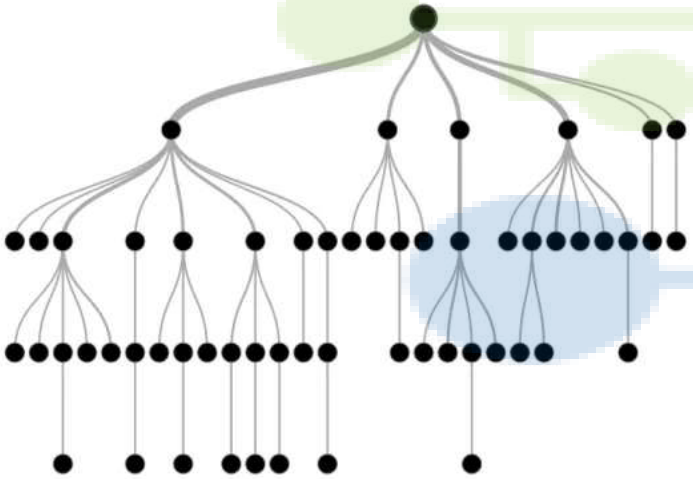
Data Science Academy

Seja muito bem-vindo(a)!

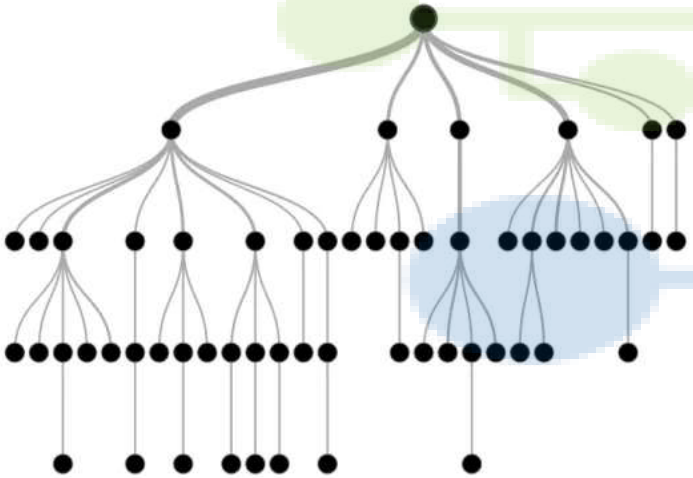
Data Science Academy

Decision Tree, Random Forest e Métodos Ensemble

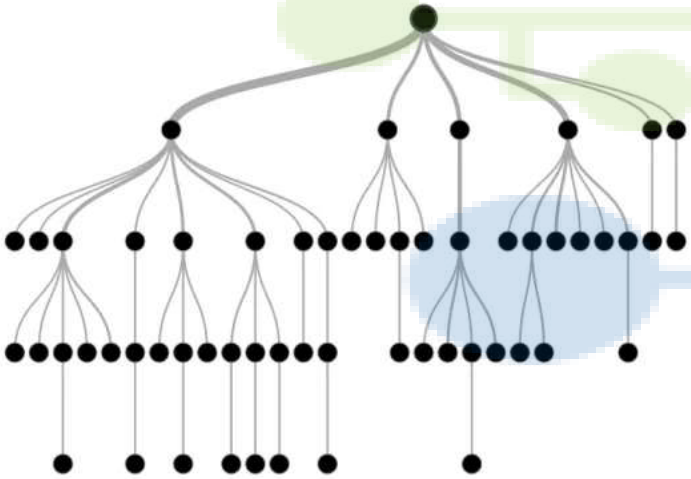


Este é um assunto bastante extenso, pois temos diversos algoritmos e diversas técnicas para trabalhar com árvores de decisão.

Por outro lado, esses algoritmos estão entre os mais poderosos em Machine Learning e são de fácil interpretação.

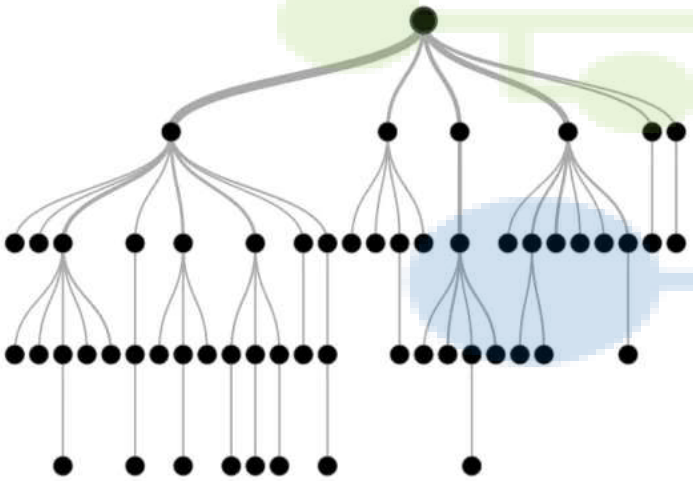


Vamos iniciar nossos estudos definindo o que são árvores de decisão e sua representação através de algoritmos de Machine Learning.



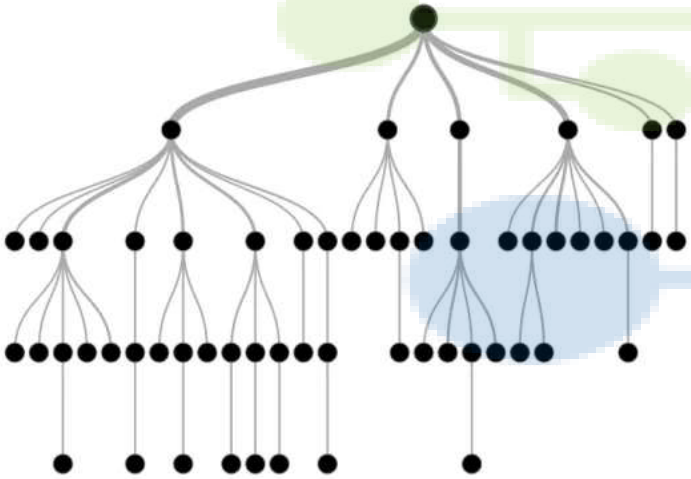
Como já conversamos nos capítulos anteriores, uma coisa é o modelo de aprendizagem e outra coisa é o algoritmo de aprendizagem.

Para os modelos de aprendizagem com árvores de decisão, estudaremos alguns algoritmos como o C4.5, C5.0, CART e o ID3.



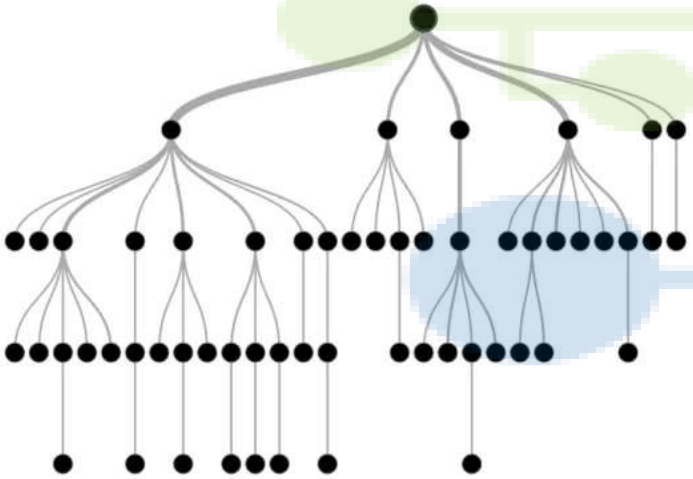
Existem alguns tipos especializados de árvores de decisão e estudaremos isso na sequência do capítulo.

E a principal especialização das árvores de decisão é o RandomForest, que nada mais é do que uma coleção de árvores de decisão. Estudaremos o RandomForest em detalhes.

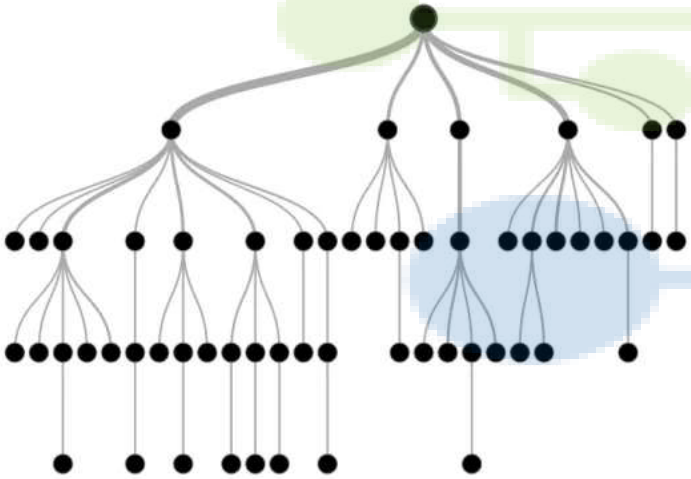


Podemos usar o RandomForest para seleção de atributos, ou seja, podemos usar árvores de decisão não apenas para modelos de ML em si, mas também para aplicar técnicas de feature selection a fim de preparar nosso dataset para outros algoritmos de ML.

Veremos os conceitos relacionados a seleção de atributos, tais como ganho de informação, entropia e índice Gini.



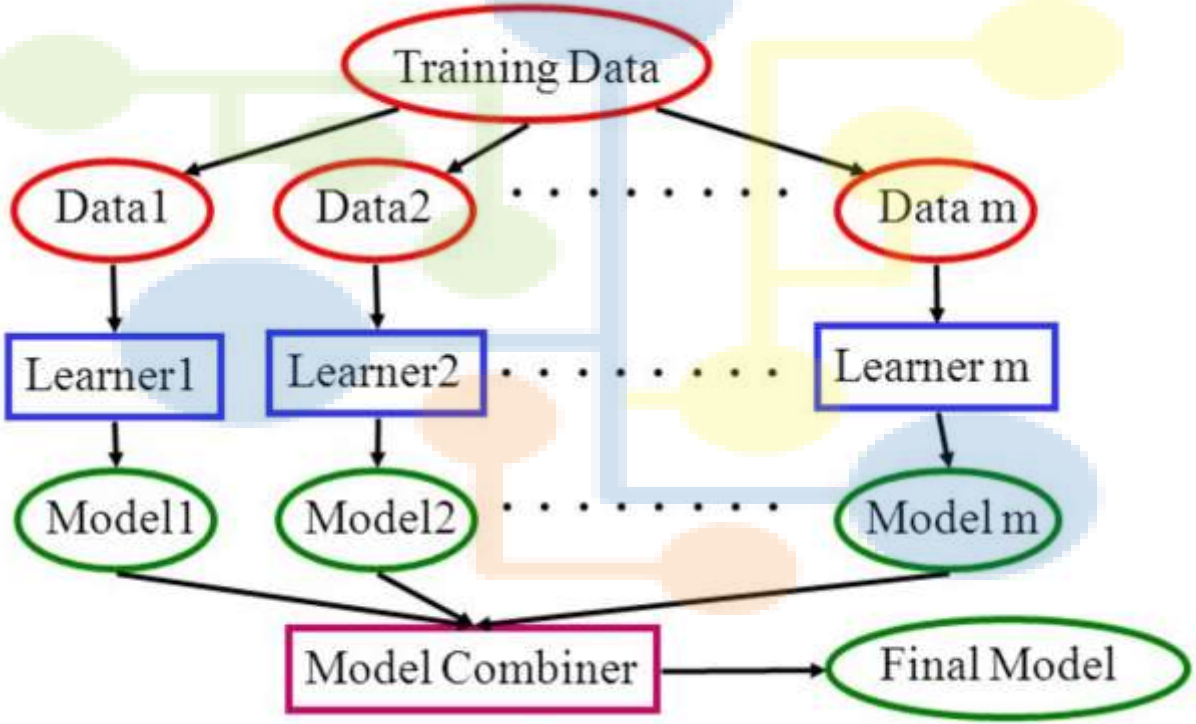
E vamos claro criar modelos e fazer previsões, estudar os parâmetros e os detalhes de pré-processamento das árvores de decisão e como interpretar os resultados dos modelos preditivos.

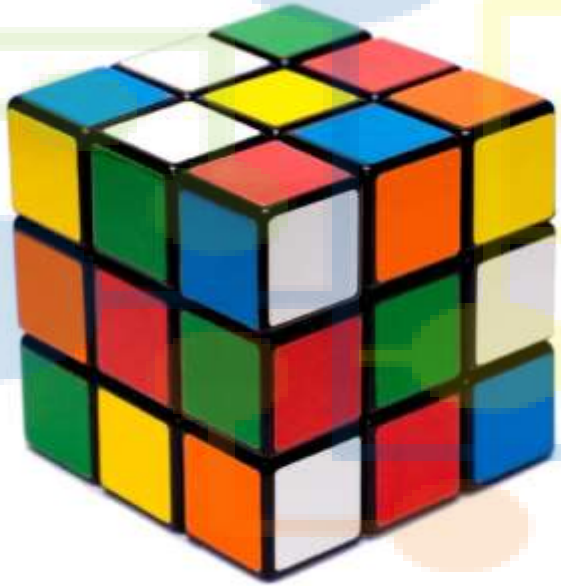


E faremos ainda o pruning, que em português seria algo como “podar a árvore”.

Ao criarmos árvores de decisão, podemos ter árvores com muitos “galhos e folhas” e em algum momento teremos que parar a construção da árvore ou fazer ajustes reduzindo o número de pontos de decisão no modelo preditivo. Veremos como aplicar esta técnica.

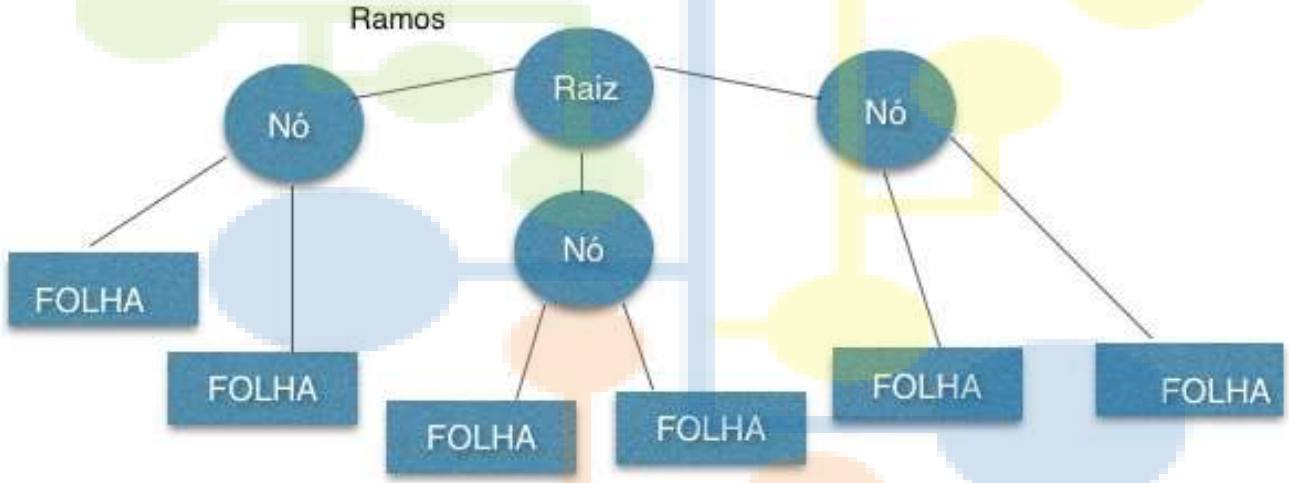
Métodos Ensemble

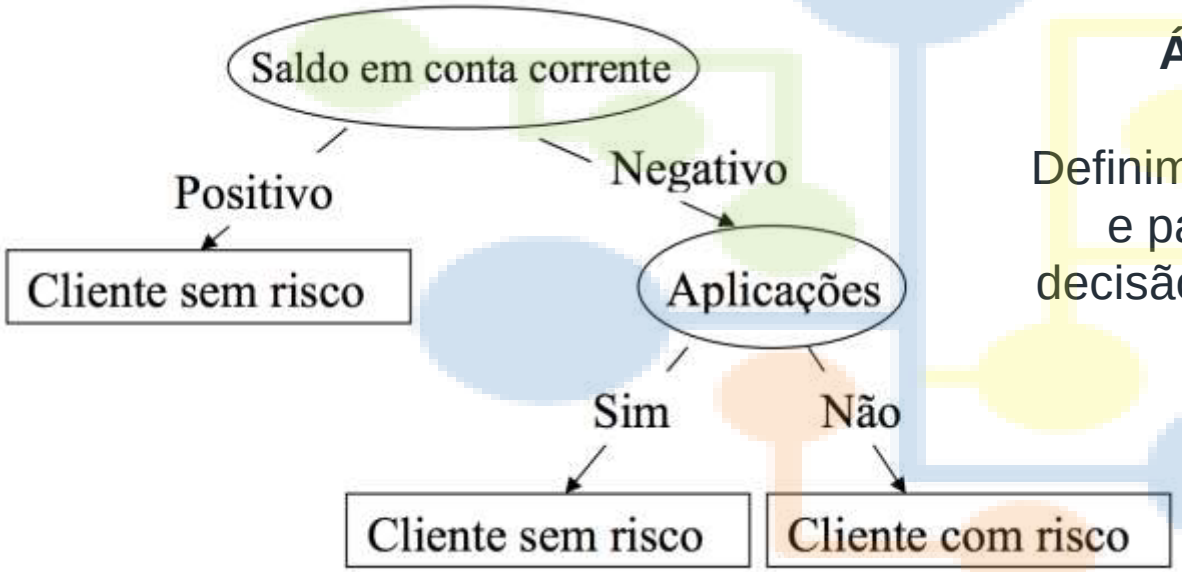




Data Science Academy

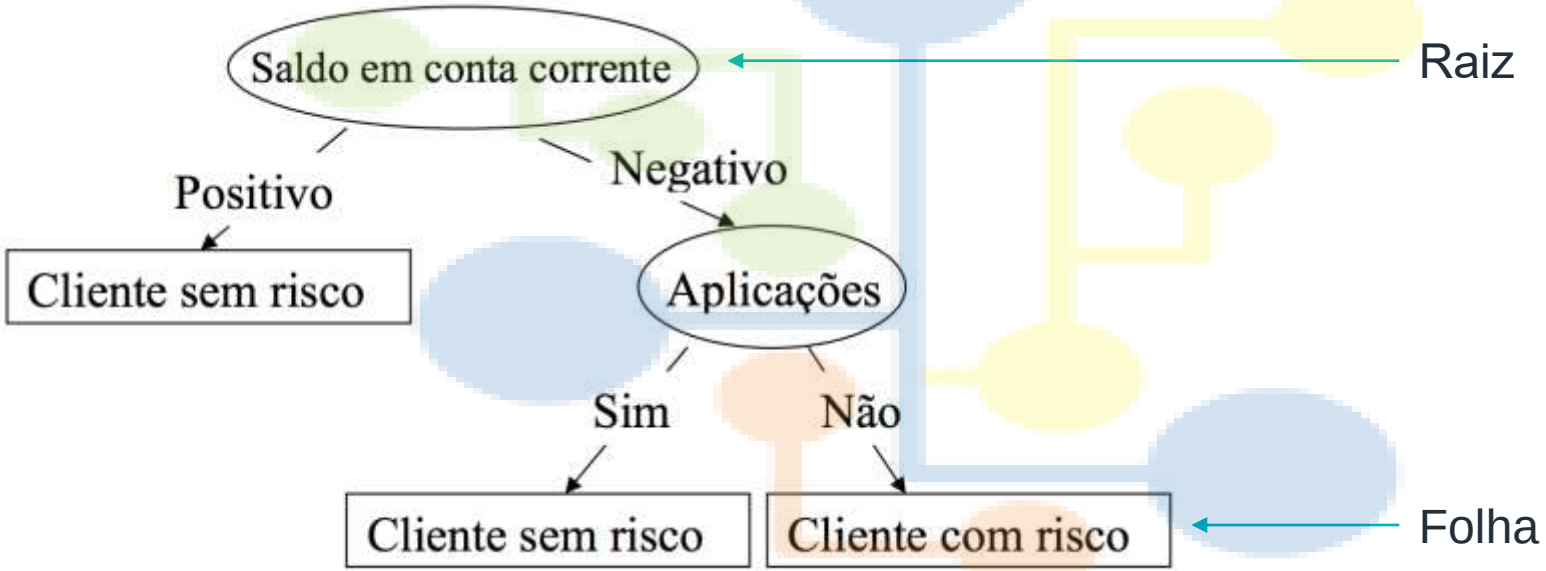
Árvores de Decisão

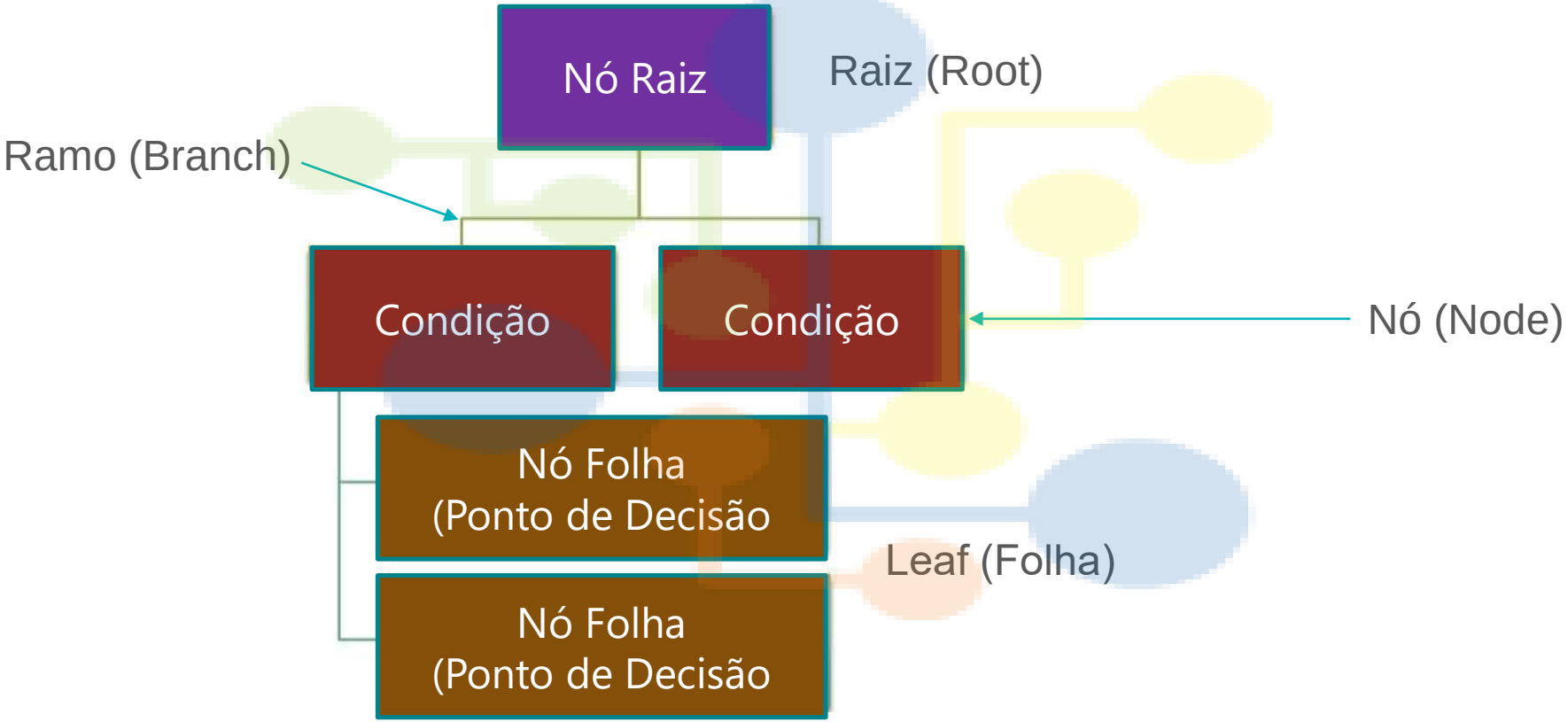

Ramos
Raiz
Nó
Nó
Nó
FOLHA
FOLHA
FOLHA
FOLHA
FOLHA
FOLHA

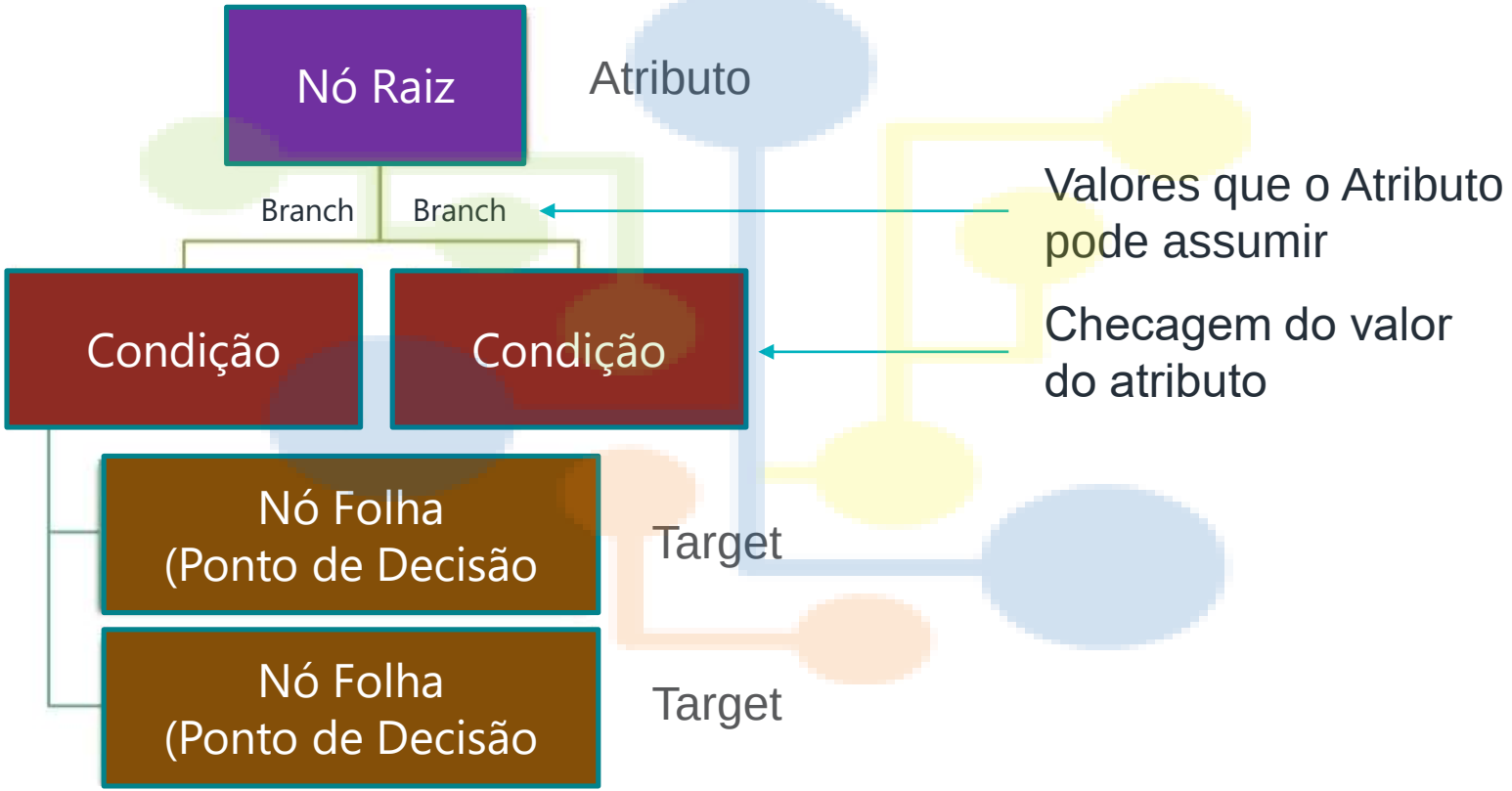


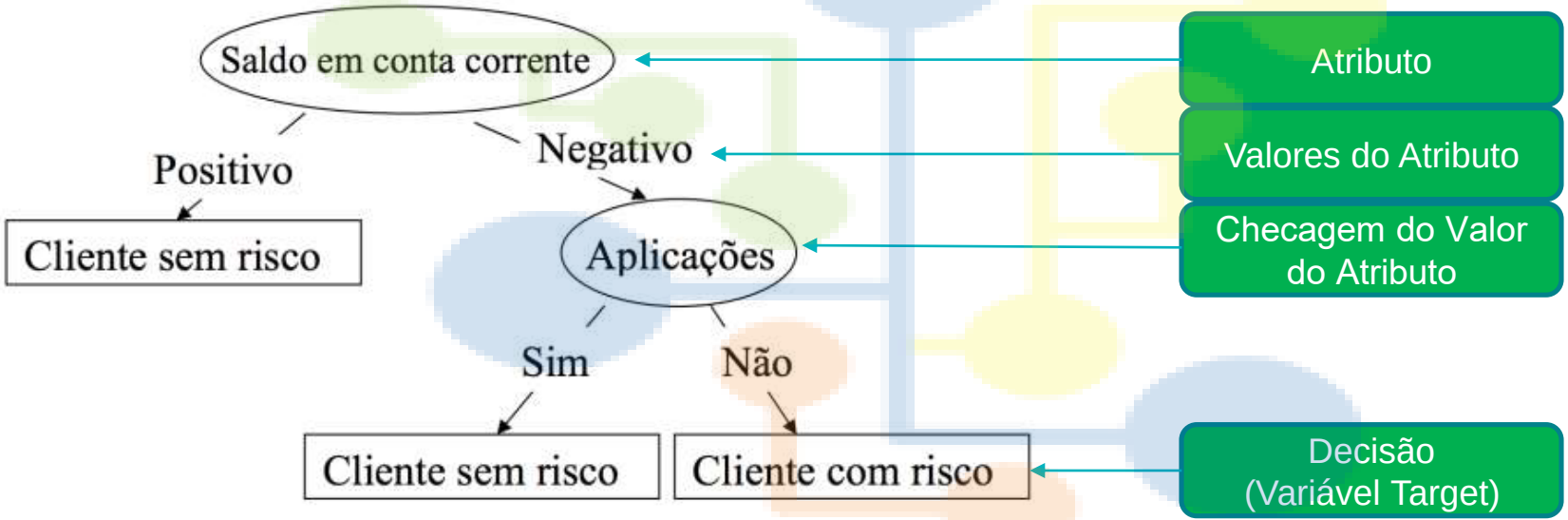
Árvores de Decisão

Definimos um conjunto de regras e para cada regra há uma decisão que precisa ser tomada.

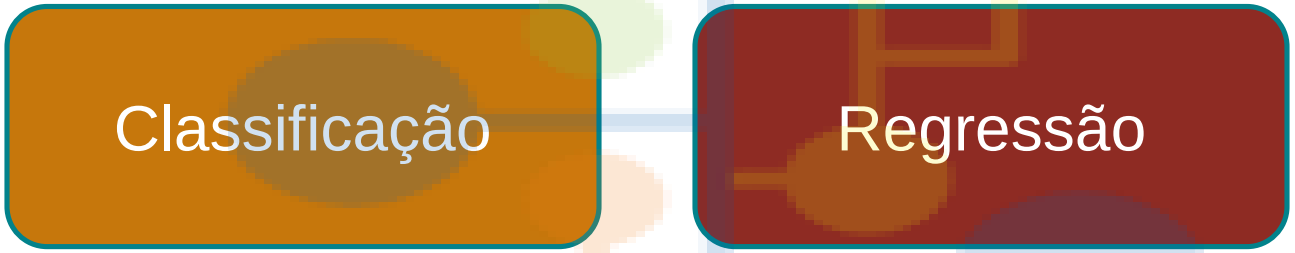

Saldo em conta corrente
Raiz
Positivo
Negativo
Cliente sem risco
Aplicações
Sim
Não
Cliente sem risco
Cliente com risco
Folha


Nó Raiz
Raiz (Root)
Ramo (Branch)
Condição
Condição
Nó (Node)
Nó Folha
(Ponto de Decisão
Leaf (Folha)
Nó Folha
(Ponto de Decisão


Nó Raiz
Atributo
Branch
Branch
Valores que o Atributo pode assumir
Condição
Condição
Checagem do valor do atributo
Nó Folha (Ponto de Decisão
Target
Nó Folha (Ponto de Decisão
Target


Saldo em conta corrente
Positivo
Negativo
Cliente sem risco
Aplicações
Sim
Não
Cliente sem risco
Cliente com risco
Atributo
Valores do Atributo
Checagem do Valor do Atributo
Decisão (Variável Target)

Árvores de Decisão podem ser usadas para problemas de:

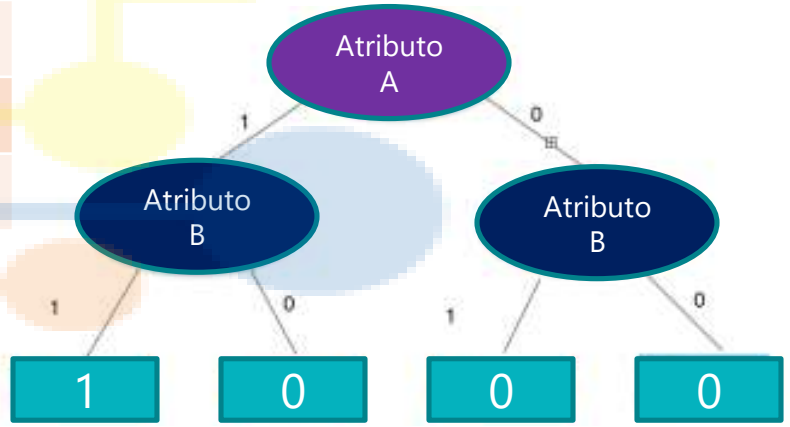


Árvore de Classificação

Árvore de Regressão

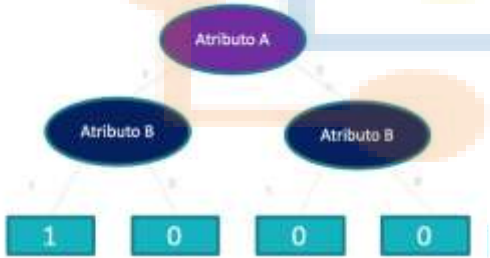
Considerações na Construção de Árvores de Decisão

Atributo A	Atributo B	Saída
0	0	0
0	1	0
1	0	0
1	1	1



Considerações na Construção de Árvores de Decisão

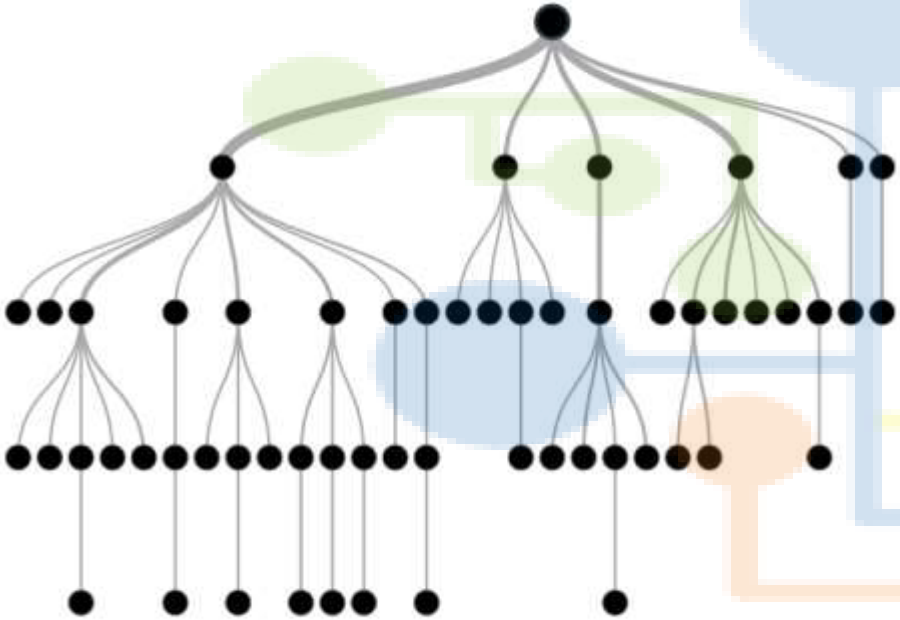
Qual atributo deve ser usado para iniciar a árvore?
Qual deve ser o atributo seguinte?
Quando parar de construir ramos na árvore (para evitar overfitting)?



Considerações na Construção de Árvores de Decisão

Qual atributo deve ser usado para iniciar a árvore?
Qual deve ser o atributo seguinte?
Quando parar de construir ramos na árvore (para evitar overfitting)?

- Ganho de Informação e Entropia
- Índice de Gini (Gini Index)
- Taxa de Ganho (Gain Ratio)

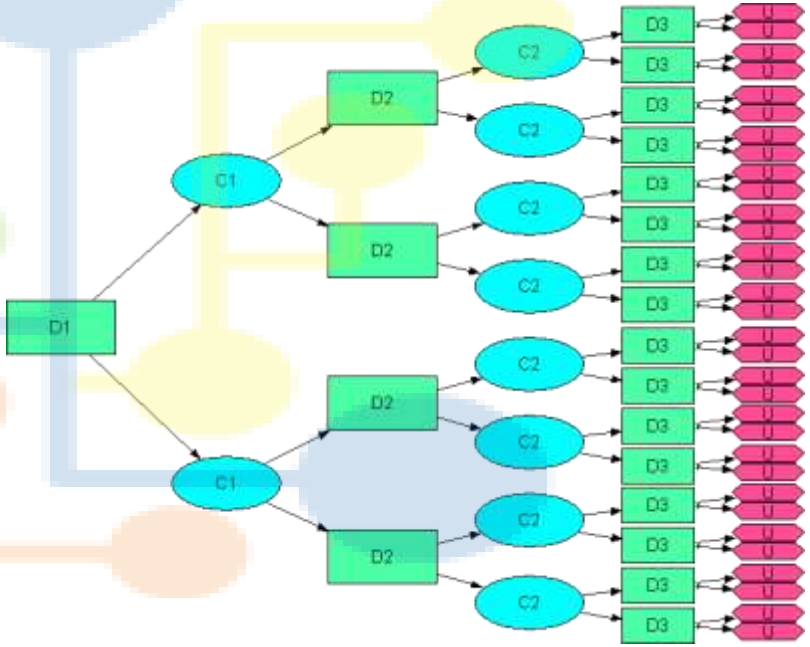


Representação das Árvores de Decisão

Data Science Academy

Ganho de Informação, Entropia, Índice Gini e Pruning

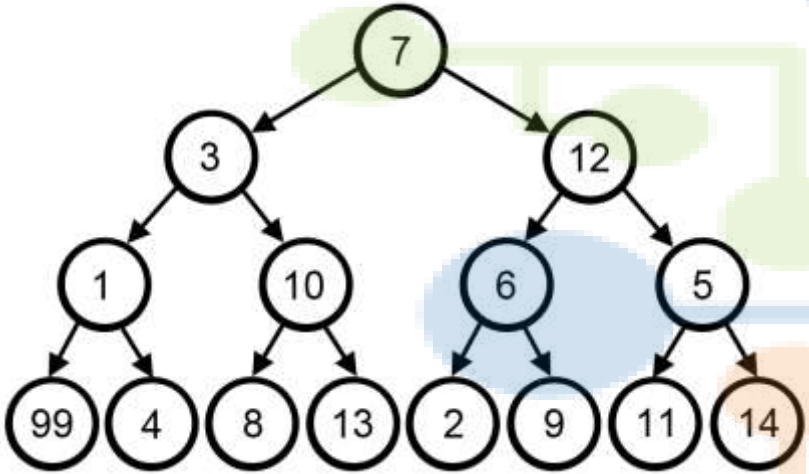
As árvores de decisão têm desfrutado de muita popularidade por causa de seu algoritmo intuitivo. Sua saída é facilmente traduzida em regras e, portanto, é bastante compreensível pelos seres humanos (diferente de modelos como SVM e Redes Neurais, consideradas caixas pretas).



Processo de Aprendizado dos Algoritmos de Árvore de Decisão

Dados → Regras → Partições → Decisão

(Regra de Parada)



Greedy Search
(Busca Gananciosa ou Gulosa)

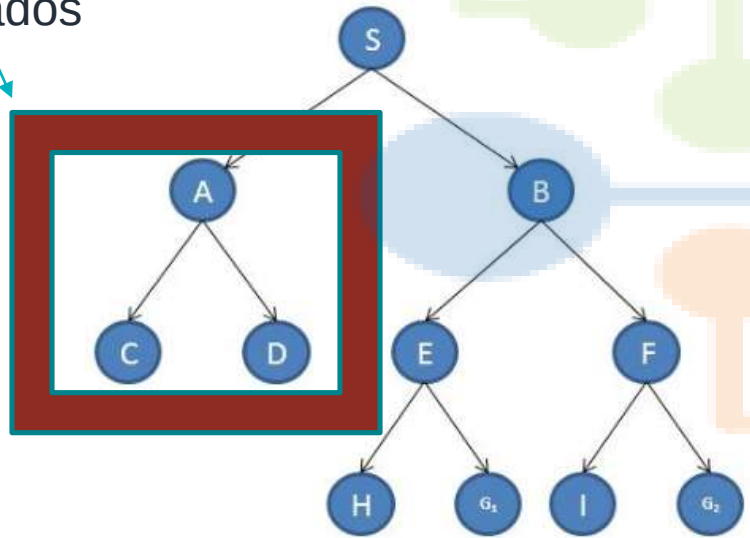
O algoritmo procura maximizar o passo atual sem olhar para o passo seguinte, a fim de alcançar uma otimização global.

Mais detalhes sobre algoritmos gulosos no curso de Introdução à Lógica de Programação disponível para os alunos das Formações DSA.

Greedy Search utiliza uma heurística estimada h(n)

S → Estado inicial
G1,G2 → Objetivo

Partição de Dados



Node	h(n)
A	11
B	5
C	9
D	8
E	4
F	2
H	7
I	3

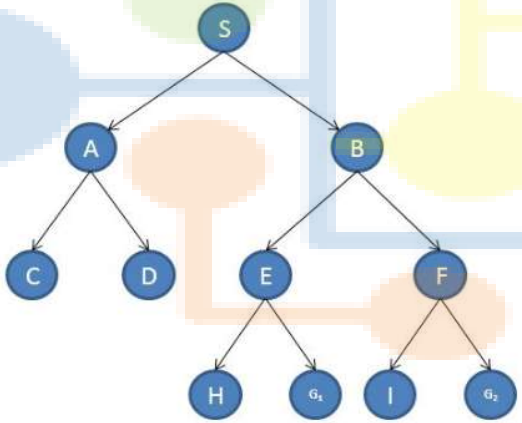
Índice Gini

Ganho de Informação

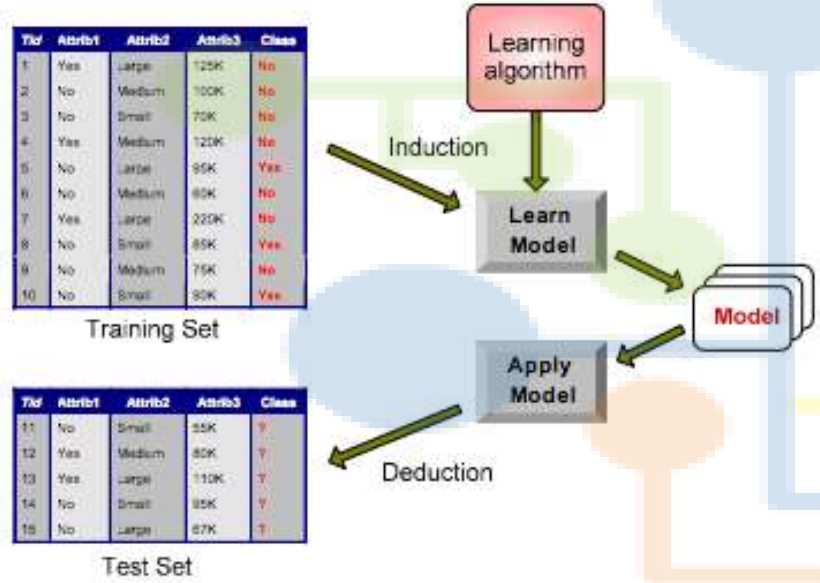
Redução de Variância

Ross Quinlan → (ID3) → C4.5 → C5.0

Como definir o nó raiz e como realizar a divisão do conjunto de dados?

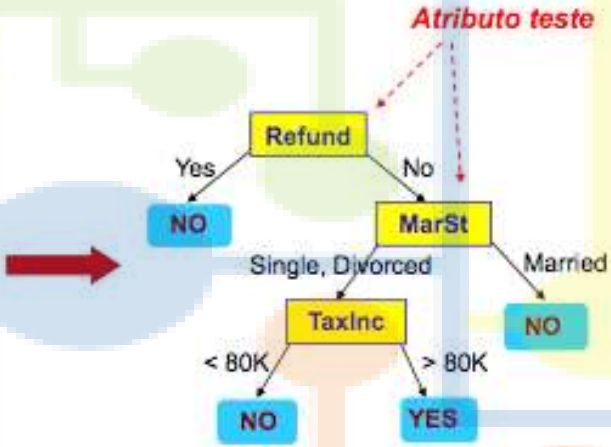


Classificação



	categorical	categorical	continuous	class
Tid	Refund	Marital Status	Taxable Income	Cheat
1	Yes	Single	125K	No
2	No	Married	100K	No
3	No	Single	70K	No
4	Yes	Married	120K	No
5	No	Divorced	95K	Yes
6	No	Married	60K	No
7	Yes	Divorced	220K	No
8	No	Single	85K	Yes
9	No	Married	75K	No
10	No	Single	90K	Yes

Dados de treinamento



Modelo: árvore de decisão

Pode haver mais de um árvore para o mesmo conjunto de dados

Como definir o nó raiz e como realizar a divisão do conjunto de dados?

- Estratégia Gulosa (Greedy Selection)
- Divisão baseada em atributos nominais
  - Divisão Binária
  - Divisão Múltipla
- Divisão baseada em atributos contínuos
  - Decisão Binária
  - Discretização
    - Estática
    - Dinâmica

Você não achou que seria fácil, não é?

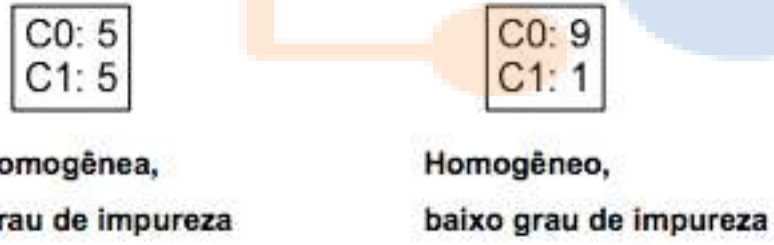
Agora você entende porque Cientistas de Dados são profissionais raros no mercado?

Mas fique tranquilo, pois estamos apenas aquecendo os motores!

Como definir o nó raiz e como realizar a divisão do conjunto de dados?

Estratégia Gulosa (Greedy Selection)

Necessita da medida da “impureza” do nó

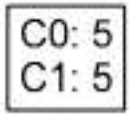


Como definir o nó raiz e como realizar a divisão do conjunto de dados?

Estratégia Gulosa (Greedy Selection)

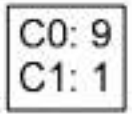
Necessita da medida da "impureza" do nó

- Entropia
- Índice de Gini
- Erro de Classificação



Não-homogênea,

Alto grau de impureza



Homogêneo,

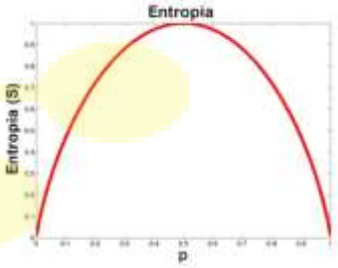
baixo grau de impureza

Entropia é a medida da incerteza nos dados

Ganho de Informação é a redução da Entropia

Entropia

$$Entropy = \sum -p_i \log_2 p_i$$



Entropia máxima considerando duas classes com a mesma probabilidade (distribuição 50/50):

$$Entropy = -0.5*\log_2(0.5) \ -0.5*\log_2(0.5) = 1.0$$

Entropia considerando duas classes com distribuição 40/60:

$$Entropy = -0.4*\log_2(0.4) \ -0.6*\log_2(0.6) = 0.97$$

Nos algoritmos ID3, C4.5 e C5.0, o nó raiz é escolhido com base em quanto do total da Entropia é reduzido, se aquele nó é escolhido

Isso é chamado de Ganho de Informação!

Ganho de Informação = Entropia do sistema antes da divisão – Entropia do sistema após a divisão

Ganho de Informação = Entropia do sistema antes da divisão – Entropia do sistema após a divisão

$$E = -\sum_{i=1}^{m} p_i log_2(p_i)$$

$$E_A = \sum_{i=1}^{v} \frac{D_i}{D} E(D_i)$$

Esta metodologia (Entropia) é aplicada para computar o ganho de informação para todos os atributos. É escolhido o atributo com o **mais alto ganho de informação**. Isso é testado para cada nó a fim de escolher o melhor nó.

Índice de Gini

O Índice de Gini é usado para medir a probabilidade de dois itens aleatórios pertencerem à mesma classe.

A medida de Gini de um nó é a soma dos quadrados das proporções das classes.

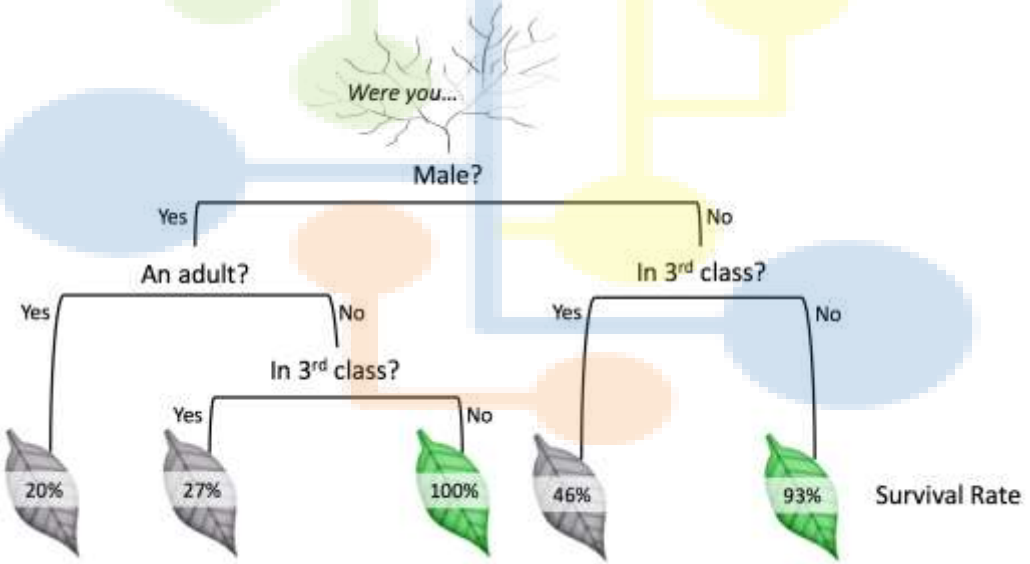
Índice de Gini

O Índice de Gini diz: se selecionarmos dois itens de uma população aleatoriamente, então eles devem ser da mesma classe e a probabilidade para isto é 1 se a população é pura.

Índice de Gini

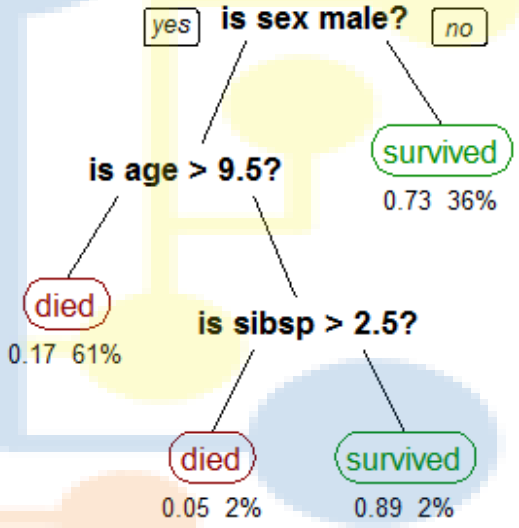
O Índice de Gini é usado como regra de parada para construção de uma árvore de decisão.

O que são as regras de parada (Stopping Rules)?



Regras de Parada

- Índice Gini
- Qui-quadrado
- Ganho de Informação
- Redução de Variância



Pruning
Poda da Árvore

Pruning

- A árvore de decisão é concluída antes que uma classificação perfeita dos dados de treinamento seja alcançada.
- Ocorre o excesso de ajuste nos dados gerando um modelo e, em seguida, a árvore é podada (Pruning) para se tornar generalizável.

E como definir o tamanho correto da árvore?

Usar um conjunto de validação

Usar métodos probabilísticos

O classificador de árvore de decisão do Scikit-Learn não suporta atualmente o Pruning. Pacotes avançados como o XGBoost adotaram a poda de árvores em sua implementação. Mas a biblioteca rpart em R, fornece uma função para Pruning.

Viu por que é importante conhecer mais de uma ferramenta?

Data Science Academy

Algoritmo ID3

O que são heurísticas?

Começa com todos os exemplos de treino

Escolhe o teste (atributo) que melhor divide os exemplos, ou seja agrupa exemplos da mesma classe ou exemplos semelhantes

Para o atributo escolhido, é criado um nó filho para cada valor possível do atributo

Transporta os exemplos para cada filho considerando o valor do filho

Repete o procedimento para cada filho não "puro".

E como o algoritmo sabe o melhor atributo a escolher?

Através do Ganho de Informação e Entropia!!

A heurística ID3

Espaço de Hipóteses do ID3

ID3 (Iterative Dichotomizer 3)

C4.5

C5.0

CART
(Classification and Regression Trees)

Continue Trilhando uma Excelente Jornada de Aprendizagem!

Muito Obrigado!