## **Decision Trees**

Ali Akbar Septiandri

Universitas Al-Azhar Indonesia aliakbars@live.com

March 20, 2017

# Selayang Pandang

- 1 Pendahuluan
- 2 Menghitung Ketakmurnian
- 3 Evaluasi
- 4 Evaluasi (Lanjutan) Validasi dan Pengujian Di Luar Akurasi

#### Bahan Bacaan

- Witten, I. H., Frank, E., Hall, M. A., & Pal, C. J. (2016). Data Mining: Practical machine learning tools and techniques. Morgan Kaufmann. (Chapter 6. Trees and rules)
- Murphy, K. P. (2012). Machine learning: a probabilistic perspective. MIT press. (Chapter 16. Adaptive basis function models)
- 3 Tan, P. N. (2006). Introduction to data mining. Pearson Education India. (Chapter 4. Classification)
- Besbes, A. (2016, August 10). How to score 0.8134 in Titanic Kaggle Challenge [Blog post]. Retrieved from http://ahmedbesbes.com/ how-to-score-08134-in-titanic-kaggle-challenge. html

# Pendahuluan

## Data Cuaca

| Outlook  | Temp | Humidity | Windy | Play |
|----------|------|----------|-------|------|
| Sunny    | Hot  | High     | False | No   |
| Sunny    | Hot  | High     | True  | No   |
| Overcast | Hot  | High     | False | Yes  |
| Rainy    | Mild | High     | False | Yes  |
| Rainy    | Cool | Normal   | False | Yes  |
| Rainy    | Cool | Normal   | True  | No   |
| Overcast | Cool | Normal   | True  | Yes  |
| Sunny    | Mild | High     | False | No   |
| Sunny    | Cool | Normal   | False | Yes  |
| Rainy    | Mild | Normal   | False | Yes  |
| Sunny    | Mild | Normal   | True  | Yes  |
| Overcast | Mild | High     | True  | Yes  |
| Overcast | Hot  | Normal   | False | Yes  |
| Rainy    | Mild | High     | True  | No   |
|          |      |          |       |      |

Prediksi apakah John akan bermain tenis

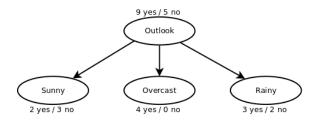
# Divide & Conquer

- 1 Bagi menjadi subsets
- 2 Apakah pembagiannya murni (semua "ya" atau semua "tidak")?
- 3 Jika ya, berhenti
- 4 Jika tidak, bagi lagi (rekursif)

## Data Cuaca

| Temp | Humidity                                                | Windy                                                                                                                                                                                 | Play                                                                                                                                                                                                                                                                                |
|------|---------------------------------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Hot  | High                                                    | False                                                                                                                                                                                 | No                                                                                                                                                                                                                                                                                  |
| Hot  | High                                                    | True                                                                                                                                                                                  | No                                                                                                                                                                                                                                                                                  |
| Hot  | High                                                    | False                                                                                                                                                                                 | Yes                                                                                                                                                                                                                                                                                 |
| Mild | High                                                    | False                                                                                                                                                                                 | Yes                                                                                                                                                                                                                                                                                 |
| Cool | Normal                                                  | False                                                                                                                                                                                 | Yes                                                                                                                                                                                                                                                                                 |
| Cool | Normal                                                  | True                                                                                                                                                                                  | No                                                                                                                                                                                                                                                                                  |
| Cool | Normal                                                  | True                                                                                                                                                                                  | Yes                                                                                                                                                                                                                                                                                 |
| Mild | High                                                    | False                                                                                                                                                                                 | No                                                                                                                                                                                                                                                                                  |
| Cool | Normal                                                  | False                                                                                                                                                                                 | Yes                                                                                                                                                                                                                                                                                 |
| Mild | Normal                                                  | False                                                                                                                                                                                 | Yes                                                                                                                                                                                                                                                                                 |
| Mild | Normal                                                  | True                                                                                                                                                                                  | Yes                                                                                                                                                                                                                                                                                 |
| Mild | High                                                    | True                                                                                                                                                                                  | Yes                                                                                                                                                                                                                                                                                 |
| Hot  | Normal                                                  | False                                                                                                                                                                                 | Yes                                                                                                                                                                                                                                                                                 |
| Mild | High                                                    | True                                                                                                                                                                                  | No                                                                                                                                                                                                                                                                                  |
|      | Hot Hot Hot Cool Cool Mild Cool Mild Mild Mild Mild Hot | Hot High Hot High Hot High Mild High Cool Normal Cool Normal Mild High Cool Normal Mild High Mild High Mormal Mild Normal Mild Normal Mild Normal Mild Normal Mild Normal Mild Normal | Hot High False Hot High True Hot High False Mild High False Cool Normal False Cool Normal True Cool Normal True Mild High False Cool Normal True Mild High False Mild Normal False Mild Normal False Mild Normal True Mild High True Mild High True Mild High True Hot Normal False |

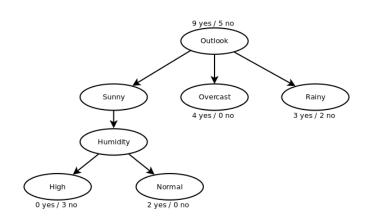
# Pohon Keputusan



## Data Cuaca

| Outlook | Temp | Humidity | Windy | Play |
|---------|------|----------|-------|------|
| Sunny   | Hot  | High     | False | No   |
| Sunny   | Hot  | High     | True  | No   |
| Sunny   | Mild | High     | False | No   |
| Sunny   | Cool | Normal   | False | Yes  |
| Sunny   | Mild | Normal   | True  | Yes  |

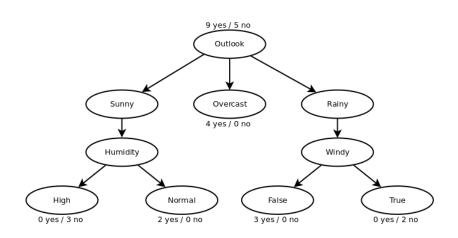
# Pohon Keputusan



## Data Cuaca

| Outlook | Temp | Humidity | Windy | Play |
|---------|------|----------|-------|------|
| Rainy   | Mild | High     | False | Yes  |
| Rainy   | Cool | Normal   | False | Yes  |
| Rainy   | Cool | Normal   | True  | No   |
| Rainy   | Mild | Normal   | False | Yes  |
| Rainy   | Mild | High     | True  | No   |

# Pohon Keputusan



## Atribut Pembagi

- Bagaimana menghitung "kemurnian" dari hasil pembagian?
- Bagaimana kalau tidak ada hasil yang langsung murni?
- Atribut mana yang harus didahulukan?

# Menghitung Ketakmurnian

## Entropy

#### Formula

$$H(S) = -p_{(+)}log_2p_{(+)} - p_{(-)}log_2p_{(-)}$$

dengan S adalah subset dan  $p_{(+)}$  dan  $p_{(-)}$  adalah persentase (probabilitas) contoh positif atau negatif di subset S

#### Generalisasi

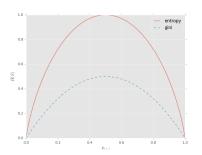
$$H(S) = -\sum_{c} p_{c} log_{2} p_{c}$$

### Interpretasi

Asumsikan  $X \in S$ . Berapa bits yang dibutuhkan untuk menentukan X bernilai positif atau negatif?



## Entropy



#### Dua contoh kasus:

- Impure (3 yes / 3 no)  $H(S) = -\frac{3}{6}log_2\frac{3}{6} - \frac{3}{6}log_2\frac{3}{6} = 1$
- Pure (4 yes / 0 no)  $H(S) = -\frac{4}{4}log_2\frac{4}{4} - \frac{0}{4}log_2\frac{0}{4} = 0$

Catatan:  $0log_20 = 0$  pada perhitungan entropy



# Gini Impurity

#### Formula

$$\mathit{Gini}(S) = 1 - \sum_{c} p_{c}^{2}$$

- Digunakan dalam algoritma classification and regression tree (CART)
- Interpretasi: Seberapa sering suatu objek akan salah diklasifikasikan jika dilakukan klasifikasi acak

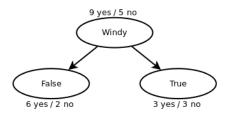
## Information Gain

- Kita ingin sebanyak-banyaknya objek dalam pure sets
- Melihat perbedaan entropy sebelum dan sesudah dilakukan pemisahan

$$Gain(S, A) = H(S) - \sum_{V \in Values(A)} \frac{|S_V|}{|S|} H(S_V)$$

dengan V adalah nilai yang mungkin dari A dan  $S_V$  adalah subset di mana  $X_A = V$ 

### Contoh Information Gain



$$H(S) = 0.94, H(S_{False}) = 0.81, H(S_{True}) = 1.0$$
  $Gain(S, Windy) = 0.94 - \frac{8}{14}0.81 - \frac{6}{14}1.0 = 0.049$ 

# Masalah dengan Information Gain

- Bias terhadap atribut dengan nilai yang banyak
- Tidak dapat berfungsi untuk nilai atribut yang baru
- Solusi: Paksa binary splits (CART), atau
- Gunakan GainRatio (C4.5)

$$SplitEntropy(S, A) = -\sum_{V \in Values(A)} \frac{|S_V|}{|S|} log_2 \frac{|S_V|}{|S|}$$

$$GainRatio(S, A) = \frac{Gain(S, A)}{SplitEntropy(S, A)}$$

untuk memberikan penalti untuk atribut dengan nilai yang banyak



## Atribut Kontinu

• Intinya, hanya perlu menentukan threshold

#### Atribut Kontinu

- Intinya, hanya perlu menentukan threshold
- Masalahnya, perbandingan tiap elemen dengan tiap elemen lainnya akan menghasilkan kompleksitas  $O(n^2)$

#### Atribut Kontinu

- Intinya, hanya perlu menentukan threshold
- Masalahnya, perbandingan tiap elemen dengan tiap elemen lainnya akan menghasilkan kompleksitas  $O(n^2)$
- Solusi: Urutkan (kompleksitas  $O(n \log n)$ ), lalu ambil titik tengah antara tiap dua nilai

# Evaluasi

## Error & Akurasi

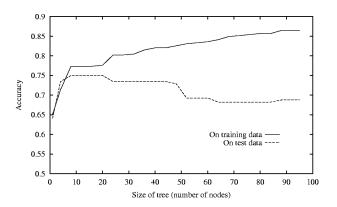
Setiap hasil klasifikasi akan menghasilkan suatu confusion matrix

|       | Ya | Tidak |
|-------|----|-------|
| Ya    | TP | FN    |
| Tidak | FP | TN    |

$$\begin{aligned} \textit{Error} &= \frac{\textit{FP+FN}}{\textit{TP+TN+FP+FN}} \\ \textit{Akurasi} &= \left(1 - \textit{error}\right) = \frac{\textit{TP+TN}}{\textit{TP+TN+FP+FN}} \end{aligned}$$

Bagaimana cara meminimalkan error (memaksimalkan akurasi)?

## Overfitting



Gambar: Overfitting pada decision trees (Mitchell, 1997)

# Menghindari Overfitting

 Hentikan pemisahan saat perubahannya tidak signifikan (pre-pruning)

# Menghindari Overfitting

- Hentikan pemisahan saat perubahannya tidak signifikan (pre-pruning)
- Pisahkan sampai akhir, lalu potong pohonnya (post-pruning)
- Sub-tree replacement pruning (Witten, et al., 2016; 6.1)

### Occam's Razor

#### Definisi

Given two models with the same generalization errors, the simpler model is preferred over the more complex model.

#### Random Forest

- Membuat K pohon keputusan yang berbeda:
  - memilih subset acak  $S_r$
  - membuat pohon keputusan penuh  $T_r$  (tanpa pruning)
  - repetisi untuk r = 1...K
- Jika diberikan data baru X:
  - klasifikasi dengan setiap pohon  $T_1...T_K$
  - Gunakan majority vote
  - Alternatif: weighted average
- Salah satu metode yang paling efektif (state-of-the-art)

# XGBoost (non-examinable)

Chen, T., & Guestrin, C. (2016, August). XGBoost: A scalable tree boosting system. In Proceedings of the 22nd ACM SIGKDD International Conference on Knowledge Discovery and Data Mining (pp. 785-794). ACM.

### Pros & Cons

#### Pros

- mudah diinterpretasi
- dapat menangani missing value
- sangat cepat saat klasifikasi data baru

#### Cons

- pembagian hanya sejajar sumbu
- greedy, mungkin tidak mencapai solusi optimal global

# Evaluasi (Lanjutan)

## Training, Validation, Testing sets

- Data latih: konstruksi classifier
- Data validasi: memilih algoritma dan parameter tuning
- Data uji: mengestimasi error rate secara umum
- Catatan: Bagi datanya secara acak!

### Cross-validation

- Datanya kadang tidak cukup banyak untuk dibagi!
- Ide: latih dan uji secara bergantian
- Umumnya: 10-fold cross-validation

#### Leave-one-out

n-fold cross-validation

#### Pros

Menghasilkan classifier terbaik

#### Cons

- Ongkos komputasi tinggi
- ullet Kelas tidak seimbang o stratification

## Unbalanced Dataset

• e.g. Prediksi apakah akan terjadi gempa atau tidak!

#### Unbalanced Dataset

- e.g. Prediksi apakah akan terjadi gempa atau tidak!
- Jika selalu diklasifikan sebagai "tidak", akurasi akan maksimal, error akan minimal.

#### Unbalanced Dataset

- e.g. Prediksi apakah akan terjadi gempa atau tidak!
- Jika selalu diklasifikan sebagai "tidak", akurasi akan maksimal, error akan minimal.
- Solusi: Gunakan metrik lain

## Misses & False Alarms

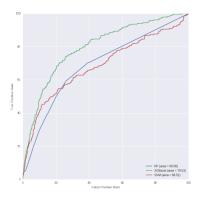
- False Alarm rate = False Positive rate = FP/(FP + TN)
- Miss rate = False Negative rate = FN/(TP + FN)
- Recall = True Positive rate = Sensitivity = TP/(TP + FN)
- Precision = TP/(TP + FP)
- Specificity = 1 FPR = TN/(TN + FP)
- Harus dilaporkan berpasangan!

# Utility & Cost

- Terkadang perlu satu angka untuk pembanding antarmodel
- **Detection cost**:  $cost = c_{FP} \times FP + c_{FN} \times FN$
- **F-measure**:  $F_1 = 2 \times \frac{precision \times recall}{precision + recall}$

## **ROC Curves**

Receiver Operating Characteristic: TPR vs FPR dengan perubahan threshold



Menghitung Area Under the Curve (AUC) sebagai pengganti akurasi



# Terima kasih