Máster en Bioinformática
aplicada a la Medicina Personalizada y la Salud
2023/24

Supervised Learning Algorithms

Master Bioinfo ISCIII

Daniel Glez-Peña &
Hugo López-Fernández &
Alba Nogueira-Rodríguez
@SINGgroup
www.sing-group.org

K-Nearest Neighbors

K-Nearest Neighbors

- Para cada muestra a clasificar:
  1) Se buscan las K muestras más parecidas (utilizando alguna medida de distancia).
  2) Se realiza una predicción:
     a) En clasificación: se asigna a la nueva muestra la clase mayoritaria entre las K más parecidas.
     b) En regresión: se asigna a la nueva muestra el valor medio entre las K más parecidas.

K-Nearest Neighbors

- KNN es una de las técnicas más simples: no se ajusta un modelo (fase de entrenamiento).
- Sin embargo, es necesario ajustar los parámetros del algoritmo para obtener un buen resultado:
  - K: número de vecinos a considerar.
  - Función de distancia empleada.

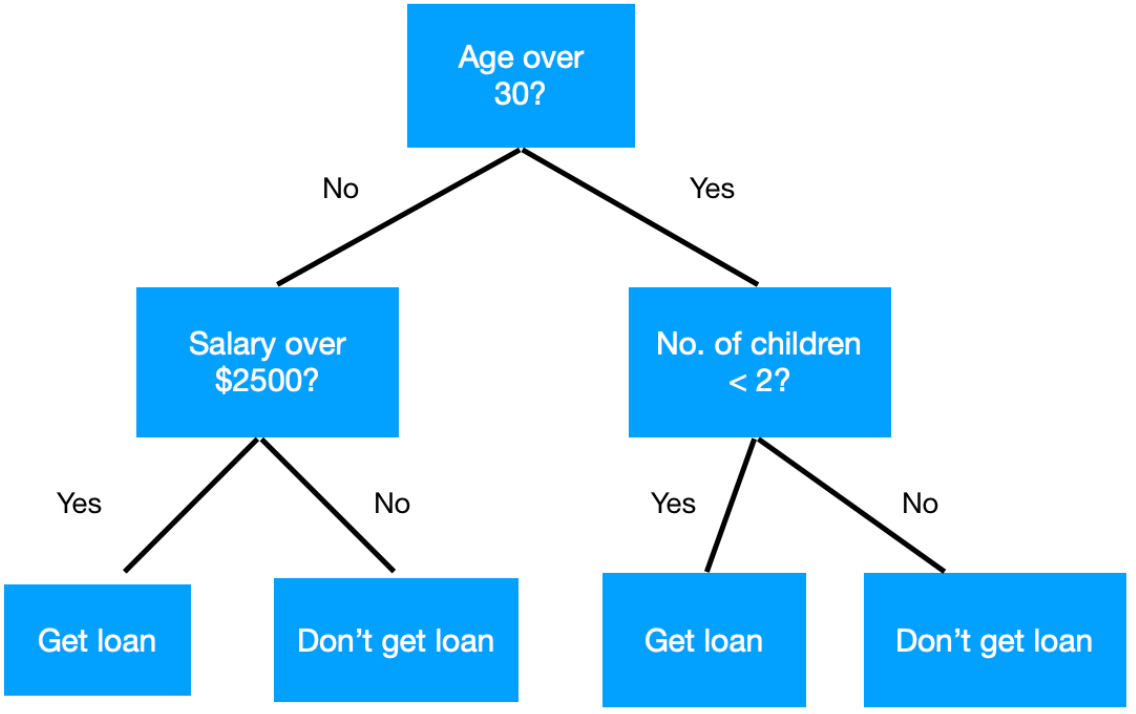
- Importante: es necesario considerar la necesidad de escalar las variables (al igual que en otras técnicas basadas en el cálculo de distancias).

K-Nearest Neighbors

- Algunas librerías ofrecen una probabilidad entre 0 y 1 de que una muestra pertenezca a una clase:
  - Esta probabilidad está basada en el porcentaje de los K vecinos cercanos que pertenecen a dicha clase.
- Esto permite establecer otros cortes distintos a 0.5 (clase mayoritaria) para seleccionar la clase a la que pertenece una muestra.
  - Por ejemplo: si tratamos de identificar una clase “rara” (poco prevalente), podemos establecer un corte mucho menor.

Decision Trees

Decision Trees



Fuente: https://eloquentarduino.github.io/2020/10/decision-tree-random-forest-and-xgboost-on-arduino/

Decision Trees

- El árbol de decisión se infiere mediante un proceso de particionado recursivo (*CART: Classification and Regression Tree*):
  - Dado un conjunto de muestras A, el objetivo del algoritmo es partirlo en A_1 y A_2 utilizando una variable X_i y un valor específico de dicha variable.

Algoritmo de particionado recursivo (CART)

1. Para cada posible variable X_i:
   a) Para cada posible valor s_j de X_i:
      i. Dividir A en dos conjuntos: uno con las muestras con valores < que s_j y el resto en otra.
      ii. Medir la homogeneidad de las clases en cada partición.
   b) Seleccionar el valor de s_j que produce la partición más homogénea.
2. Seleccionar la variable X_i y el valor de partición s_j que produce la partición más homogénea.
3. Repetir los pasos 1 y 2 para cada nueva partición.

Medidas de homogeneidad o impuridad

- Gini impurity:
  - En un nodo concreto, mide cómo de probable es clasificar mal una muestra de entrenamiento si se etiqueta al azar en base a la distribución de etiquetas en la partición del nodo.
  - Por ejemplo: si la mitad de muestras son del grupo A y la mitad del B, hay una probabilidad del 50% de clasificar mal una muestra si se etiqueta al azar.

Medidas de homogeneidad o impuridad

- Gini impurity:
  - Toma un valor entre 0 (totalmente puro) y 0.5 (totalmente impuro).
  - Vale 0 (totalmente puro) cuando solo hay un posible grupo en un nodo.
  - Este índice representa la probabilidad de clasificar mal una nueva muestra en un nodo determinado del árbol, basado en los datos de entrenamiento.

Medidas de homogeneidad o impuridad

- Information Gain:
  - Basada en “Information Entropy”.
  - https://victorzhou.com/blog/information-gain/

Overfitting

- El algoritmo puede crear particiones hasta que en cada hoja solo queden muestras de la misma clase.
- Se habrá adaptado perfectamente a las muestras de entrenamiento pero es posible que las reglas no sean flexibles y el modelo no tenga la capacidad de generalizar ante nuevas muestras.

- Las estrategias para evitar el overfitting en los árboles de decisión pasan por evitar que el árbol crezca demasiado.

Overfitting

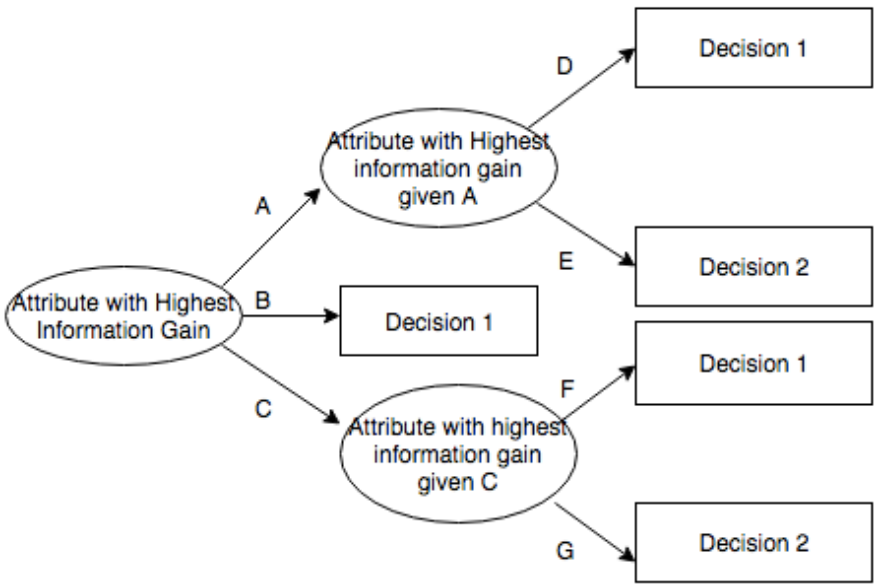
- Evitar el overfitting:
  - Establecer un valor máximo para la profundidad del árbol.
  - Establecer un valor mínimo de muestras necesarias para hacer una división.
  - Establecer un valor mínimo en la reducción de la impuridad para poder realizar una partición.

Decision Trees

- Ventajas:
  - Son modelos “de caja blanca” porque proporcionan un conjunto de reglas de clasificación interpretables por un humano.
  - Se pueden representar gráficamente.
  - Permiten extraer o identificar las variables más relevantes para la clasificación de interés.

Decision Trees

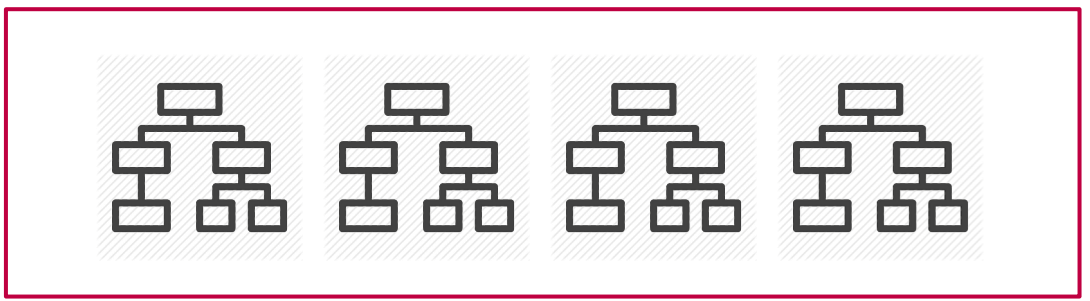
- Otros algoritmos para crear árboles de decisión:
  - ID3 (Iterative Dichotomiser 3)
  - C4.5 (sucesor de ID3)



Decision Trees

- ¿Y si en lugar de utilizar un único árbol de decisión utilizamos muchos y hacemos una votación?

Decision Tree



Random Forest

Random Forest

Random Forest

- Ensemble: hacer una predicción utilizando un conjunto de modelos.

- Bagging: técnica para crear una colección de modelos utilizando muestreos *bootstraping* de los datos disponibles.
  - Bagging = Bootstrap aggregation.

- Random Forest: aplicación de bagging a árboles de decisión.
  - Random Forest = Bagged decision trees.

Random Forest

1. Tomar una muestra bootstrap (con reemplazamiento) de los datos de entrenamiento.
2. Para hacer la primera partición, tomar una muestra aleatoria (sin reemplazamiento) de $p < P$ variables predictoras.
3. Para cada variable muestreada, aplicar el algoritmo de particionado recursivo para árboles de decisión.
4. Seleccionar la variable que produzca la partición más homogénea.

Random Forest

5. Repetir los pasos 2 a 4 para las siguientes particiones hasta que el árbol de decisión esté completo.
   –> En cada partición se considera un subconjunto aleatorio de variables diferente.
6. Cuando se ha completado el árbol, se vuelve al paso 1 para crear un nuevo árbol de decisión.

Out-of-bag error

- Las muestras no utilizadas para construir un árbol de decisión son un *test* set (*out-of-bag samples*).
- Cálculo del error OOB:
  - Para cada muestra, obtener una predicción utilizando los árboles en los que dicha muestra no ha sido utilizada para crear el árbol.
  - La proporción de muestras OOB que han sido clasificadas incorrectamente es el error OOB.

Random Forest

- Producen predicciones más acertadas que los árboles de decisión.
- Se pierde la interpretabilidad de los árboles de decisión porque no existe un único conjunto de reglas.
- Aún así, es posible medir la importancia de las variables:
  - Reducción en la tasa de acierto del modelo si se permutan los valores de una variable. Para hacer esta estimación se utilizan las muestras OOB.
  - Reducción media en la Gini impurity de cada variable.