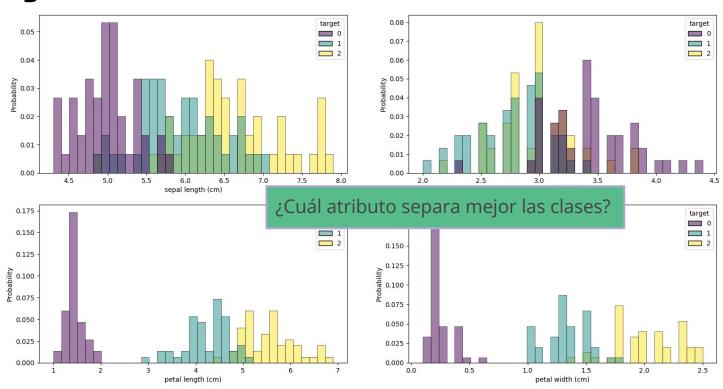
# Histogramas

#### Histogramas de los 4 atributos



# Histogramas

#### Histogramas de los 4 atributos



# Clasificamos por largo del pétalo

def clasificador\_iris



# Clasificamos por largo del pétalo

Ahora veamos cómo se comporta este clasificador.

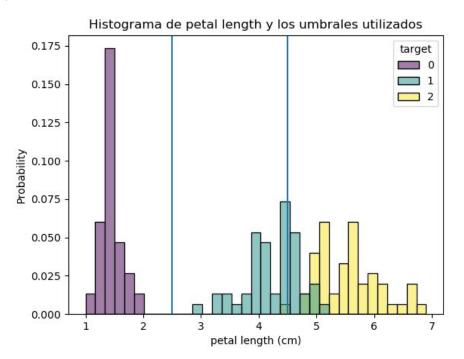


¿Podemos mejorar el clasificador? ¿Cómo comparamos entre dos clasificadores?

# Clasificamos por largo del pétalo

Ahora veamos cómo se comporta este clasificador.

Éstas son las líneas de corte.



# Medidas para evaluar clasificadores

### Matriz de confusión

Para cada clase i, nos fijamos cuántas observaciones de la clase fueron clasificadas en cada clase j.

Esto nos da una matriz cuadrada, con una fila y columna por cada clase.

	0	1	2
0	50	0	0
1	0	29	21
2	0	0	50

{0: 'setosa', 1: 'versicolor', 2: 'virginica'}

# Medidas para evaluar clasificadores

### Exactitud

La exactitud o *accuracy* que es una medida numérica que cuenta la proporción de observaciones *bien* clasificadas.

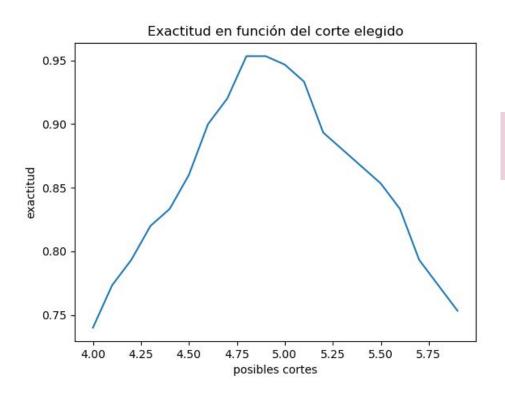


# ¿Buscamos el mejor clasificador?

#### Podemos

- + recorrer muchos posibles umbrales dentro de un rango
- + para cada umbral correr el clasificador y evaluarlo
- + comparar los clasificadores para seleccionar el mejor

# Comparación de clasificadores



corte\_selec =
posibles\_cortes[np.argmax(exactitudes)]

### Contenido

- Clasificación
- Frontera
- Árboles de decisión
- Bias y Varianza

## Árboles de decisión

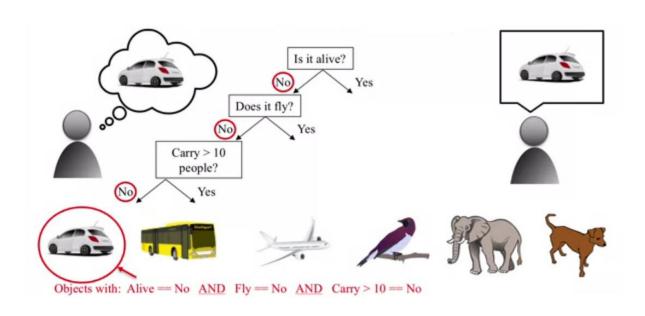
- método para inferencia inductiva
- aprenden reglas if-then sobre los valores de los atributos. Predicen valor objetivo en función de las reglas.

# Árboles de decisión - Ejemplo



Applied Machine Learning with Python. Universidad de Michigan

# Árboles de decisión - Ejemplo



.**nodo** representa pregunta

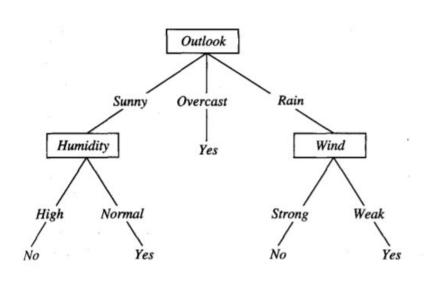
.**ejes** representan posibles respuestas

.hojas: nodos que representan objetos

.caminos desde la raíz.

Applied Machine Learning with Python. Universidad de Michigan

# Árboles de decisión



- . **nodo** representa test sobre un atributo de la instancia
- . **rama desde un nodo**: corresponde a un valor para ese atributo.

El árbol representa disyunción de conjunciones sobre valores de atributos

(Outlook = Sunny  $\land$  Humidity = Normal)  $\lor$ 

(Outlook = Overcast) V

(Outlook = Rain  $\land$  Wind = Weak)

### Cuándo considerar árboles de decisión

- Instancias representables por pares atributo-valor (especialmente pocos valores disjuntos). Veremos con valores continuos
- La función objetivo tiene valores de salida discretos. También podrían ser reales, pero es menos común

### Ejemplos de uso:

- diagnósticos médicos
- análisis de riesgo crediticio

### Contenido

- Clasificación
- Frontera
- Árboles de decisión
  - Algoritmo
    - criterio de selección
    - sesgo inductivo
    - Occam's Razor
    - sobreajuste
    - poda
  - Adecuación a valores continuos
  - Valores faltantes
  - Atributos con costo
  - Resumen
- Ensambles

# Ejemplo

		Clase			
Instancia	Cielo	Temperatura	Humedad	Viento	Va a correr?
1	sol	calor	alta	débil	No
2	sol	calor	alta	fuerte	No
3	nublado	calor	alta	débil	Sí
4	lluvia	templado	alta	débil	Sí
5	lluvia	frío	normal	débil	Sí
6	lluvia	frío	normal	fuerte	No
7	nublado	frío	normal	fuerte	Sí
8	sol	templado	alta	débil	No
9	sol	frío	normal	débil	Sí
10	lluvia	templado	normal	débil	Sí
11	sol	templado	normal	fuerte	Sí
12	nublado	templado	alta	fuerte	Sí
13	nublado	calor	normal	débil	Sí
14	lluvia	templado	alta	fuerte	No

Cantidad de positivos

Cantidad de negativos

# Inducción Top-Down de árboles de decisión ID-3 y C4.5 (Quinlan)

- 1) A ← el **"mejor"** atributo para nodo\_actual
- 2) Asignar A como atributo de decisión del nodo\_actual
- 3) Para cada valor de A, crear un nuevo hijo del nodo\_actual
- 4) Clasificar (repartir) las instancias en los nuevos nodos, según el valor de A
- 5) Si las instancias están bien clasificadas: TERMINAR Si no: Iterar sobre los nuevos nodos

### ¿Qué atributo es el mejor?

- Information gain
- Impureza Gini
- ☐ Gain ratio
- **」** ...

Tenemos 14 instancias: [9⊕, 5⊖]

Verificamos cuán bien un atributo separa a los ejemplos de acuerdo a su clasificación objetivo.



# ¿Qué atributo es el mejor?

Medidas de **impureza** de un conjunto de ejemplos:

- Entropía (Information Gain)
- Gini (Gini Gain)

**Medidas de efectividad** de un **atributo** para clasificar datos de entrenamiento

- **Information Gain:** reducción esperada de entropía por partir ejemplos basados en ese **atributo**.
- Gini Gain: reducción de índice Gini por partir ejemplos basados en ese atributo

# ¿Qué atributo es el mejor?

Opción 1: Information Gain

**Entropía** de una muestra S (ejemplos de entrenamiento)

Entropy (S) = 
$$\sum_{c \in Clases} -p_c \log_2 p_c$$

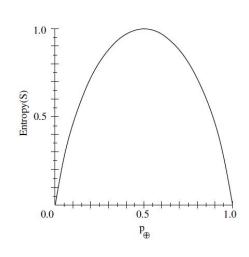
pc: proporción de instancias de S pertenecientes a clase c

Entropía mide impureza de S

Para el caso binario (c=2)

Entropy(S) = 
$$-p_{\oplus} \log_2 p_{\oplus} - p_{\ominus} \log_2 p_{\ominus}$$

En ej: Entropy([9+, 5-]) = - (9/14)  $\log_2 (9/14)$  - (5/14)  $\log_2 (5/14)$  =0.940



# ¿Qué atributo es el mejor?

### Opción 1: Information Gain

 Reducción de entropía de la muestra S causada por particionar ejemplos de acuerdo a un atributo A

```
Gain (S, A) = Entropy (S) - \sum_{|S|} \frac{|S_v|}{|S|} ntropy (S<sub>v</sub>)
                                 v \in Valores(A)
Valores (A): posibles valores del atributo A
S_v = \{ s \in S | A(s) = v \}
                     S: [9⊕, 5⊖]
                                                        S: [9\oplus, 5\oplus]
                     E = 0.940
                                                        E = 0.940
                    Humedad
                                                          Viento
                            Normal
                   Alta
                                                      Débil Fuerte
             [3\oplus, 4\ominus] [6\oplus, 1\ominus] E = 0.592
                                                                  [3⊕, 3⊖]
                                                                  F = 1.00
```

Gain Ratio (otra métrica). Corrige preferencia de Information
 Gain sobre atributos con muchos valores.

3) **Gain(S, Humedad)** = Entropy(S) - (7/14) Entropy(S<sub>Alta</sub>) - (7/14)
Entropy(S<sub>Normal</sub>) = 0.940 - (7/14)
0.985 - (7/14) 0.592 = **0.151** 

**Gain(S, Viento)** = Entropy(S) - (8/14) Entropy(S<sub>Débil</sub>) - (6/14) Entropy(S<sub>Fuerte</sub>) = 0.940 - (8/14) 0.811 - (6/14) 1 = **0.048** 

28

# ¿Qué atributo es el mejor? Opción 2: Gini

Se mide impureza de la muestra (conjunto de entrenamiento)

- Impureza Gini
  - o Impureza de S:

$$Gini(S) = 1 - \sum_{c \in Clases} \left(\frac{|S_c|}{|S|}\right)^2$$

S<sub>c</sub>: conjunto de instancias que pertenecen a clase c

Reducción de impureza de S, respecto a atributo A

$$GiniGain(S, A) = Gini(S) - \sum_{v \in Valores(A)} \frac{|S_v|}{|S|} Gini(S_v)$$

Valores(A) es el conjunto de valores posibles del atributo A.

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

Se elige atributo con mayor GiniGain

# Construcción usando Information Gain

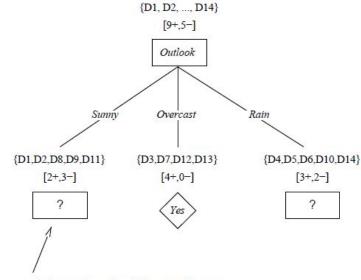
En nuestro ejemplo

Gain (S, Cielo) = 0.246

Gain (S, Humedad) = 0.151

Gain (S, Viento) =0.048

Gain (S, Temperatura) = 0.029



Which attribute should be tested here?

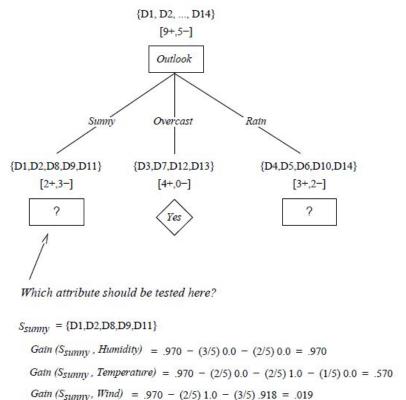
```
S_{Sumny} = \{D1,D2,D8,D9,D11\}

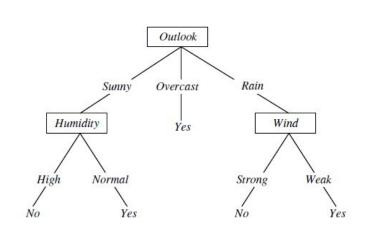
Gain (S_{Sumny}, Humidity) = .970 - (3/5) 0.0 - (2/5) 0.0 = .970

Gain (S_{Sumny}, Temperature) = .970 - (2/5) 0.0 - (2/5) 1.0 - (1/5) 0.0 = .570

Gain (S_{Sumny}, Wind) = .970 - (2/5) 1.0 - (3/5) .918 = .019
```

# Construcción usando Information Gain





# Búsqueda en espacio de hipótesis

- Espacio de hipótesis: completo (a diferencia de Algoritmo de Eliminación de candidatos -CEA-)
- **Salida:** una sola hipótesis (a diferencia de CEA)
- No se hace backtracking: puede haber óptimos locales no globales
- La búsqueda se hace en base a estadísticas: robusto a errores en datos de entrenamiento
- Bias inductivo: se prefiere el árbol más corto

# Sesgo inductivo

Se denomina sesgo inductivo de un algoritmo de AA al conjunto de afirmaciones que el algoritmo utiliza para construir un modelo.

### Incluye:

- forma de las hipótesis (número y tipo de parámetros)
- características de funcionamiento del algoritmo (cómo recorre el espacio de hipótesis hasta elegir un único modelo)

# Sesgo inductivo (bias inductivo)

Hay muchos posibles árboles para un conjunto de datos de entrenamiento. ¿Cómo se elige una de las hipótesis consistentes por sobre las otras?

- Preferencia por:
  - árboles más bajos y
  - o con atributos con Information Gain alto cerca de la raíz
- Tiene sesgo de preferencia: prefiere una hipótesis por sobre otras.
- Navaja de Occam: se prefiere la hipótesis más corta que satisface a los datos

# Navaja de Occam/Ockham (Occam's razor)

Ockham. Filósofo y teólogo (1287-1347)

- "Pluralitas non est ponenda sine necessitate." La pluralidad no debe postularse sin necesidad
- Occam's razor: Preferir la hipótesis más simple que se ajuste a los datos.
   (Las soluciones simples tienen mayor probabilidad de ser correctas que las complejas.)
- No es un principio irrefutable.

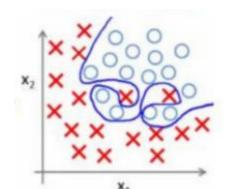
# Funes el memorioso - Jorge L. Borges, Ficciones

### **Fragmentos**

"Era casi incapaz de ideas generales, platónicas. No sólo le costaba comprender que el símbolo genérico 'perro' abarcara tantos individuos dispares de diversos tamaños y diversa forma; le molestaba que el perro de las tres y catorce (visto de perfil) tuviera el mismo nombre que el perro de las tres y cuarto (visto de frente)."

"Había aprendido sin esfuerzo el inglés, el francés, el portugués, el latín. Sospecho, sin embargo, que no era muy capaz de pensar. Pensar es olvidar diferencias, es generalizar, abstraer."

## Overfitting - Sobreajuste



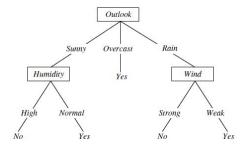
Fernando Berzal, DECSAI, Universidad de Granada

En árboles de decisión, hay sobreajuste cuando el árbol es "demasiado" profundo

¿Qué pasa si hay descripciones exactas de instancias únicas y aisladas?

Ej, si agregamos este caso erróneo a nuestro árbol

15. (Sol, Calor, Normal, Fuerte) No



## Overfitting

Considerar el error de una hipótesis o modelo h sobre:

- instancias de entrenamiento (D): error<sub>D</sub>(h)
- todas las instancias posibles (X): error<sub>x</sub>(h)

**Definición:** Una **hipótesis h sobreajusta** a los datos de entrenamiento **si existe** otra hipótesis **h'**, tal que:

$$error_{D}(h) < error_{D}(h') y$$
  
 $error_{x}(h) > error_{x}(h')$ 

Es decir, h es mejor sobre cjto. entrenamiento, pero h' generaliza mejor

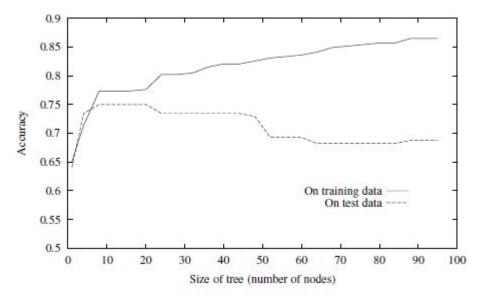
## Overfitting

#### **Datos:**

- entrenamiento
- test (independiente)

### **Accuracy (exactitud):**

(TP+TN)/(TP+TN+FP+FN)



Machine Learning, Tom M.Mitchel, McGrawHil, 1997

# Overfitting en Árboles de Decisión - Cómo evitarlo

#### Soluciones:

- detener crecimiento del árbol antes de que clasifique perfectamente a los datos
- hacer crecer el árbol entero, luego podar (post-prune)

# Overfitting en Árboles de Decisión - Cómo evitarlo

#### Cuál es el tamaño correcto del árbol?

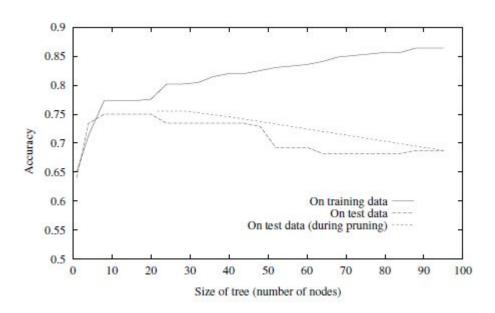
- -Conjuntos de entrenamiento y validación: usar otros datos distintos al entrenamiento para evaluar utilidad de post-pruning
- -Conjunto de Entrenamiento y test estadístico: usar todos los datos para entrenamiento y aplicar test estadístico para evaluar si expandir o podar mejora resultados con datos de entrenamiento
- -Minimum Description Length (MDL): uso de medida de complejidad basada en ejemplos de entrenamiento y árbol de decisión. Se detiene crecimiento al minimizarse.

## Reduced Error Pruning

Uso de conjunto de validación. Se considera que cada nodo es candidato de pruning.

- 1. Particionar datos en conjuntos de entrenamiento y validación
- 2. Repetir hasta que poda sea perjudicial
  - a. Evaluar impacto (en conjunto de validación) de podar cada posible nodo (y todos los de abajo). (Remover todo el subárbol, convertirlo en hoja. Asignación de clasificación más habitual según conjunto de entrenamiento)
  - b. Remover aquél que mejora el accuracy del validation set (greedy o ansioso)

## Reduced Error Pruning



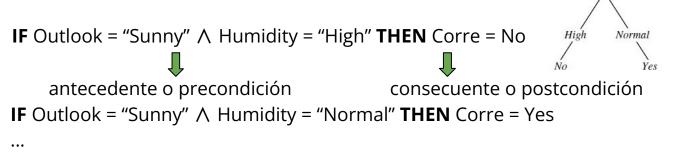
Machine Learning, Tom M.Mitchel, McGrawHil, 1997

## Rule Post Pruning

- Inferir el árbol, de forma tal que satisfaga el conjunto de entrenamiento (con posible sobreajuste)
- 2. Convertir el árbol en conjunto de reglas (una regla para cada camino desde raíz hasta la hoja)
- 3. Podar cada regla independientemente de las demás. Removiendo precondiciones que mejoran la accuracy
- Ordenar las reglas de 3 de acuerdo a su accuracy estimada. Usarlas en ese orden al estimar nuevos datos.

## Rule Post Pruning

2. Conversión de árbol a reglas



Usado por C4.5 (Quinlan 1993)

3. si Accuracy de eliminar algún antecente mejora, se remueve se prueba sacando el 1ro y el 2do

Se puede usar validation set o training set (con un estimador pesimista para compensar el hecho de usar training set)

Outlook

Overcast

Humidity

Rain

Wind

Weak

### Contenido

- Clasificación
- Frontera
- Árboles de decisión
  - Algoritmo
    - criterio de selección
    - sesgo inductivo
    - Occam's Razor
    - sobreajuste
    - poda
  - O Adecuación a valores continuos
  - Valores faltantes
  - Atributos con costo
  - Resumen
- Ensambles

### Atributos de valores continuos

Si tenemos un atributo A numérico, lo **discretizamos**. Definimos nuevos atributos discretos que particionan los valores de A en intervalos discretos.

Buscamos un umbral t y discriminamos en función de si A < t.

### ¿Cómo elegir t?:

- 1) se ordenan instancias de menor a mayor A
- 2) se busca forma de partir la lista, de forma tal que maximice la reducción de impureza (umbrales posibles: 6,11,25,33), ej. (22+28)/2 ¿Temperatura < 25?

Temperatura	3	5	7	15	22	28	32	34
¿Corre?	Sí	Sí	No	Sí	Sí	No	No	Sí

True False
Sí No

Existen extensiones para particionar atributos contínuos en múltiples intervalos

### Contenido

- Clasificación
- Frontera
- Árboles de decisión
  - Algoritmo
    - criterio de selección
    - sesgo inductivo
    - Occam's Razor
    - sobreajuste
    - poda
  - Adecuación a valores continuos
  - Valores faltantes
  - Atributos con costo
  - Resumen
- Ensambles

### Atributos con valores faltantes

Ej: faltan datos de algunos atributos de algunas de nuestras instancias

- Quiero definir Gain (S, A) en nodo n para ver si A es el mejor atributo a testear.
   Qué pasa si en instancia <x,c(x)> el valor A(x) es desconocido.
- Se estima el valor faltante en base a otros ejemplos para los cuáles el atributo tiene un valor.

#### **Posibles estrategias:**

- asignar el valor más común entre los datos de entrenamiento.
- asignar el valor más común entre los datos de entrenamiento que tienen la misma clasificación (c(x))
- asignar una probabilidad basada en frecuencias observadas en valores de A en nodo n
  - $\circ$  Ej. en 6 ejemplos, A=1 y en 4 ejemplos A=0, luego P(A(x) = 1) = 0.6 y P(A(x) = 0) = 0.4

### Contenido

- Clasificación
- Frontera
- Árboles de decisión
  - Algoritmo
    - criterio de selección
    - sesgo inductivo
    - Occam's Razor
    - sobreajuste
    - poda
  - Adecuación a valores continuos
  - Valores faltantes
  - Atributos con costo
  - Resumen
- Ensambles

### Atributos con costo

#### Ej. Estudios médicos

Atributo	Costo	Atributo	Costo	
Temperatura	x	ResultadoBiopsia	200 x	
Pulso	x	ResultadoLaboratorio	50 x	

Distintos costos: económicos y confort del paciente.

- Preferimos árboles que usen atributos de bajo costo usando los de alto costo sólo cuando es necesario.
- Modificación ID3: se usa el término de costo en medida selección de atributo
  - Gain (S,A) / costo (A) (se prefieren atributos de menor costo)

### Contenido

- Clasificación
- Frontera
- Árboles de decisión
  - Algoritmo
    - criterio de selección
    - sesgo inductivo
    - Occam's Razor
    - sobreajuste
    - poda
  - Adecuación a valores continuos
  - Valores faltantes
  - Atributos con costo
  - Resumen
- Ensambles

### ID-3, C4.5, CART...

- Criterio de selección de atributos (splitting criteria)
  - o ID-3: Information Gain.
  - C4.5: Gain Ratio
  - o CART: Gini
  - CHAID: Chi cuadrado
- Tipo de valores
  - ID-3: Categóricos
  - C4.5 y CART: Categóricos y numéricos
- Valores faltantes (missing values)
  - ID-3 no los trata
  - C4.5, CART los tratan
- Estrategia de poda
  - o ID-3: sin poda
  - C4.5: Error-based prunning

### Resumen

- aprendizaje supervisado.
- para clasificación y regresión
- fáciles de usar y de entender
- buen método exploratorio para ver qué atributos son importantes
- sesgo, overfitting

### Ventajas:

- fácil visualización e interpretación
- se pueden usar atributos categóricos, continuos, binarios

### **Desventajas:**

- pueden tener sobreajuste
- suelen necesitarse ensambles de árboles para tener mejor performance

## Bibliografía

### Capítulos de libros:

- .Mitchell, Cap. 3
- .Alpaydin, Cap. 9
- .Marsland, Cap. 12

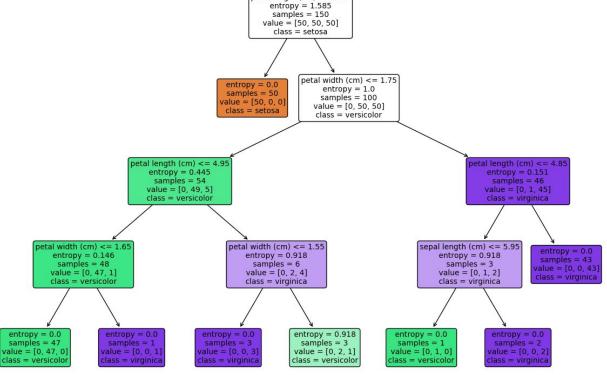
#### **Artículos:**

- . Induction of Decision Trees . Quinlan. http://hunch.net/~coms-4771/quinlan.pdf
- . Simplifying Decision Trees. Quinlan.

https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0020737387800536

## Ejemplo con Iris





petal length (cm) <= 2.45





# JACARANDÁ



CEIBO



PINDÓ



EUCALIPTUS

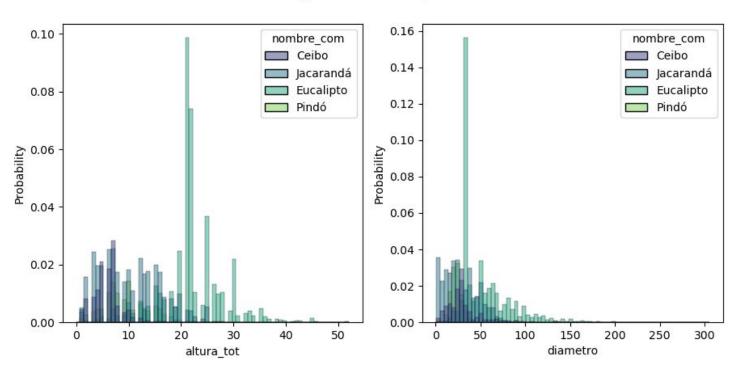
# El dataframe

Está en el campus

Index	altura_tot	diametro	inclinacio	nombre_com
2319	17	45	9	Jacarandá
2320	2	9	0	Ceibo
2321	6	15	0	Pindó
2322	12	42	0	Jacarandá
2323	12	33	10	Jacarandá
2324	12	48	4	Jacarandá
2325	12	39	Θ	Jacarandá
2326	18	30	4	Pindó
2327	17	30	3	Pindó
2328	12	20	0	Pindó
2329	20	56	Θ	Eucalipto
2330	27	70	Θ	Eucalipto
2331	16	37	7	Jacarandá
2332	15	28	0	Jacarandá

### Histogramas

#### Histogramas de altura y diámetro



### Ejercicio

- + Graficar histogramas de los atributos
- + Graficar scatterplot diámetro-altura con colores por especie
- + Entrenar un árbol de decisión para clasificar árboles
  - probar con distintas profundidades
  - probar con criterio de información y de gini
  - probar no utilizar todos los atributos
- + En cada caso graficar el árbol de decisión y registrar la exactitud
- + Tengo un árbol que mide 22 m, diámetro 56 e inclinación 8° ¿cuál especie es?