UNIVERSIDADE FEDERAL DO CEARÁ

DEPARTAMENTO DE COMPUTAÇÃO

Aprendizagem de Máquina

César Lincoln Cavalcante Mattos

2020

Agenda

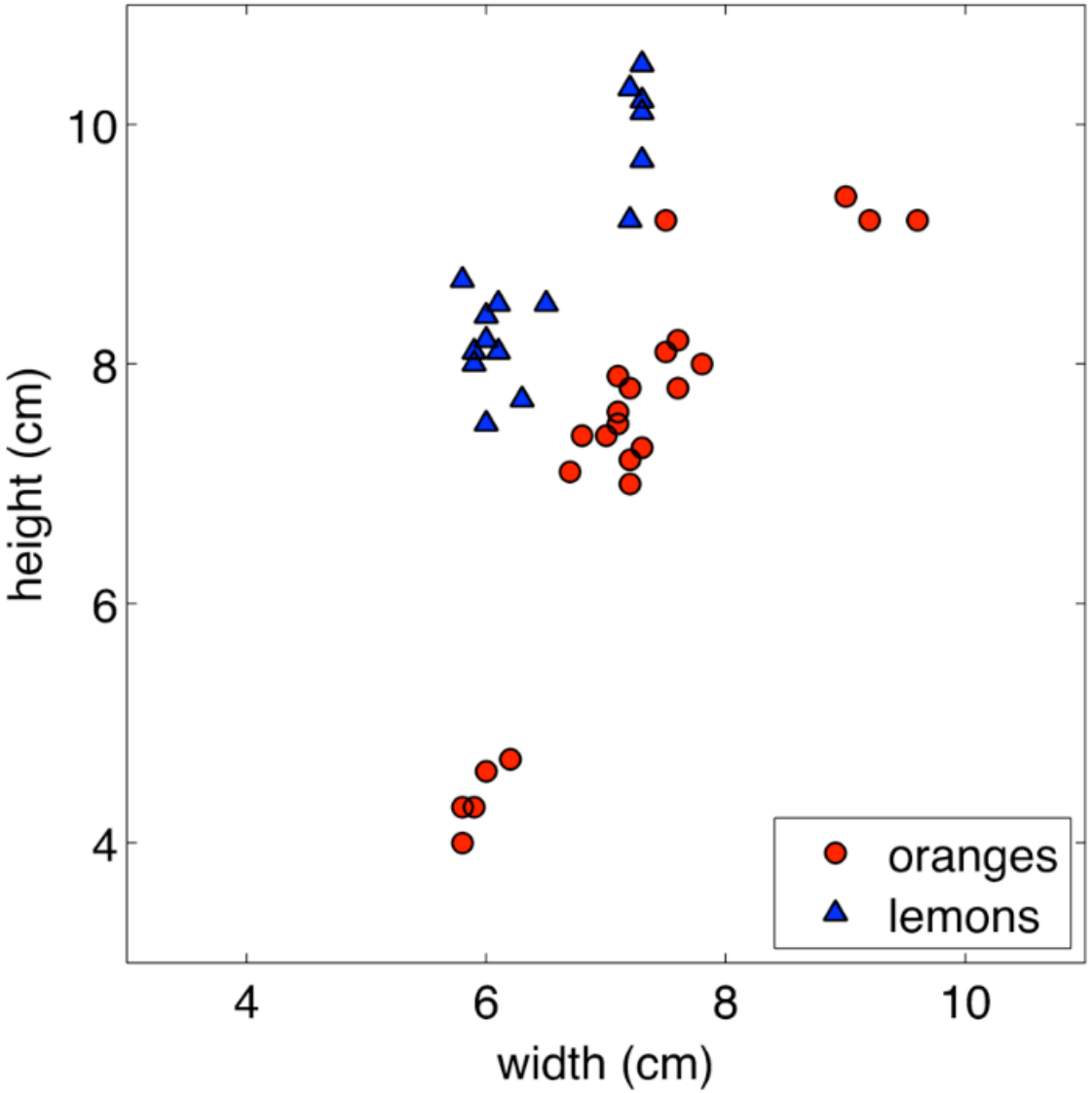
1. Árvores de decisão
2. Avaliação de classificadores
   - Matriz de confusão
   - Avaliação de classificadores binários
3. Tópicos adicionais
4. Referências

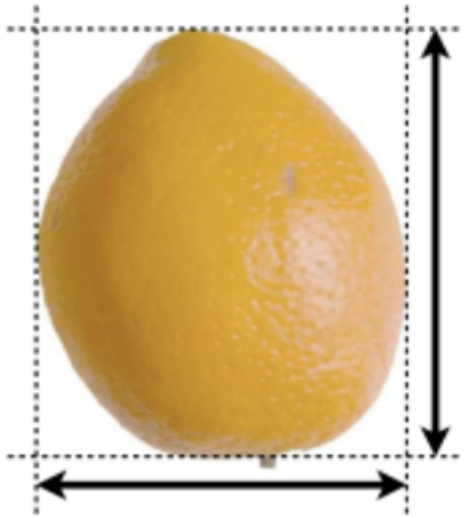
Árvores de decisão

- **Problema**: Como diferenciar laranjas de limões?

Árvores de decisão

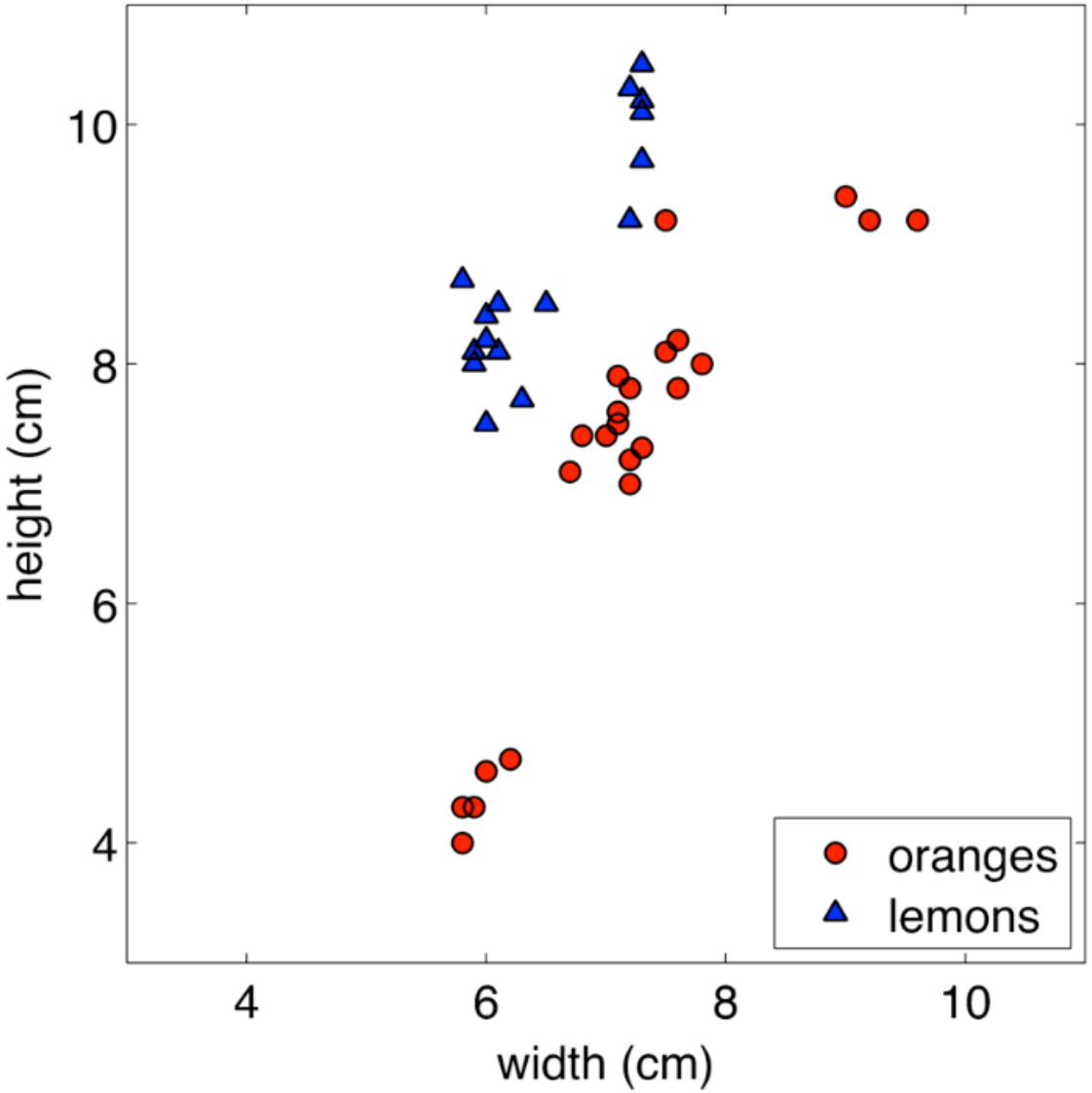
- **Ideia**: Mapeamos largura (*width*) e altura (*height*) das frutas.

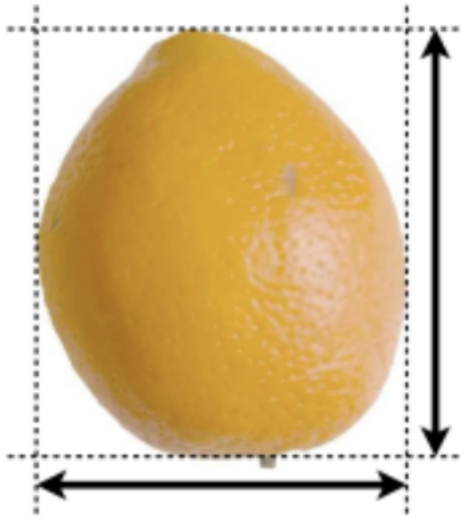




Árvores de decisão

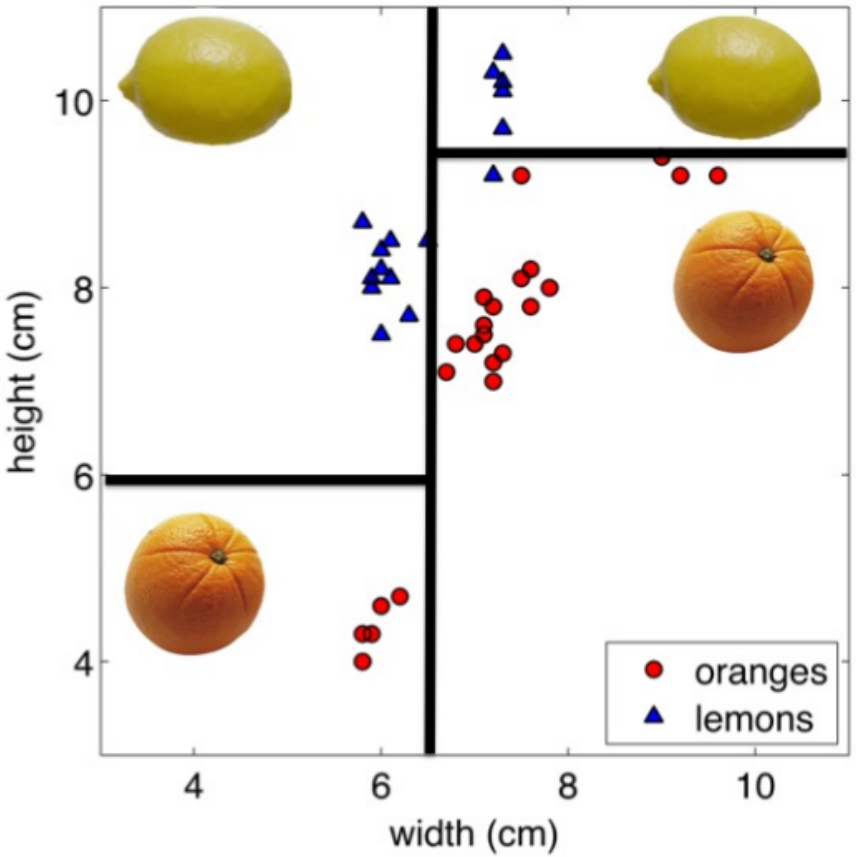
- **Ideia**: Usamos regras lógicas (se-então) para separar as frutas.

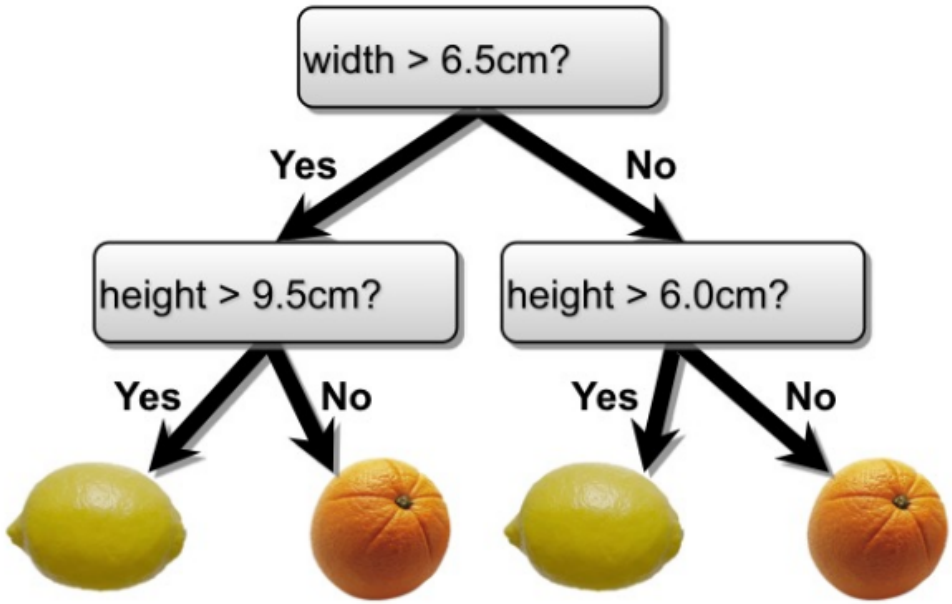




Árvores de decisão

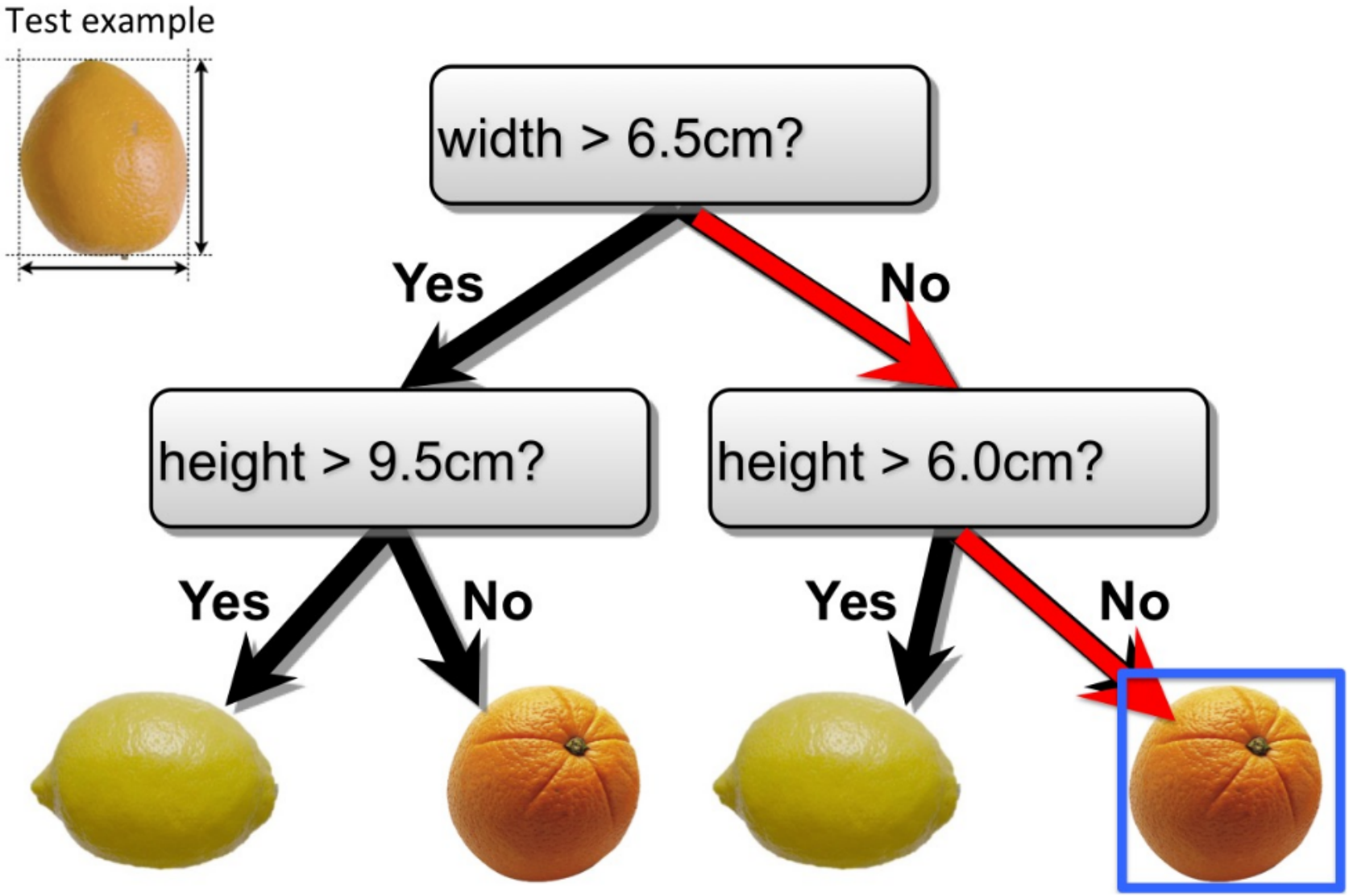
- **Ideia**: Usamos regras lógicas (se-então) para separar as frutas.



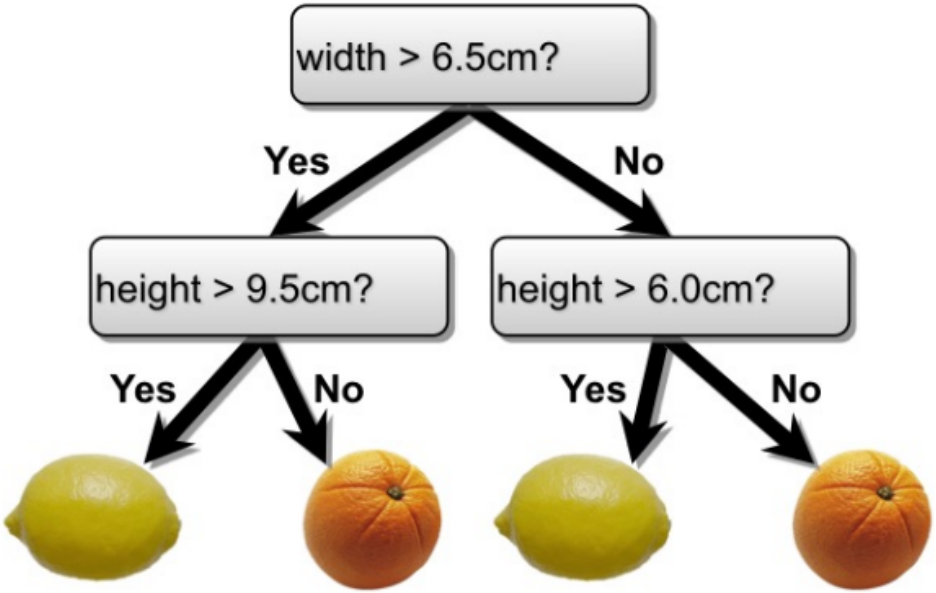


Árvores de decisão

- **Ideia**: Usamos regras lógicas (se-então) para separar as frutas.



Árvores de decisão



- **Nós internos** verificam valores de atributos.
- Ramificação é feita de acordo com o **limiar (threshold)** escolhido.
- **Nós terminais (folhas)** estão associados a uma classe específica.

Árvores de decisão

Predições usando árvores de decisão

Dada uma árvore de decisão já existente e um padrão de teste:

1. Inicie no nó mais superior (raiz da árvore).
2. Considere o atributo do nó em questão.
3. Verifique o limiar do nó atual e siga um dos ramos existentes.
4. Caso chegue em um nó terminal (folha), retorne a saída associada. Caso contrário, desça para o próximo nó interno e continue.

Árvores de decisão

- Cada caminho na árvore define uma região (partição) $\mathcal{R}_k$ do espaço de entrada.
- Sejam os padrões $\mathcal{D}_k = \{(\boldsymbol{x}_i, y_i)\}_{i=1}^{N_k} \in \mathcal{R}_k$ os exemplos de treinamento que alcançam a região $\mathcal{R}_k$.

Árvores de decisão

- Cada caminho na árvore define uma região (partição) $\mathcal{R}_k$ do espaço de entrada.
- Sejam os padrões $\mathcal{D}_k = \{(\boldsymbol{x}_i, y_i)\}_{i=1}^{N_k} \in \mathcal{R}_k$ os exemplos de treinamento que alcançam a região $\mathcal{R}_k$.

Árvores de decisão para classificação

A saída associada à folha k é a classe mais comum em $\mathcal{D}_k$.

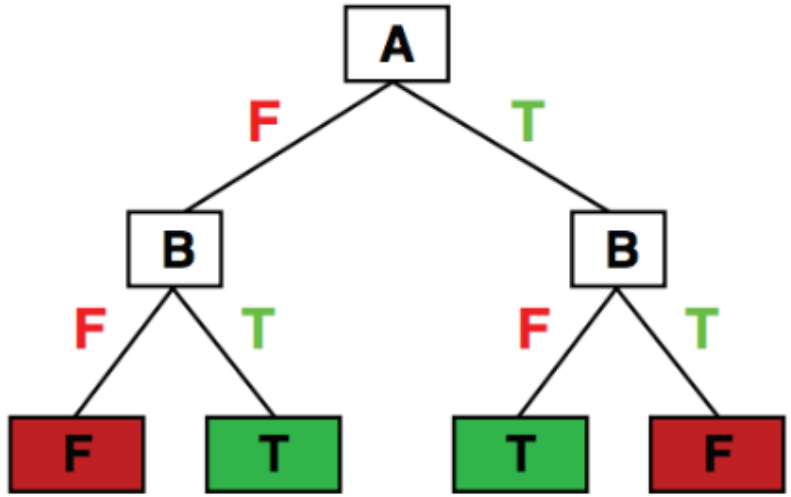
Árvores de decisão para regressão

A saída associada à folha k é a média das saídas contínuas em $\mathcal{D}_k$.

Árvores de decisão

- Para dados (entrada e saída) discretos, árvores de decisão podem expressar qualquer função dos atributos de entrada.

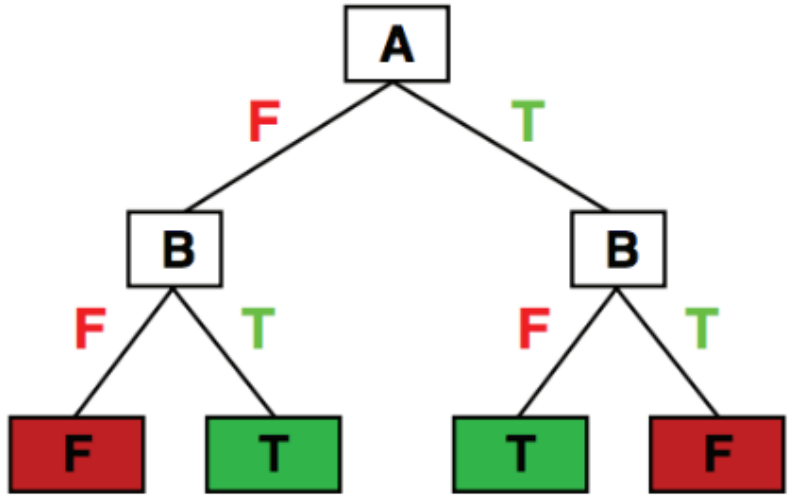
A	B	A xor B
F	F	F
F	T	T
T	F	T
T	T	F



Árvores de decisão

- Para dados (entrada e saída) discretos, árvores de decisão podem expressar qualquer função dos atributos de entrada.

A	B	A xor B
F	F	F
F	T	T
T	F	T
T	T	F

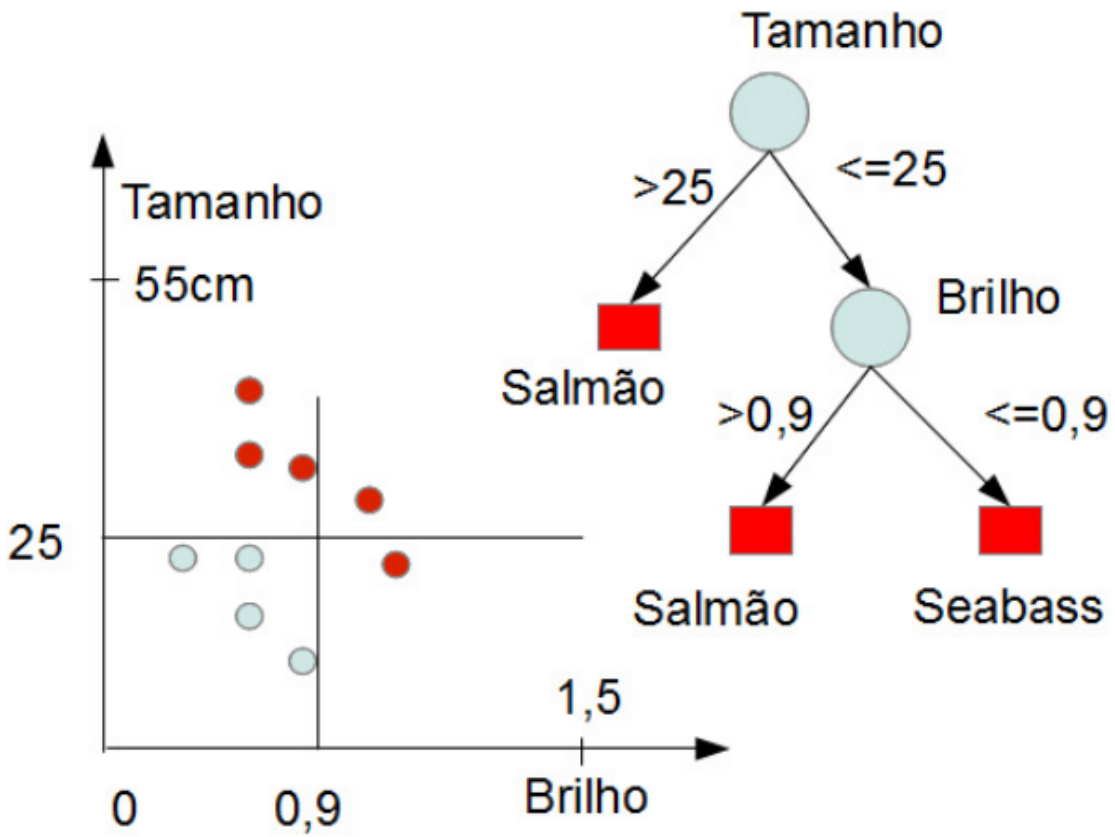


- No caso de dados contínuos, árvores podem aproximas funções com erros arbitrariamente pequenos.

Árvores de decisão

- **Problema**: Classificação de peixe: salmão ou seabass (robalo)?

Brilho	Tamanho	Classe
1.2	23	Salmão
1.1	30	Salmão
0.9	36	Salmão
0.8	45	Salmão
0.8	38	Salmão
0.9	15	Seabass
0.8	20	Seabass
0.8	25	Seabass
0.7	25	Seabass



Árvores de decisão

- **Problema**: Como obter a árvore de decisão automaticamente a partir dos dados de treinamento?

Árvores de decisão

- **Problema**: Como obter a árvore de decisão automaticamente a partir dos dados de treinamento?
- **Problema**: Construir a menor árvore (mais concisa) é um problema NP completo.

Árvores de decisão

- **Problema**: Como obter a árvore de decisão automaticamente a partir dos dados de treinamento?
- **Problema**: Construir a menor árvore (mais concisa) é um problema NP completo.
- **Ideia**: Seguir uma abordagem heurística gulosa (*greedy*):
  1. Comece de uma árvore vazia;
  2. Encontre o melhor atributo para realizar uma divisão;
  3. Repita recursivamente o passo anterior para o próximo nó até encontrar uma folha.

Árvores de decisão

- **Problema**: Como encontrar o melhor atributo para realizar a divisão?

Árvores de decisão

- **Problema**: Como encontrar o melhor atributo para realizar a divisão?
- **Ideia**: Usar índices de **pureza**.
  - → **Pureza máxima**: Somente exemplos de uma mesma classe em uma folha.
  - → **Pureza mínima**: Quantidades iguais de todas as classes em uma folha.
  - → Distribuições intermediárias são quantificadas por um índice.
  - → A qualidade da divisão é dada pela média dos índices de pureza das folhas geradas ponderada pelas proporções de padrões.

Árvores de decisão

Entropia (teoria da informação)

- Taxa de informação gerada por uma fonte de dados.
- Dados improváveis fornecem mais informação (mais "surpresa").
- Maior a pureza, menor a entropia, sendo quantificada por:

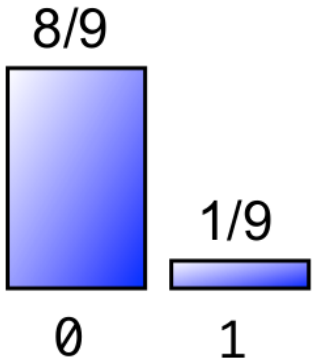
$$H = -\sum_{k} P(C_k) \log_2 P(C_k)$$

Árvores de decisão

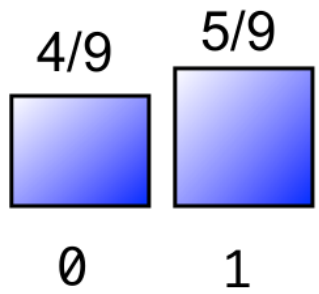
Entropia (teoria da informação)

- Taxa de informação gerada por uma fonte de dados.
- Dados improváveis fornecem mais informação (mais "surpresa").
- Maior a pureza, menor a entropia, sendo quantificada por:

$$H = -\sum_k P(C_k) \log_2 P(C_k)$$



$$-\frac{8}{9}\log_2\frac{8}{9} - \frac{1}{9}\log_2\frac{1}{9} \approx 0.5$$



$$-\frac{4}{9}\log_2\frac{4}{9} - \frac{5}{9}\log_2\frac{5}{9} \approx 0.99$$

Árvores de decisão

Índice (ou impureza de) Gini

- Frequência em que um exemplo aleatório é incorretamente classificado.
- Pode ser quantificado por:

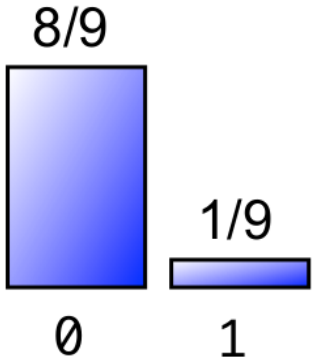
$$G = \sum_k P(C_k)(1 - P(C_k)) = 1 - \sum_k P(C_k)^2$$

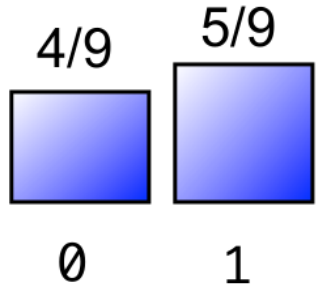
Árvores de decisão

Índice (ou impureza de) Gini

- Frequência em que um exemplo aleatório é incorretamente classificado.
- Pode ser quantificado por:

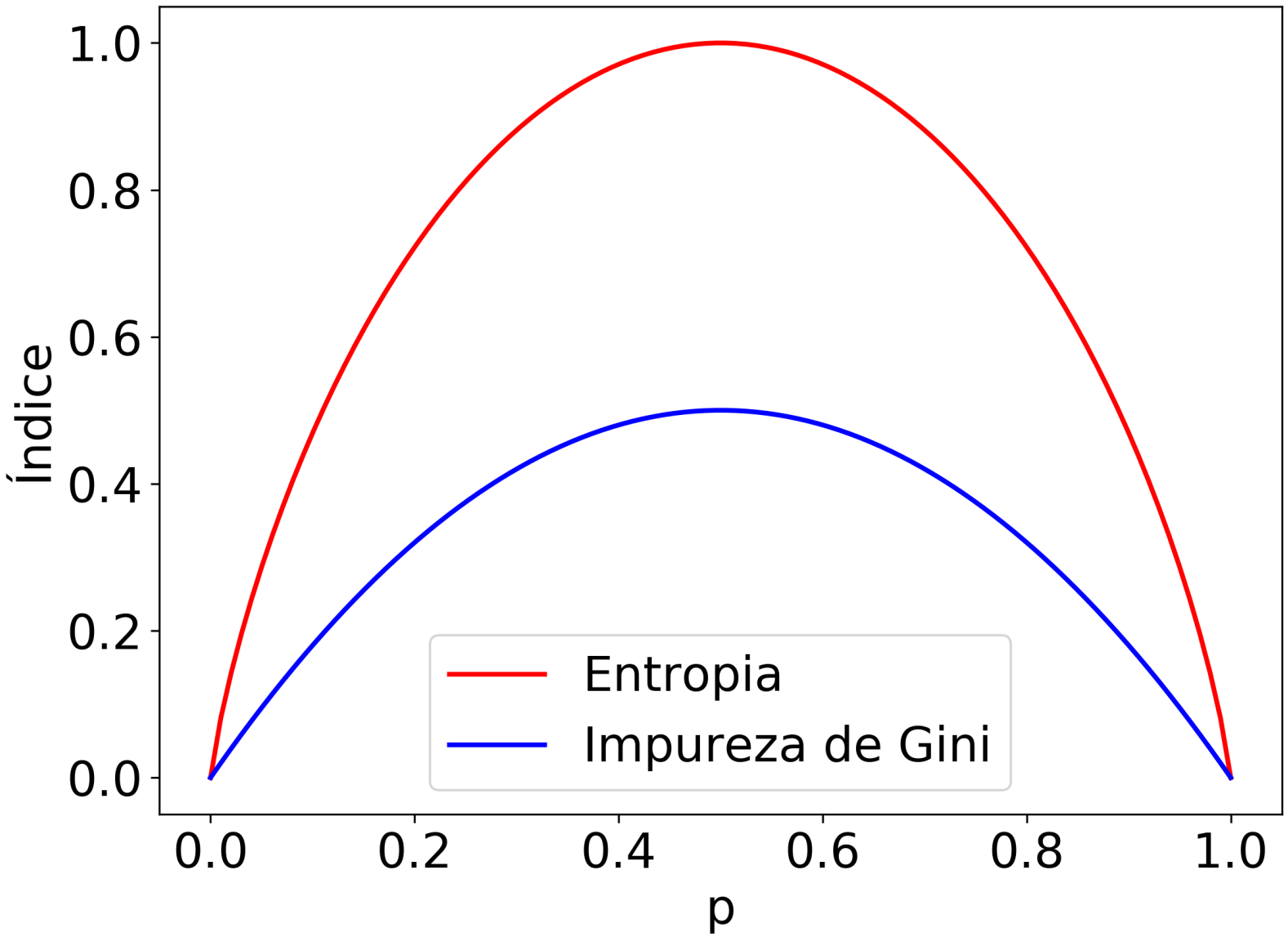
$$G = \sum_k P(C_k)(1 - P(C_k)) = 1 - \sum_k P(C_k)^2$$





$$1 - \left(\frac{8}{9}\right)^2 - \left(\frac{1}{9}\right)^2 \approx 0.2 \qquad 1 - \left(\frac{4}{9}\right)^2 - \left(\frac{5}{9}\right)^2 \approx 0.49$$

Comparação entre entropia e impureza de Gini



Árvores de decisão

- Vamos aplicar o índice Gini na divisão dos exemplos de peixes.

Brilho	**Tamanho**	**Classe**
1.2	23	Salmão
1.1	30	Salmão
0.9	36	Salmão
0.8	45	Salmão
0.8	38	Salmão
0.9	15	Seabass
0.8	20	Seabass
0.8	25	Seabass
0.7	25	Seabass

- Gini original (5 Salmão e 4 Seabass):

$$G = 1 - \left(\frac{5}{9}\right)^2 - \left(\frac{4}{9}\right)^2 \approx 0.49$$

Árvores de decisão

- Vamos aplicar o índice Gini na divisão dos exemplos de peixes.

Brilho	Tamanho	Classe
1.2	23	Salmão
1.1	30	Salmão
0.9	36	Salmão
0.8	45	Salmão
0.8	38	Salmão
0.9	15	Seabass
0.8	20	Seabass
0.8	25	Seabass
0.7	25	Seabass

- Gini original (5 Salmão e 4 Seabass):

$$G = 1 - \left(\frac{5}{9}\right)^2 - \left(\frac{4}{9}\right)^2 \approx 0.49$$

- Escolhendo Brilho > 0.7:
  - $\rightarrow$ 1 Seabass e 0 Salmão: $G_1 = 1 - \left(\frac{1}{1}\right)^2 - \left(\frac{0}{1}\right)^2 = 0$
  - $\rightarrow$ 3 Seabass e 5 Salmão: $G_2 = 1 - \left(\frac{3}{8}\right)^2 - \left(\frac{5}{8}\right)^2 \approx 0.47$
  - $\rightarrow$ Gini médio das ramificações: $G_B = \frac{1}{9} G_1 + \frac{8}{9} G_2 \approx 0.42$

Árvores de decisão

- Vamos aplicar o índice Gini na divisão dos exemplos de peixes.

Brilho	**Tamanho**	**Classe**
1.2	23	Salmão
1.1	30	Salmão
0.9	36	Salmão
0.8	45	Salmão
0.8	38	Salmão
0.9	15	Seabass
0.8	20	Seabass
0.8	25	Seabass
0.7	25	Seabass

- Gini original (5 Salmão e 4 Seabass):

$$G = 1 - \left(\frac{5}{9}\right)^2 - \left(\frac{4}{9}\right)^2 \approx 0.49$$

Árvores de decisão

- Vamos aplicar o índice Gini na divisão dos exemplos de peixes.

Brilho	**Tamanho**	**Classe**
1.2	23	Salmão
1.1	30	Salmão
0.9	36	Salmão
0.8	45	Salmão
0.8	38	Salmão
0.9	15	Seabass
0.8	20	Seabass
0.8	25	Seabass
0.7	25	Seabass

- Gini original (5 Salmão e 4 Seabass):

$$G = 1 - \left(\frac{5}{9}\right)^2 - \left(\frac{4}{9}\right)^2 \approx 0.49$$

- Escolhendo Tamanho > 25:
  - $\rightarrow$ 4 Seabass e 1 Salmão:
    $G_1 = 1 - \left(\frac{4}{5}\right)^2 - \left(\frac{1}{5}\right)^2 \approx 0.32$
  - $\rightarrow$ 0 Seabass e 4 Salmão:
    $G_2 = 1 - \left(\frac{0}{4}\right)^2 - \left(\frac{4}{4}\right)^2 = 0$
  - $\rightarrow$ Gini médio das ramificações:
    $G_T = \frac{5}{9} G_1 + \frac{4}{9} G_2 \approx 0.18$

Árvores de decisão

- Vamos aplicar o índice Gini na divisão dos exemplos de peixes.

Brilho	**Tamanho**	**Classe**
1.2	23	Salmão
1.1	30	Salmão
0.9	36	Salmão
0.8	45	Salmão
0.8	38	Salmão
0.9	15	Seabass
0.8	20	Seabass
0.8	25	Seabass
0.7	25	Seabass

- Gini original (5 Salmão e 4 Seabass):

$$G = 1 - \left(\frac{4}{9}\right)^2 - \left(\frac{6}{9}\right)^2 \approx 0.49$$

- Opções de ramificação:

$$\text{Brilho} > 0.7 \rightarrow G_B \approx 0.42$$

$$\text{Tamanho} > 25 \rightarrow G_T \approx 0.18$$

Árvores de decisão

- Vamos aplicar o índice Gini na divisão dos exemplos de peixes.

Brilho	**Tamanho**	**Classe**
1.2	23	Salmão
1.1	30	Salmão
0.9	36	Salmão
0.8	45	Salmão
0.8	38	Salmão
0.9	15	Seabass
0.8	20	Seabass
0.8	25	Seabass
0.7	25	Seabass

- Gini original (5 Salmão e 4 Seabass):

$$G = 1 - \left(\frac{4}{9}\right)^2 - \left(\frac{6}{9}\right)^2 \approx 0.49$$

- Opções de ramificação:

$$\text{Brilho} > 0.7 \rightarrow G_B \approx 0.42$$

$$\text{Tamanho} > 25 \rightarrow G_T \approx 0.18$$

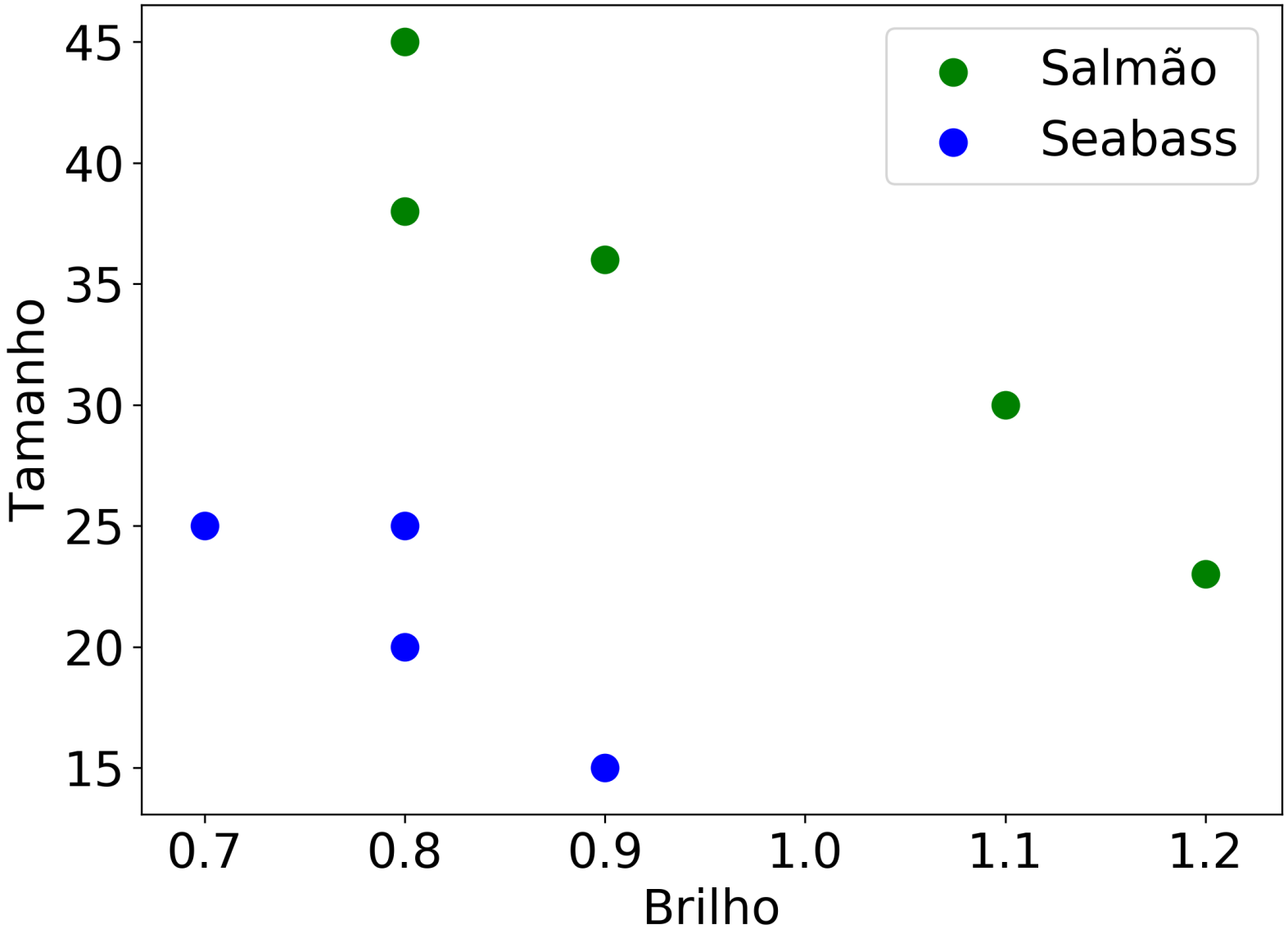
- Escolhemos a opção que apresenta a maior queda de impureza Gini em relação ao nó pai (Tamanho > 25).

Árvores de decisão

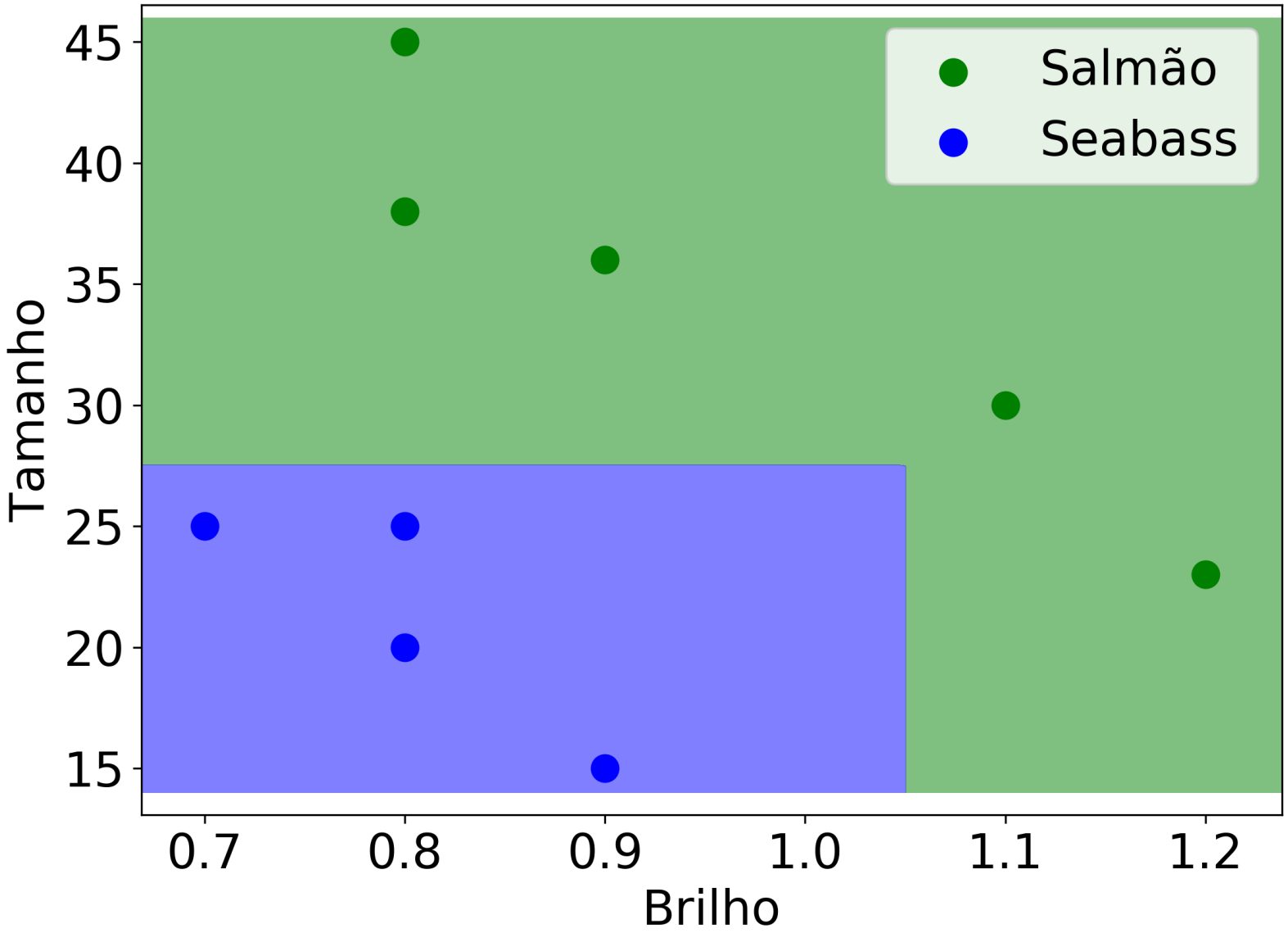
Treinamento guloso (*greedy*) de árvores de decisão

1. Calcule o índice de pureza/impureza do nó atual (nó pai);
2. Crie ramificações a partir de um atributo e um limiar candidatos;
3. Escolha a ramificação com maior queda de impureza (maior pureza) em relação ao nó pai;
4. Para cada nó criado pela ramificação escolhida:
   - Se não houver exemplos de treinamento, retorne a classe mais comum no nó pai.
   - Se todos os exemplos são de uma mesma classe, retorne-a.
   - Caso contrário, retorne ao primeiro passo.

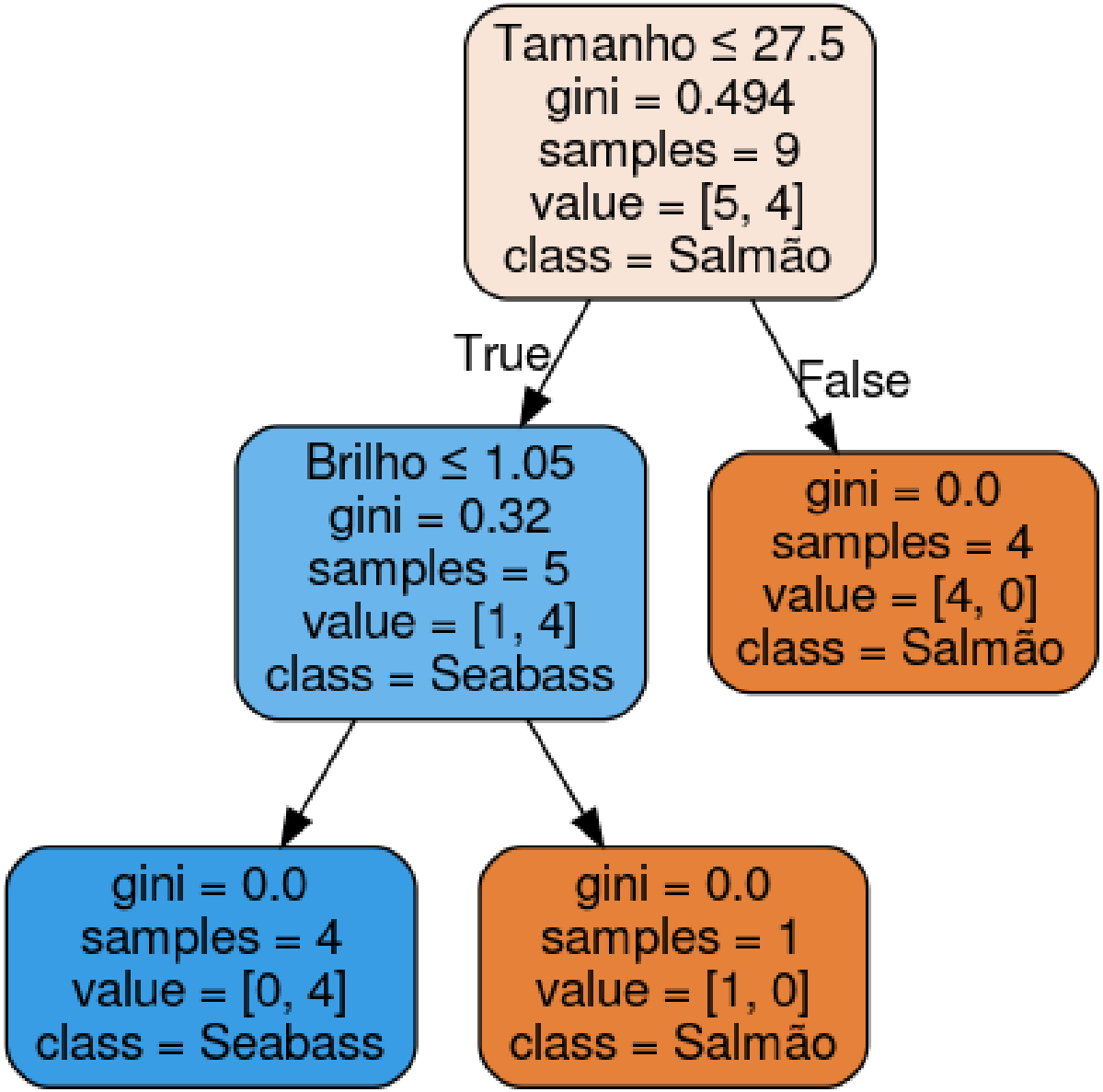
Arvore de decisão para classificação de peixes



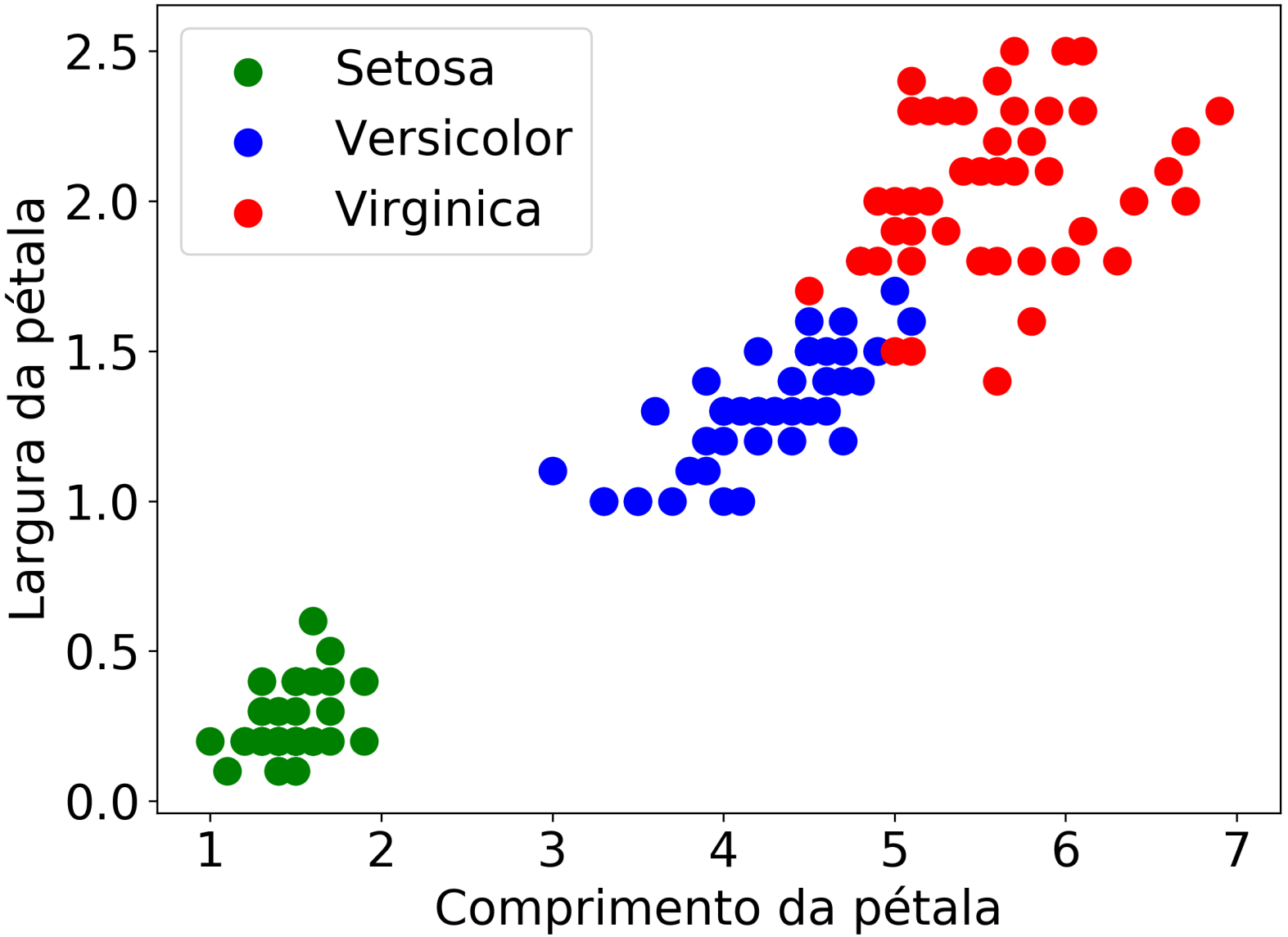
Arvore de decisão para classificação de peixes



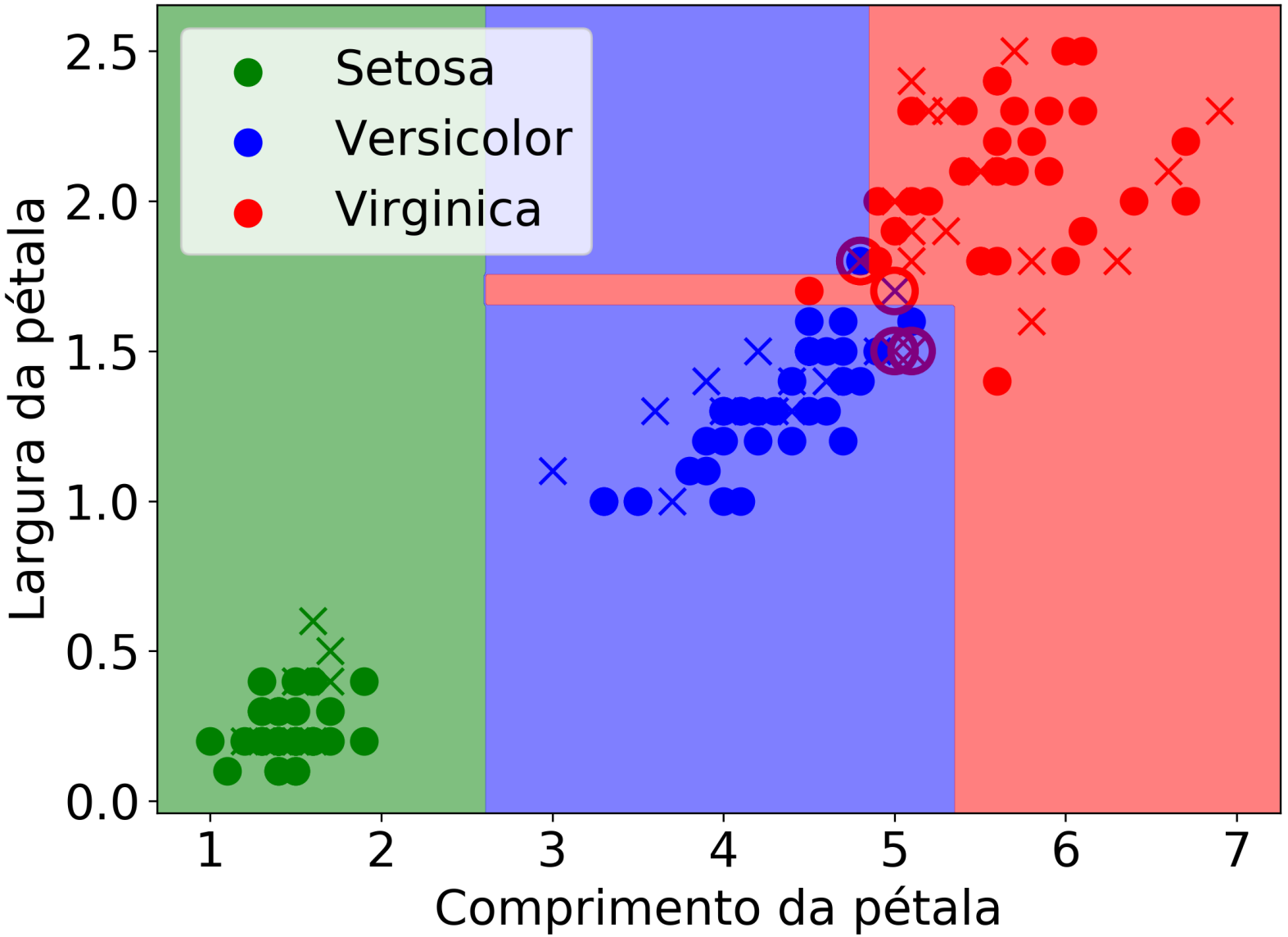
Arvore de decisão para classificação de peixes



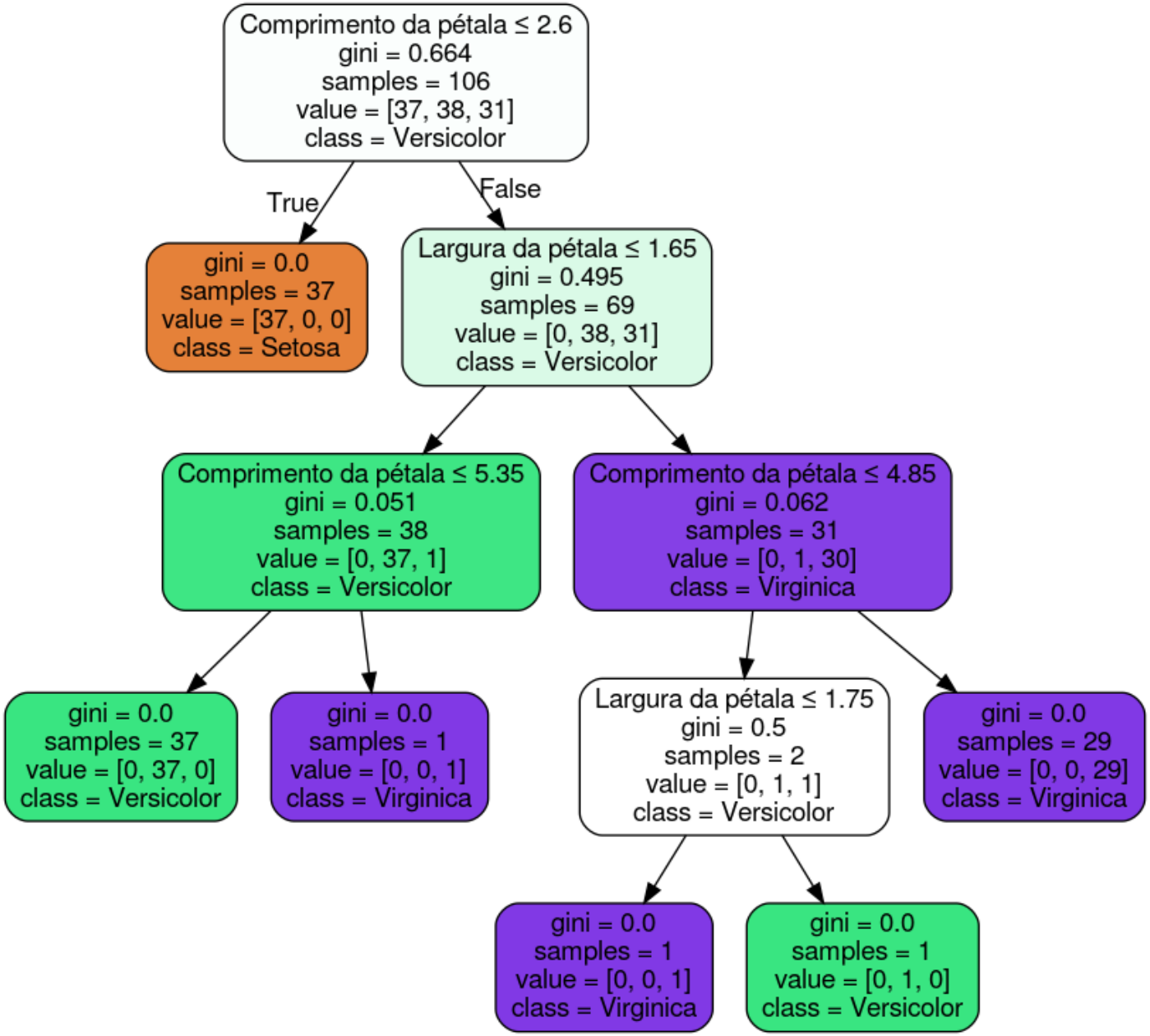
Arvore de decisão para classificação das flores íris



Arvore de decisão para classificação das flores íris



Arvore de decisão para classificação das flores íris



Árvores de decisão

- **Importante**: Sempre é possível criar uma árvore em que todos os exemplos de treinamento são perfeitamente separados, desconsiderando o ruído.

Árvores de decisão

- **Importante**: Sempre é possível criar uma árvore em que todos os exemplos de treinamento são perfeitamente separados, desconsiderando o ruído.
- **Questão**: Isso prejudica a generalização do modelo?

Árvores de decisão

- **Importante**: Sempre é possível criar uma árvore em que todos os exemplos de treinamento são perfeitamente separados, desconsiderando o ruído.
- **Questão**: Isso prejudica a generalização do modelo? Sim (overfitting)!

Árvores de decisão

- **Importante**: Sempre é possível criar uma árvore em que todos os exemplos de treinamento são perfeitamente separados, desconsiderando o ruído.
- **Questão**: Isso prejudica a generalização do modelo? Sim (overfitting)!
- **Ideias**:
  - $\rightarrow$ Evitar árvores muito grandes fixando uma variação mínima de pureza para executar uma ramificação.
  - $\rightarrow$ Podar a árvore gerada (remover e/ou unir nós) usando um conjunto de validação.

Árvores de decisão

Algoritmos para treinamento de árvores de decisão

- **ID3 (Iterative Dichotomizer)**: Um dos primeiros e mais simples algoritmos de árvore de decisão. Normalmente usa a entropia para escolher novas ramificações.
- **C4.5**: Versão mais avançada do algoritmo ID3, com suporte a poda e dados discretos, contínuos, faltantes.
- **CART (Classification And Regression Tree)**: Similar ao algoritmo C4.5. Normalmente usa a impureza de Gini para escolher novas ramificações.

Árvores de decisão

Vantagens

- Facilmente interpretáveis, pois geram regras de decisão.
- São escaláveis.
- Seleção automática de atributos importantes.
- Lidam facilmente com dados faltosos.

Árvores de decisão

Vantagens

- Facilmente interpretáveis, pois geram regras de decisão.
- São escaláveis.
- Seleção automática de atributos importantes.
- Lidam facilmente com dados faltosos.

Desvantagens

- Tendência ao overfitting.
- Pequenas variações no conjunto de treinamento resultam em árvores diferentes.

Agenda

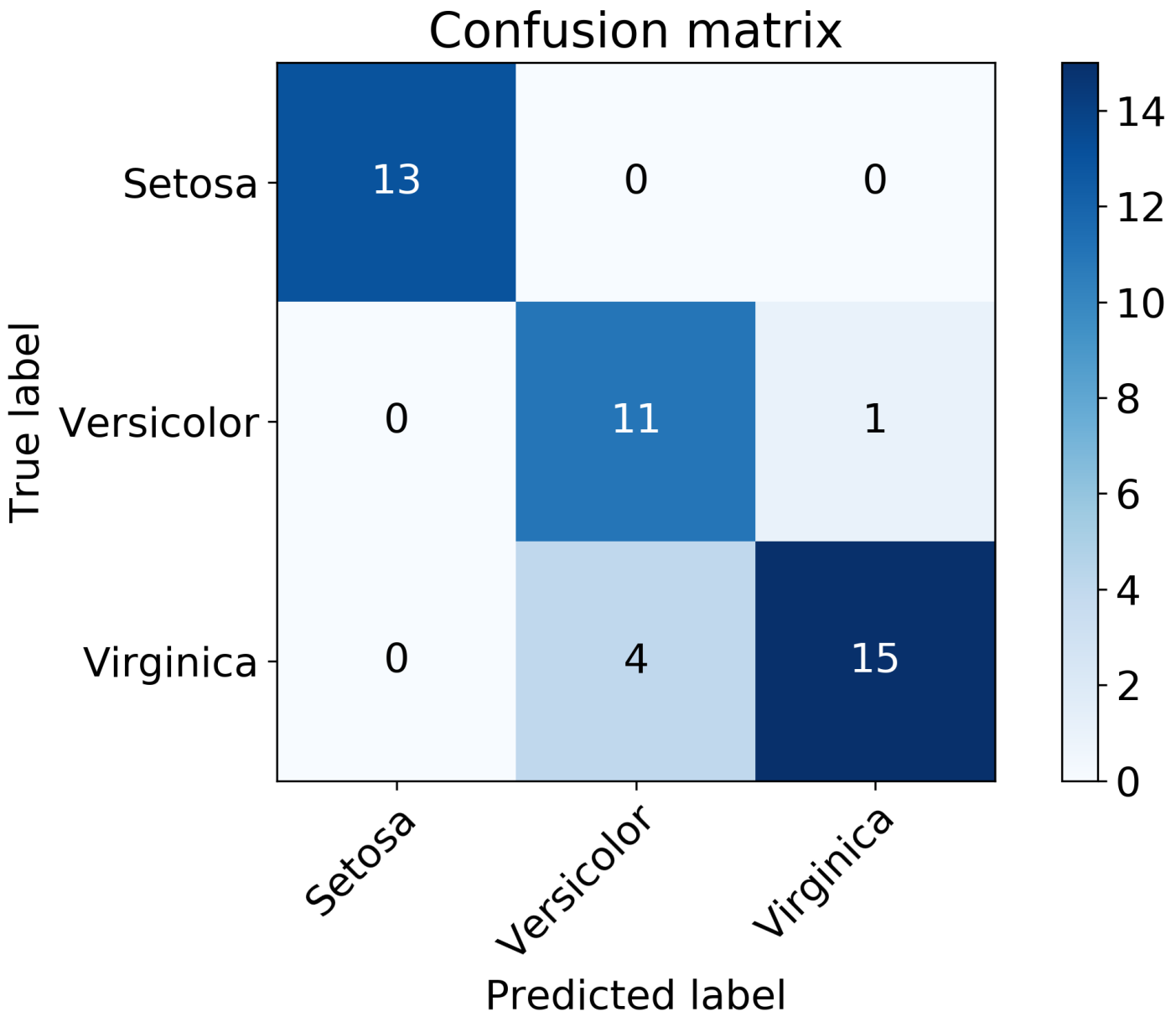
1. Árvores de decisão
2. Avaliação de classificadores
   - Matriz de confusão
   - Avaliação de classificadores binários
3. Tópicos adicionais
4. Referências

Avaliação de classificadores

Matriz de confusão

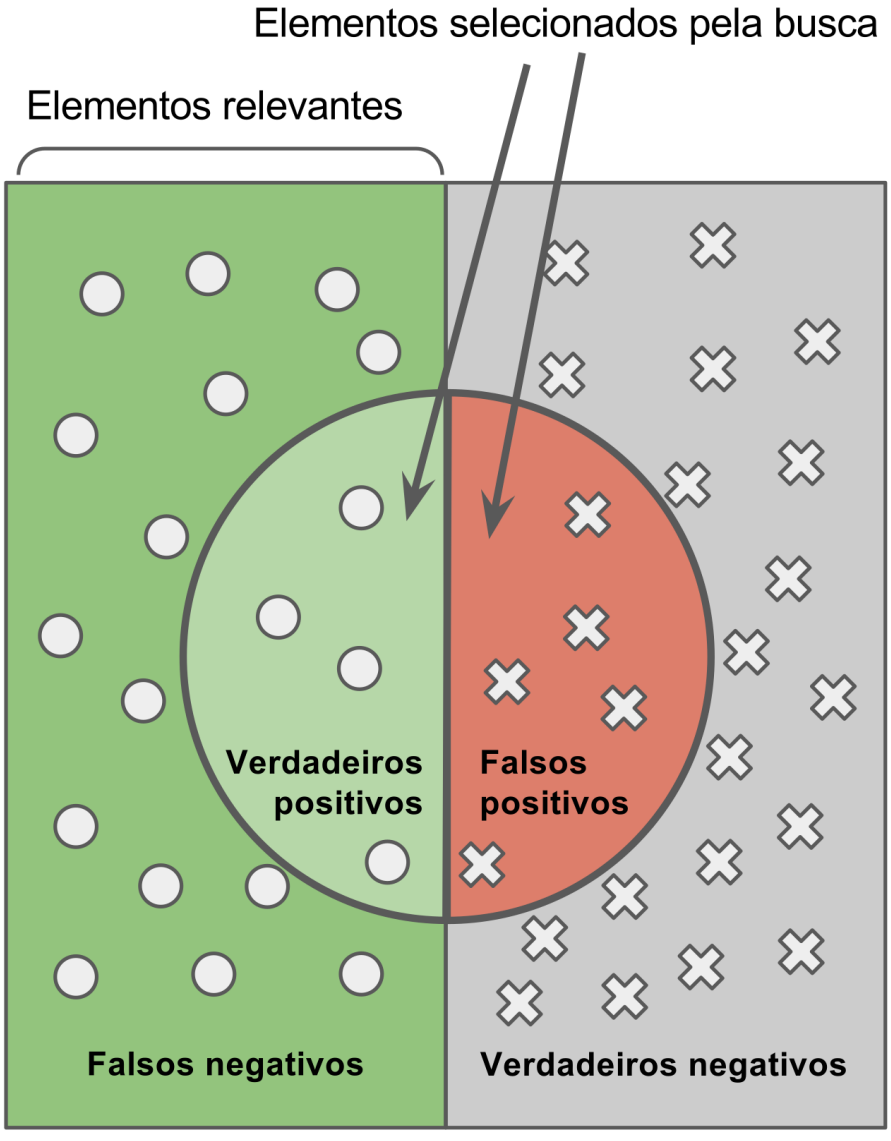
- Matriz que **sumariza os acertos e erros** de um classificador.
- Normalmente as classes (rótulos) verdadeiras são colocadas no eixo vertical, enquanto as classes preditas ficam no eixo horizontal.
- Os elementos na diagonal principal da matriz correspondem aos acertos do classificador.
- Os demais elementos correspondem aos erros do classificador.
- Classificadores obtidos por **algoritmos diferentes podem obter erros diferentes**, mesmo que a taxa de erro total seja semelhante.

Matriz de confusão - Arvore de decisão - Flores íris



Classificação binária ("positivo" ou "negativo")

Precisão e Revocação



Precisão = 

"Quantos elementos selecionados são relevantes?"

Revocação = 

"Quantos elementos relevantes foram selecionados?"

Avaliação de classificadores binários

- **Revocação (sensibilidade, recall ou taxa de verdadeiros positivos)**:

$$\text{revocação} = \frac{\text{verdadeiros positivos}}{\text{verdadeiros positivos} + \text{falsos negativos}}$$

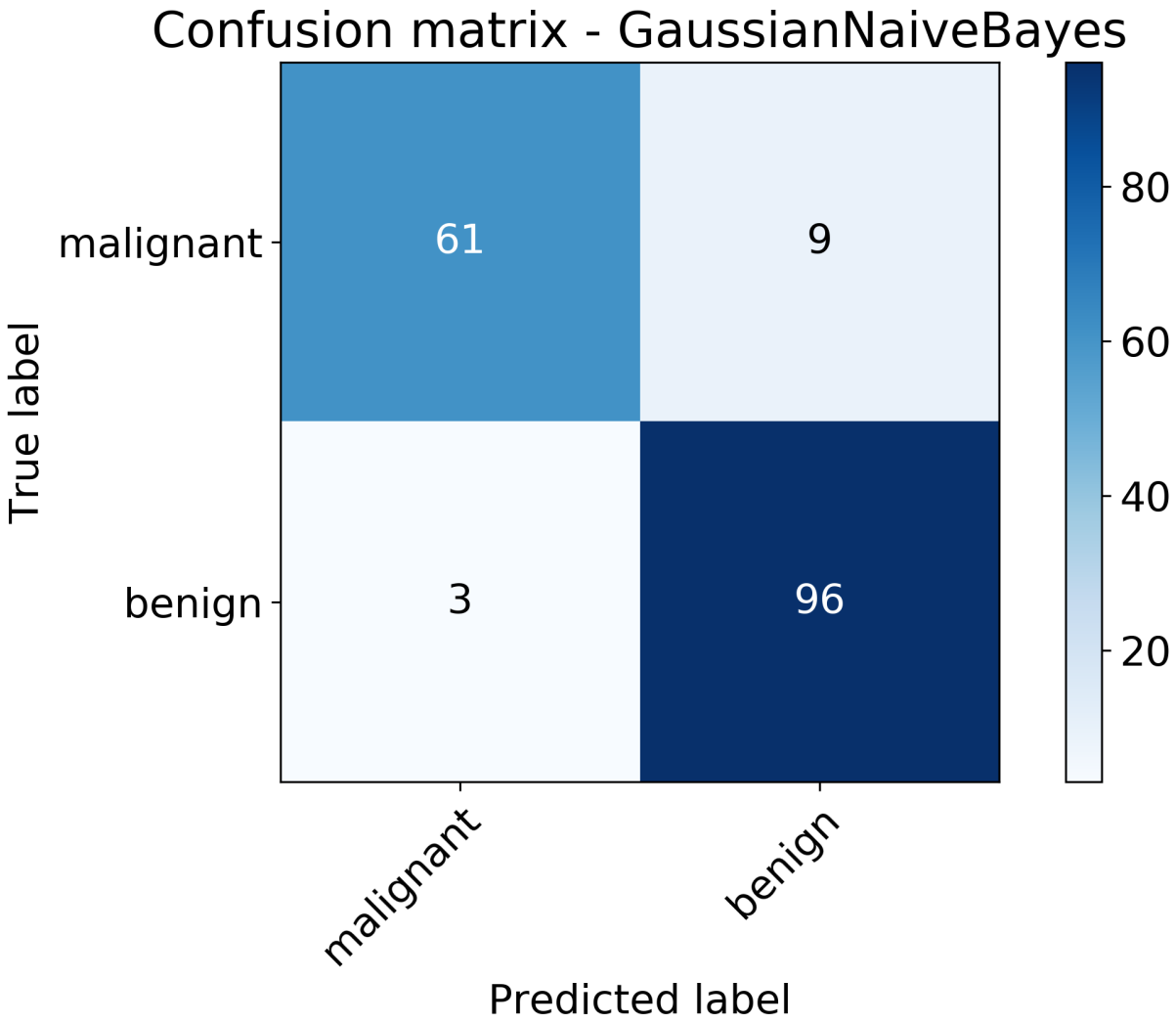
- **Precisão (precision ou valor preditivo positivo)**:

$$\text{precisão} = \frac{\text{verdadeiros positivos}}{\text{verdadeiros positivos} + \text{falsos positivos}}$$

- **F1 score (F-score ou F-measure)**:

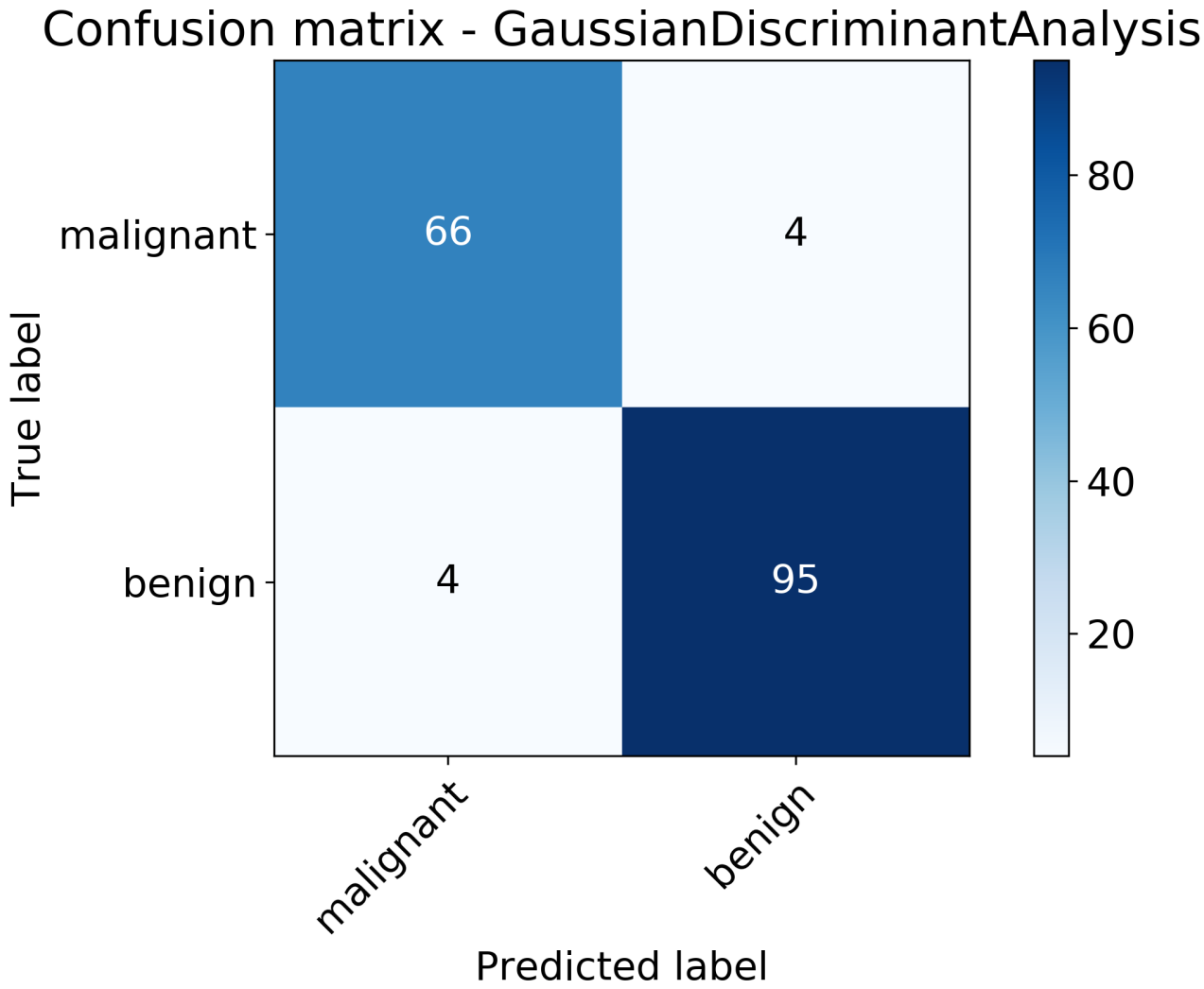
$$F_1 = \left(\frac{\text{revocação}^{-1} + \text{precisão}^{-1}}{2} \right)^{-1} = 2 \frac{\text{revocação} \times \text{precisão}}{\text{revocação} + \text{precisão}} \in [0, 1]$$

Naive Bayes Gaussiano - Breast Cancer



$$\text{revocação} = \frac{61}{61+9} \approx 0.8714, \quad \text{precisão} = \frac{61}{61+3} \approx 0.9531, \quad F_1 \approx 0.9104$$

Discriminante Gaussiano - Breast Cancer



$$\text{revocação} = \frac{66}{66+4} \approx 0.9429, \quad \text{precisão} = \frac{66}{66+4} \approx 0.9429, \quad F_1 \approx 0.9429$$

Curva ROC (receiver operating characteristic)

- Em classificadores binários, temos $\hat{y}_* = \begin{cases} 1, & \text{se } p(\hat{y}_*|\boldsymbol{x}_*) \geq \tau, \\ 0, & \text{caso contrário.} \end{cases}$

Curva ROC (receiver operating characteristic)

- Em classificadores binários, temos $\hat{y}_* = \begin{cases} 1, & \text{se } p(\hat{y}_*|\boldsymbol{x}_*) \geq \tau, \\ 0, & \text{caso contrário.} \end{cases}$
- Apesar do valor $\tau = 0.5$ ser usual, podemos usar $\tau \in [0, 1]$.
- A **curva ROC** é obtida quando computamos

$$\text{taxa de falsos positivos (FPR)} = \frac{\text{falsos positivos}}{\text{falsos positivos} + \text{verdadeiros negativos}} \text{ e}$$

$$\text{taxa de verdadeiros positivos (TPR)} = \frac{\text{verdadeiros positivos}}{\text{verdadeiros positivos} + \text{falsos negativos}}$$

para diversos valores de $\tau \in [0, 1]$.

Curva ROC (receiver operating characteristic)

- Em classificadores binários, temos $\hat{y}_* = \begin{cases} 1, & \text{se } p(\hat{y}_*|\boldsymbol{x}_*) \geq \tau, \\ 0, & \text{caso contrário.} \end{cases}$
- Apesar do valor $\tau = 0.5$ ser usual, podemos usar $\tau \in [0, 1]$.
- A **curva ROC** é obtida quando computamos

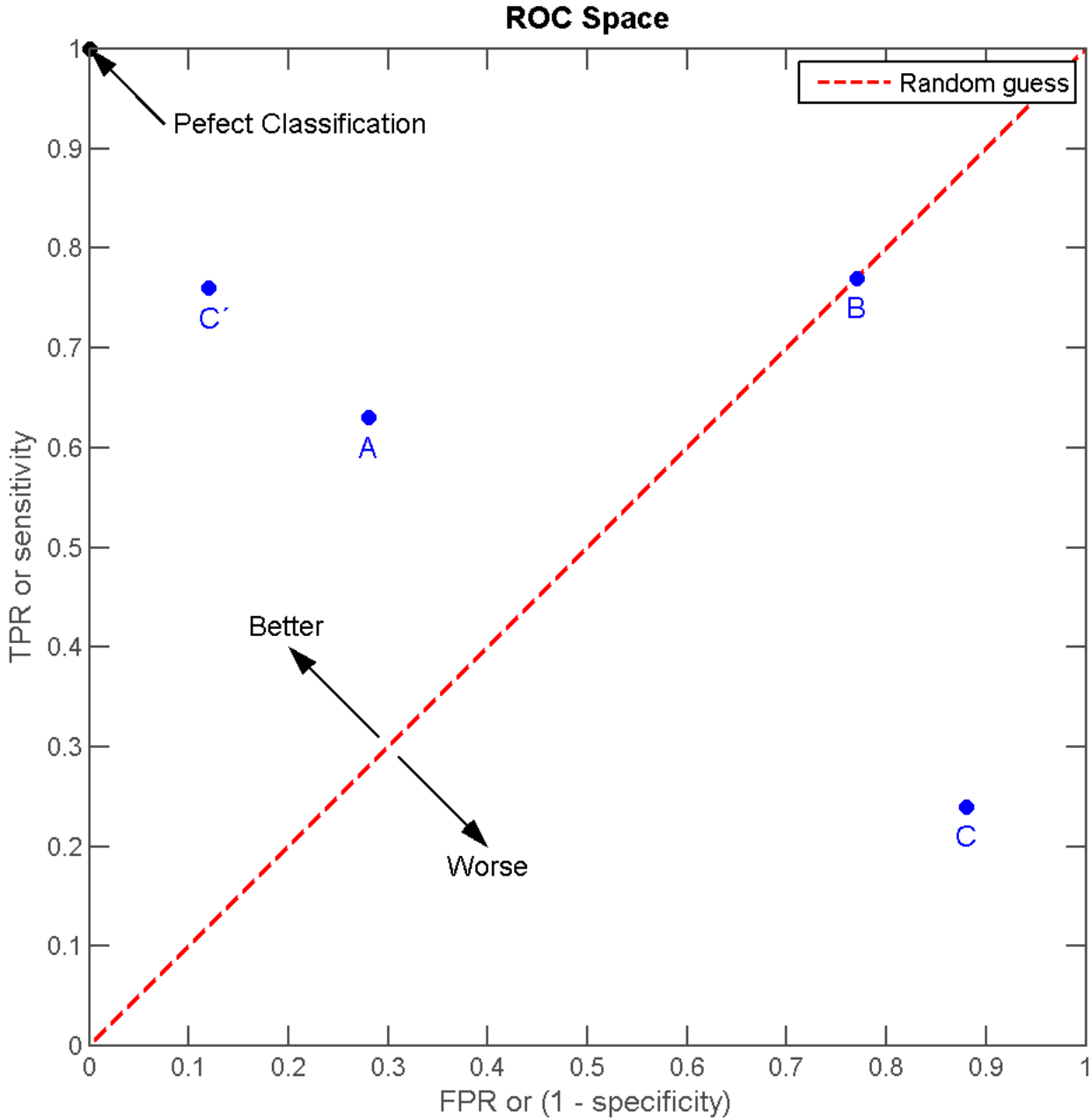
$$\text{taxa de falsos positivos (FPR)} = \frac{\text{falsos positivos}}{\text{falsos positivos} + \text{verdadeiros negativos}} \text{ e}$$

$$\text{taxa de verdadeiros positivos (TPR)} = \frac{\text{verdadeiros positivos}}{\text{verdadeiros positivos} + \text{falsos negativos}}$$

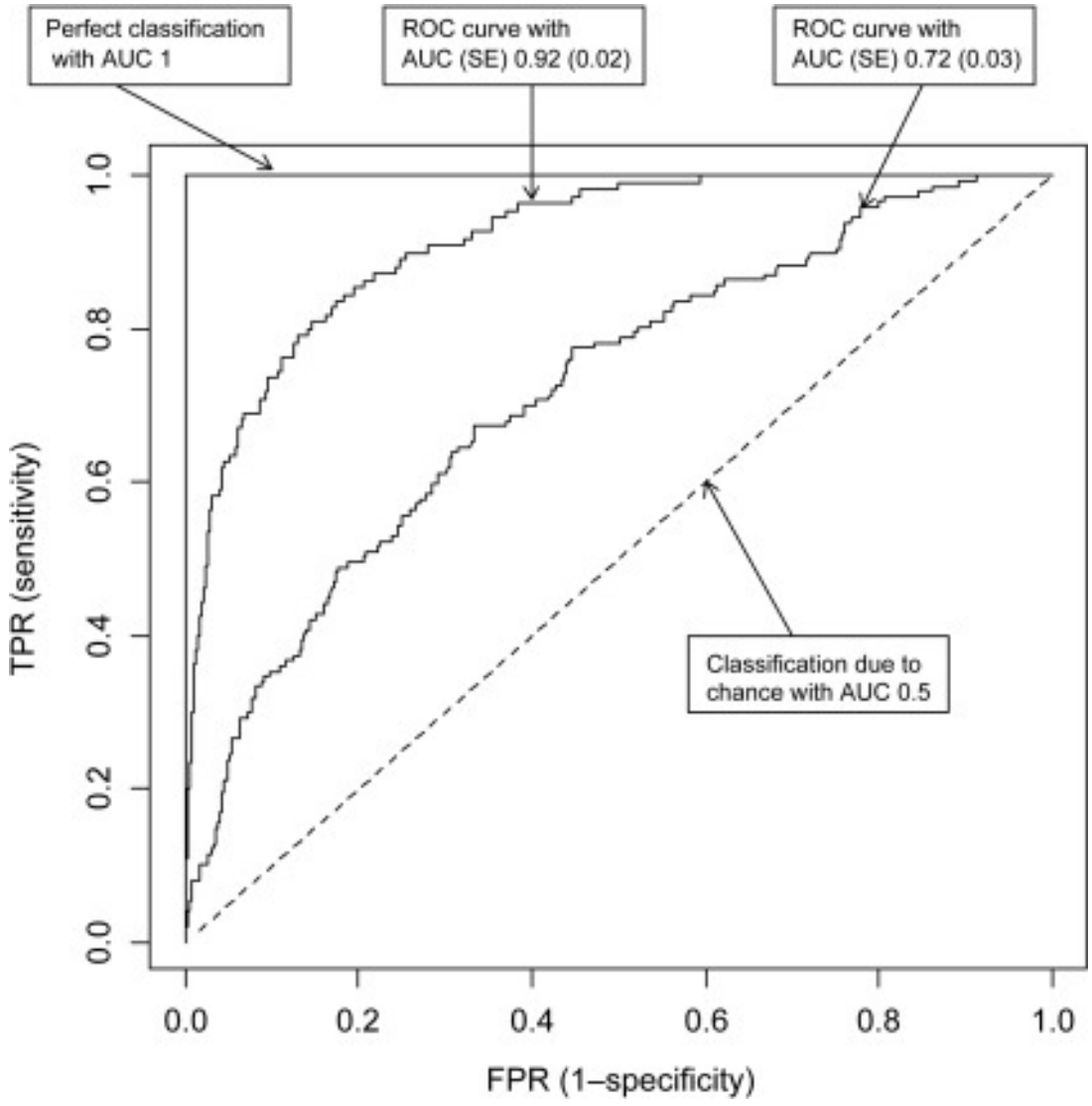
  para diversos valores de $\tau \in [0, 1]$.

- **AUROC (area under the ROC curve)**: Área abaixo da curva ROC de um classificador. Seu pior valor é 0 e o melhor é 1.
  - $\rightarrow$ Probabilidade do classificador atribuir um valor maior a um padrão positivo qualquer comparado a um negativo qualquer.

Curva ROC - Ilustração



Curva ROC - Ilustração



- **Observação**: Um classificador aleatório possui uma curva ROC em que TPR = FPR.

Curva Precision-Recall (PRC)

- Em classificadores binários, temos $\hat{y}_* = \begin{cases} 1, & \text{se } p(\hat{y}_*|\boldsymbol{x}_*) \geq \tau, \\ 0, & \text{caso contrário.} \end{cases}$
- A **curva PR** é obtida quando computamos

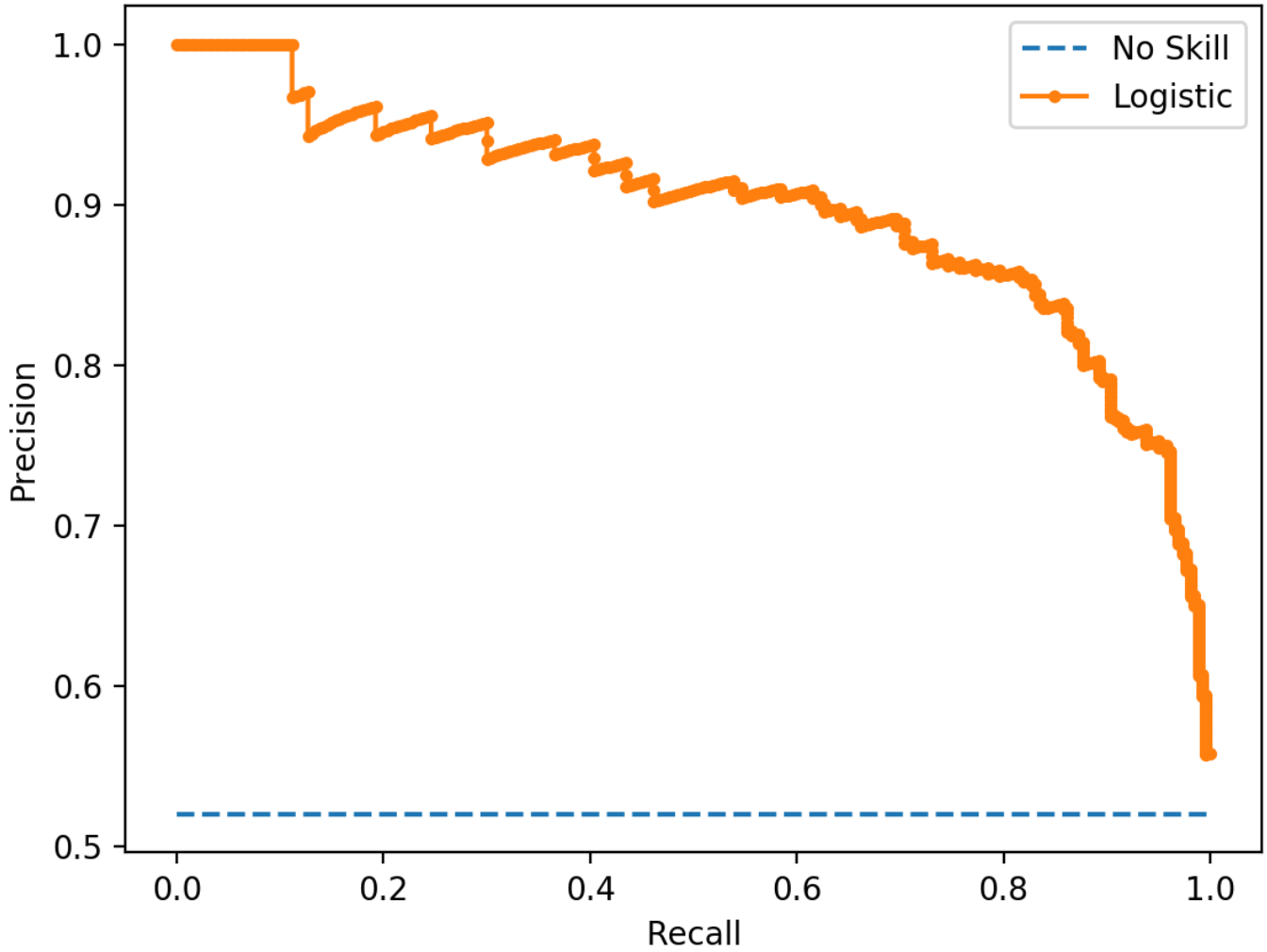
$$\text{revocação} = \frac{\text{verdadeiros positivos}}{\text{verdadeiros positivos} + \text{falsos negativos}} \text{ e}$$

$$\text{precisão} = \frac{\text{verdadeiros positivos}}{\text{verdadeiros positivos} + \text{falsos positivos}}$$

para diversos valores de $\tau \in [0, 1]$.

- **AUPRC (area under the PR curve)**: Área abaixo da curva PR de um classificador. Corresponde à **precisão média**.
- Preferível na presença de **classes muito desbalanceadas**.

Curva PR - Ilustração



- **Observação**: Um classificador aleatório possui uma curva PR constante igual à proporção de exemplos positivos.

Agenda

1. Árvores de decisão
2. Avaliação de classificadores
   - Matriz de confusão
   - Avaliação de classificadores binários
3. Tópicos adicionais
4. Referências

Tópicos adicionais

- Poda (prunning) de árvores.
- Modelos de mistura em árvores.
- Árvores aditivas: Bayesian additive regression trees (BART).
- Bagging e boosting de árvores de decisão (**ainda veremos!**)

Agenda

1. Árvores de decisão
2. Avaliação de classificadores
   - Matriz de confusão
   - Avaliação de classificadores binários
3. Tópicos adicionais
4. Referências

Referências bibliográficas

- **Caps. 5 e 16** - MURPHY, Kevin P. **Machine learning: a probabilistic perspective**, 2012.
- **Cap. 14** - BISHOP, C. **Pattern recognition and machine learning**, 2006.