

Árvores, Redes e Ensemble Models IV

João Fernando Serrajordia Rocha de Mello

MBAUSP ESALQ

A responsabilidade pela idoneidade, originalidade e licitude dos conteúdos didáticos apresentados é do professor.

Proibida a reprodução, total ou parcial, sem autorização.

Lei nº 9610/98

Você vai precisar de...



Preparativos

- Abrir o Spyder
- Rodar o script 00
- Algo para fazer suas anotações



Revisão

Histórico

Ideias básicas

Usos



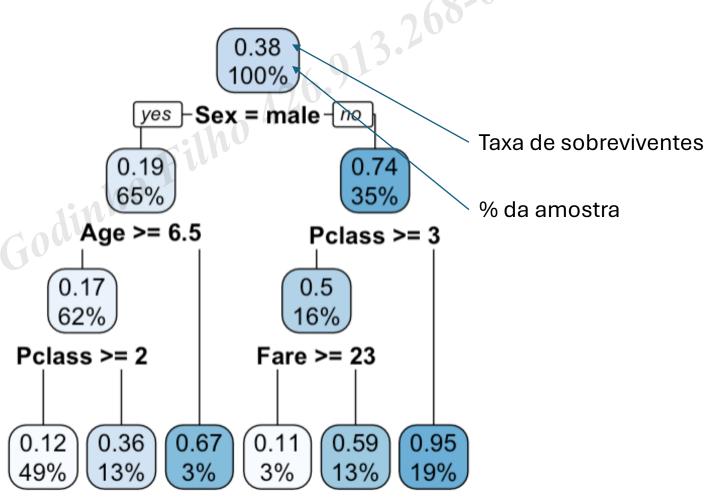
*A responsabilidade pela idoneidade, originalidade e licitude dos conteúdos didáticos apresentados é do professor. **Proibida a reprodução**, total ou parcial, sem autorização. Lei nº 9610/98



O que é uma árvore de decisão?

A árvore de decisão é:

Uma sequência de segmentações binárias Que visa homogeneidade da variável resposta



^{*}A responsabilidade pela idoneidade, originalidade e licitude dos conteúdos didáticos apresentados é do professor. **Proibida a reprodução**, total ou parcial, sem autorização. Lei nº 9610/98

Índice de Gini

$$I_g(p) = 1 - \sum_{i=1}^{J} p_i^2$$

- Impureza máxima com distribuição uniforme
- Impureza mínima na concentração total





```
DecisionTreeClassifier(*, criterion="gini", splitter="best",
                       max_depth=None, min_samples_split=2,
                       min_samples_leaf=1,
                       min_weight_fraction_leaf=0.0,
                       max features=None, random state=None,
                       max leaf_nodes=None,
                       min_impurity_decrease=0.0,
                       class_weight=None, ccp_alpha=0.0,
                       monotonic_cst=None)
```

```
DecisionTreeClassifier(*, criterion="gini", splitter="best",
                       max_depth=None, min_samples_split=2,
                       min samples leaf=1,
                       min weight fraction leaf=0.0,
                       max_features=None, random_state=None,
                       max leaf nodes=None,
                       min impurity_decrease=0.0,
                       class_weight=None, ccp_alpha=0.0,
                       monotonic_cst=None)
```

Criterion – é o critério. Pode ser GINI ou Entropia na árvore de classificação.



```
DecisionTreeClassifier(*, criterion="gini", splitter="best",
                       max_depth=None, min_samples_split=2,
                       min samples leaf=1,
                       min weight fraction leaf=0.0,
                       max_features=None, random_state=None,
                       max leaf nodes=None,
                       min_impurity_decrease=0.0,
                       class_weight=None, ccp_alpha=0.0,
                       monotonic_cst=None)
```

Splitter – como é escolhida a quebra. Pode ser 'best' ou 'Random' – a melhor quebra ou aleatória.



```
DecisionTreeClassifier(*, criterion="gini", splitter="best",
                       max_depth=None, min_samples split=2,
                       min samples leaf=1,
                       min weight fraction leaf=0.0,
                       max_features=None, random_state=None,
                       max leaf nodes=None,
                       min_impurity_decrease=0.0,
                       class_weight=None, ccp_alpha=0.0,
                       monotonic_cst=None)
```

Max_depth – a profundidade máxima da árvore (o número máximo de quebras para classificar um indivíduo)



```
DecisionTreeClassifier(*, criterion="gini", splitter="best",
                       max_depth=None, min_samples_split=2,
                       min samples leaf=1,
                       min weight fraction leaf=0.0,
                       max_features=None, random_state=None,
                       max leaf nodes=None,
                       min_impurity_decrease=0.0,
                       class_weight=None, ccp_alpha=0.0,
                       monotonic_cst=None)
```

Min_samples_split – o número mínimo de observações para se procurar um split



```
DecisionTreeClassifier(*, criterion="gini", splitter="best",
                       max_depth=None, min_samples_split=2,
                       min samples leaf=1,
                       min weight fraction leaf=0.0,
                       max_features=None, random_state=None,
                       max leaf nodes=None,
                       min_impurity_decrease=0.0,
                       class_weight=None, ccp_alpha=0.0,
                       monotonic_cst=None)
```

Min_samples_leaf – o número mínimo de observações permitido por folha



```
DecisionTreeClassifier(*, criterion="gini", splitter="best",
                       max_depth=None, min_samples_split=2,
                       min samples leaf=1,
                       min weight fraction leaf=0.0,
                       max_features=None, random_state=None,
                       max leaf nodes=None,
                       min_impurity_decrease=0.0,
                       class_weight=None, ccp_alpha=0.0,
                       monotonic_cst=None)
```

Max features – sorteia as variáveis a serem consideradas a cada quebra.

```
DecisionTreeClassifier(*, criterion="gini", splitter="best",
                       max_depth=None, min_samples_split=2,
                       min samples leaf=1,
                       min weight fraction leaf=0.0,
                       max_features=None, random_state=None,
                       max leaf nodes=None,
                       min_impurity_decrease=0.0,
                       class_weight=None, ccp_alpha=0.0,
                       monotonic_cst=None)
```

Max leaf nodes – O número máximo permitido de folhas na árvore final.



```
DecisionTreeClassifier(*, criterion="gini", splitter="best",
                       max_depth=None, min_samples split=2,
                       min samples leaf=1,
                       min weight fraction leaf=0.0,
                       max_features=None, random_state=None,
                       max leaf nodes=None,
                       min_impurity_decrease=0.0,
                       class_weight=None, ccp_alpha=0.0,
                       monotonic_cst=None)
```

Min_impurity_decrease - A cada quebra testa se o ganho é maior que este parâmetro.



```
DecisionTreeClassifier(*, criterion="gini", splitter="best",
                       max depth=None, min samples split=2,
                       min samples leaf=1,
                       min_weight_fraction_leaf=0.0,
                       max features=None, random state=None,
                       max leaf_nodes=None,
                       min_impurity_decrease=0.0,
                       class weight=None, ccp alpha=0.0,
                       monotonic_cst=None)
```

Class_weight – controla a ponderação da target:

None – peso 1 para todos,

'balanced' – emula uma amostra estratificada.



```
DecisionTreeClassifier(*, criterion="gini", splitter="best",
                       max depth=None, min samples split=2,
                       min_samples_leaf=1,
                       min_weight_fraction_leaf=0.0,
                       max features=None, random state=None,
                       max leaf nodes=None,
                       min_impurity_decrease=0.0,
                       class weight=None, ccp alpha=0.0,
                       monotonic cst=None)
```

Min_weight_fraction_leaf- Semelhante a min_samples_leaf, mas ponderado pelos pesos das classes.



```
DecisionTreeClassifier(*, criterion="gini", splitter="best",
                       max_depth=None, min_samples_split=2,
                       min samples leaf=1,
                       min_weight_fraction_leaf=0.0,
                       max_features=None, random_state=None,
                       max leaf nodes=None,
                       min_impurity_decrease=0.0,
                       class_weight=None, ccp_alpha=0.0,
                       monotonic_cst=None)
```

Ccp_alpha – Semelhante a min_impurity_decrease, mas elimina quebras após a árvore estar pronta.



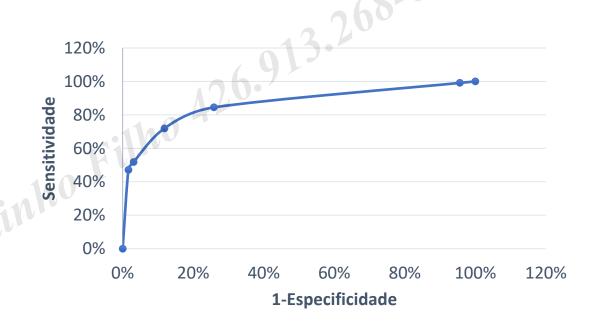
```
DecisionTreeClassifier(*, criterion="gini", splitter="best",
                       max depth=None, min samples split=2,
                       min samples leaf=1,
                       min_weight_fraction_leaf=0.0,
                       max_features=None, random_state=None,
                       max leaf nodes=None,
                       min_impurity_decrease=0.0,
                       class_weight=None, ccp_alpha=0.0,
                       monotonic_cst=None)
```

Monotonic_cst – restrições monotônicas: define se a ordem das variáveis será importante. Se pode passar uma lista indicando quais variáveis são ordinais, quais não.



Curva ROC

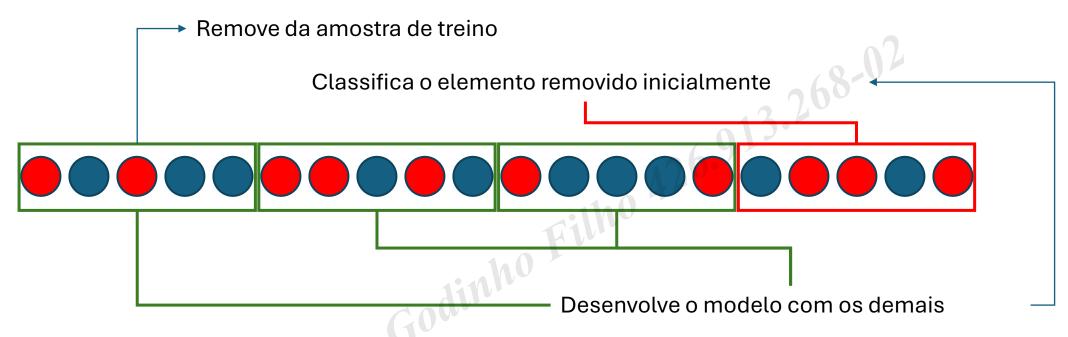
Corte	1-Especificidade	Sensibilidade
0% - 11,1%	100%	100%
11,1% - 11,5%	96%	99%
11,5% - 35,8%	26%	85%
35,8% - 58,9%	12%	72%
58,9% - 66,7%	3%	52%
66,7% - 94,7%	2%	47%
94,7% - 100%	0%	0%



A curva ROC é um gráfico de dispersão de 1-Especificidade no eixo x por Sensibilidade no eixo y, obtidos para cada possível ponto de corte do classificador.



K-fold



- Dividimos a base em k subamostras
- Para cada subamostra:
 - Removemos a subamostra como validação
 - Treinamos o modelo com as observações restantes
 - Utilizamos este modelo para classificar a subamostra removida
 - Avaliamos a métrica de desempenho do modelo
- Calculamos a média das métricas de desempenho do modelo



K-fold

Tipicamente, fazemos o mesmo para variações do modelo para otimizar hiperparâmetros.

	13.					
	Acurácia 1	Acurácia 2	Acurácia 3	Acurácia 4	Acurácia Média	
Modelo 1	62%	58%	61%	59%	60%	
Modelo 2	50%	51%	49%	47%	49%	
Modelo 3	72%	68%	71%	75%	72%	

MRAUSP

Exemplo numérico



Exemplo revisado no titanic

Vamos abrir o Spyder

Valther Serasim Go







Ensemble

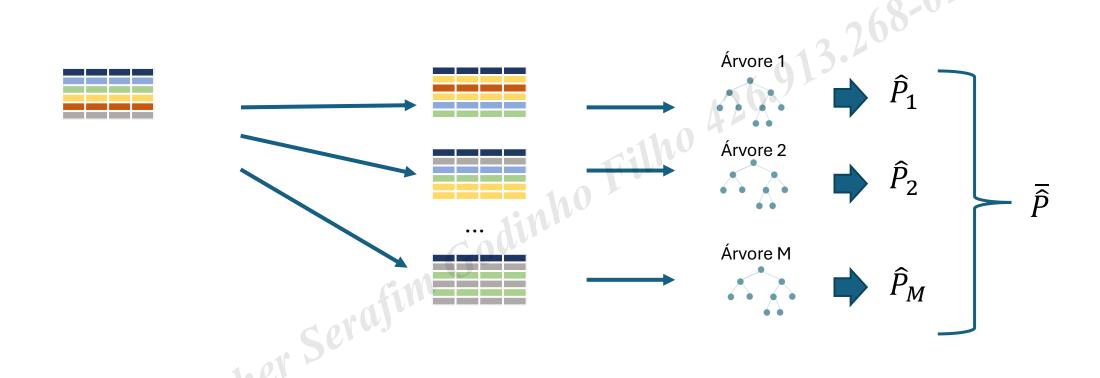
Um ensemble é qualquer mistura de modelos já existentes. Os principais tipos são:

Bagging

Boosting

Stacking





O bagging com árvores é o famoso Random Forest



```
RandomForestClassifier(n estimators=100, *,
                       criterion="gini", max_depth=None,
                       min_samples_split=2,
                       min samples leaf=1,
                       min weight fraction leaf=0.0,
                       max features="sqrt",
                       max leaf nodes=None,
                       min_impurity_decrease=0.0,
                       bootstrap=True, oob score=False,
                       n jobs=None, random state=None,
                       verbose=0, warm start=False,
                       class_weight=None, ccp_alpha=0.0,
                       max_samples=None, monotonic_cst=None)
```

Bootstrap = True – amostragem com reposição Bootstrap = False – amostragem sem reposição



```
id x1 x2 x3 x4 x5

1 0,7 0,1 0,8 0,1 0,1

2 0,8 0,8 0,8 0,9 0,8

3 0 0,8 0 0,7 0,3

4 0,6 0,1 1 0 0,6

5 0,2 0,3 0,6 0,5 0,6

6 0,5 0,2 0,7 0,4 0,7
```



```
id x1 x2 x3 x4 x5

1 0,7 0,1 0,8 0,1 0,1

3 0 0,8 0 0,7 0,3

6 0,5 0,2 0,7 0,4 0,7
```

Max_features – número de variáveis sorteadas por árvore treinada.



```
RandomForestClassifier(n estimators=100, *,
                       criterion="gini", max depth=None,
                       min_samples_split=2,
                       min samples leaf=1,
                       min weight fraction leaf=0.0,
                       max features="sqrt",
                       max leaf nodes=None,
                       min_impurity_decrease=0.0,
                       bootstrap=True, oob score=False,
                       n jobs=None, random state=None,
                       verbose=0, warm_start=False,
                       class_weight=None, ccp_alpha=0.0,
                       max_samples=None, monotonic_cst=None)
```

OOB – out of bag. Usa as observações não selecionadas da amostragem como validação cruzada.



```
RandomForestClassifier(n estimators=100, *,
                       criterion="gini", max depth=None,
                       min samples split=2,
                       min samples leaf=1,
                       min weight fraction leaf=0.0,
                       max features="sqrt",
                       max leaf nodes=None,
                       min_impurity_decrease=0.0,
                       bootstrap=True, oob score=False,
                       n jobs=None, random_state=None,
                       verbose=0, warm_start=False,
                       class weight=None, ccp alpha=0.0,
                       max_samples=None, monotonic_cst=None)
```

Warm_start – se True, não inicia o treinamento do zero, mas sim adiciona árvores ao modelo já treinado.



Exemplo revisado no titanic

Vamos abrir o Spyder

Valther Serasim Go

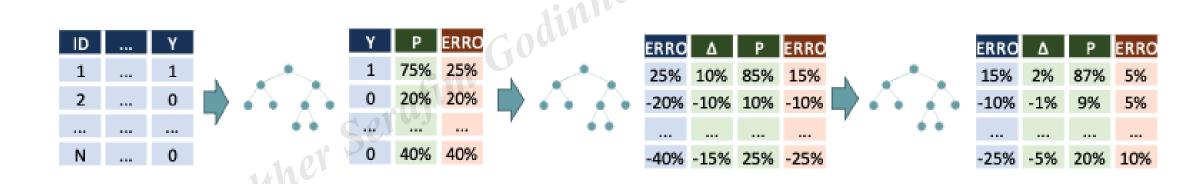






Gradient Boosting

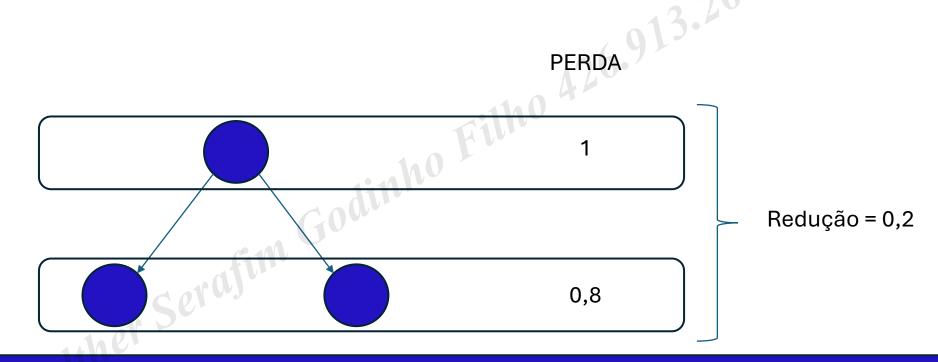
• O *Gradiente Boosting* um boosting baseado em árvores com alguns hiperparâmetros que controlam o algoritmo



913.268-02

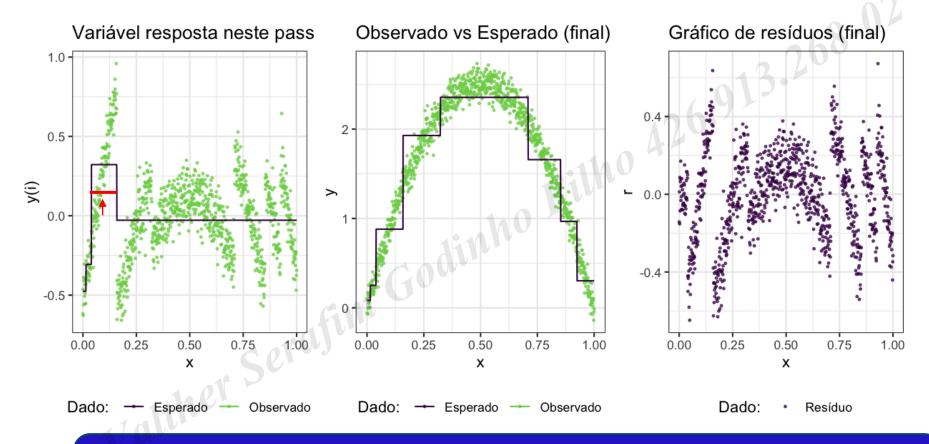
XGBoost - hiperparâmetros

• Gamma – redução mínima de perda



Se usa em geral valores de gamma entre 0 e 10. O valor ótimo pode variar muito de um problema para outro.

XGBoost - eta

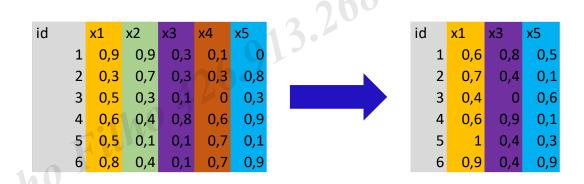


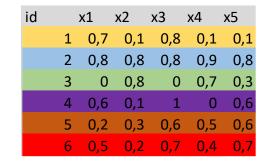
O Learning Rate diminui o impacto de cada iteração costuma demandar mais iterações, mas ajuda a alcançar melhores resultados

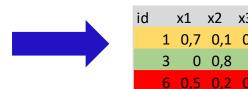


XGBoost - hiperparâmetros

- Colsample_bytree o número de variáveis sorteadas a cada passo
 - Controla o número de colunas sorteadas a cada passo.
- Subsample (variação) o percentual da amostra no bootstrap
 - Controla o número de linhas sorteadas a cada passo.





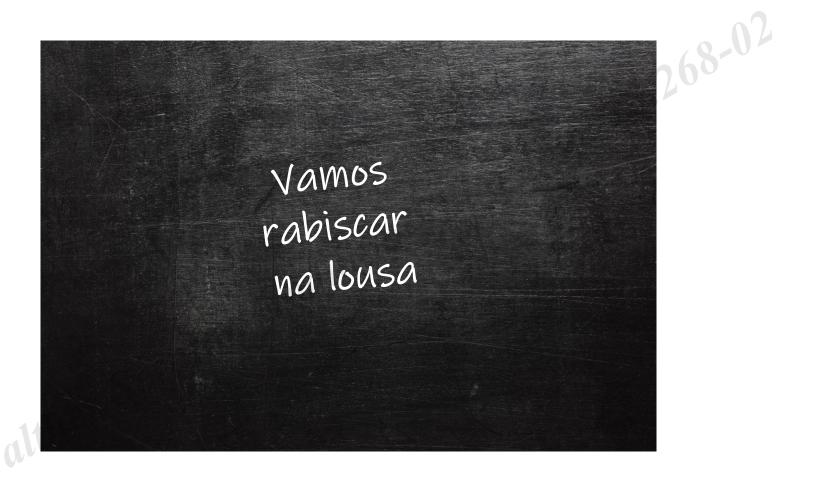


XGBoost - hiperparâmetros

• Lambda - Regularização

$$Loss = \frac{\sum_{j} R^2}{Num. R + \lambda}$$

XGBoost - hiperparâmetros





Exemplo revisado no titanic

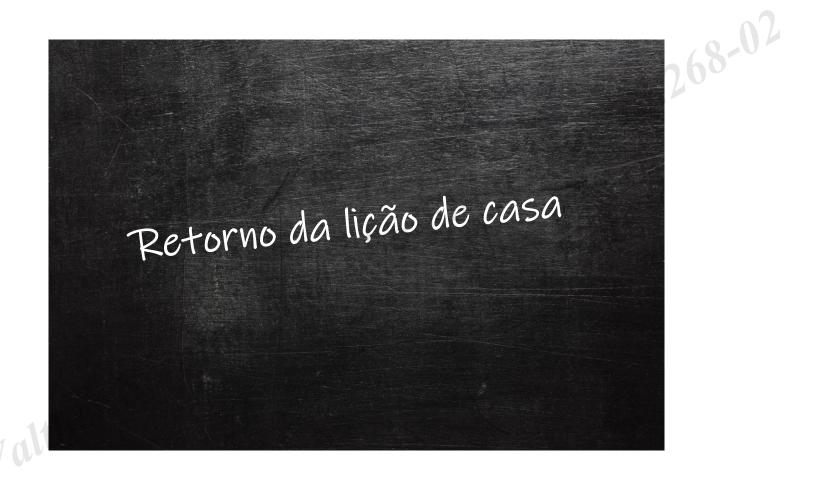
Vamos abrir o Spyder

Valther Serasim Go



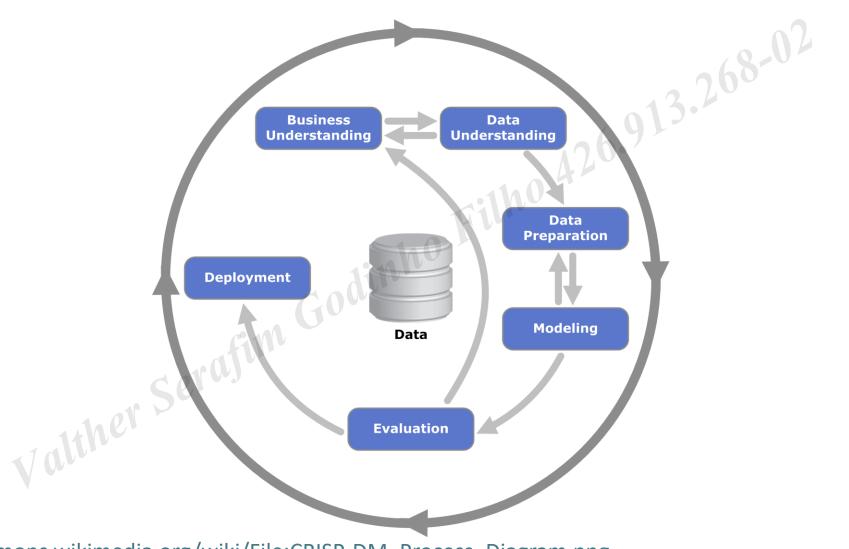


XGBoost - hiperparâmetros





CRISP-DM





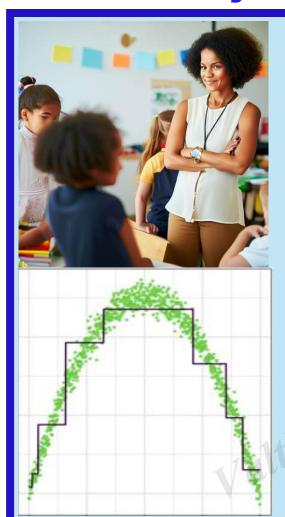


Classificação

Valther Serafim Godinho Filho 426.913.268-02



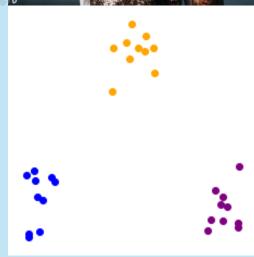
Classificação dos algoritmos



Supervisionados

- Regressão
- GLM
- GLMM
- Support vector machines
- Naive Bayes
- K-nearest neighbors
- Redes Neurais
- Decision Trees





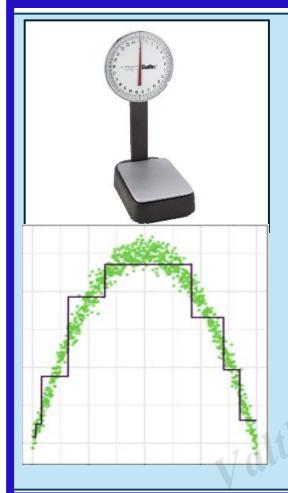
Não supervisionados

- K-Means
- Métodos hierárquicos
- Mistura Gaussiana
- DBScan
- Mini-Batch-K-Means





Classificação dos algoritmos



Resposta contínua

- Regressão
- GLM
- GLMM
- Support vector machines
- K-nearest neighbors
- Redes Neurais
- Regression Trees

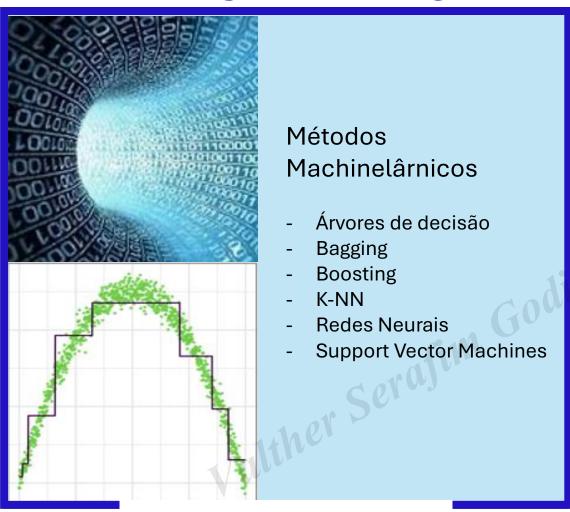


Resposta discreta

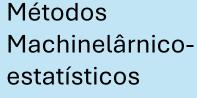
- Regressão logística
- Classification trees
- Redes Neurais
- GLM
- GLMM

Estamos aqui!

Classificação dos algoritmos



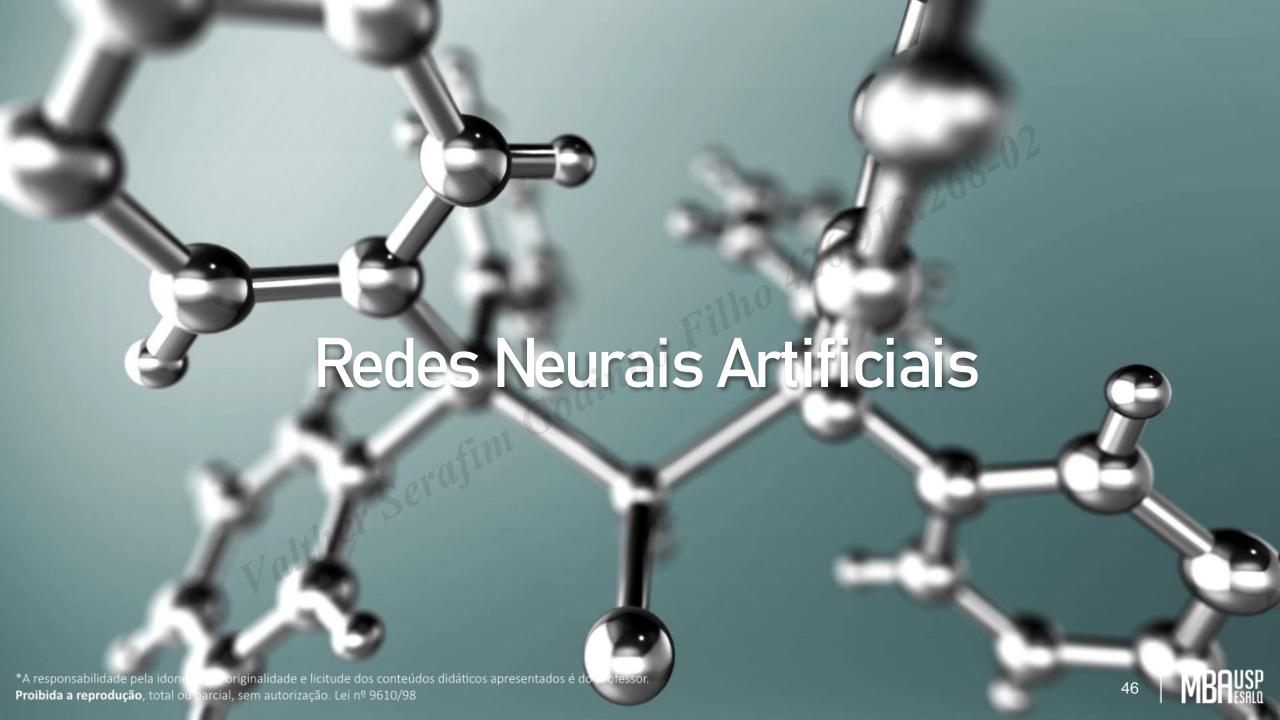




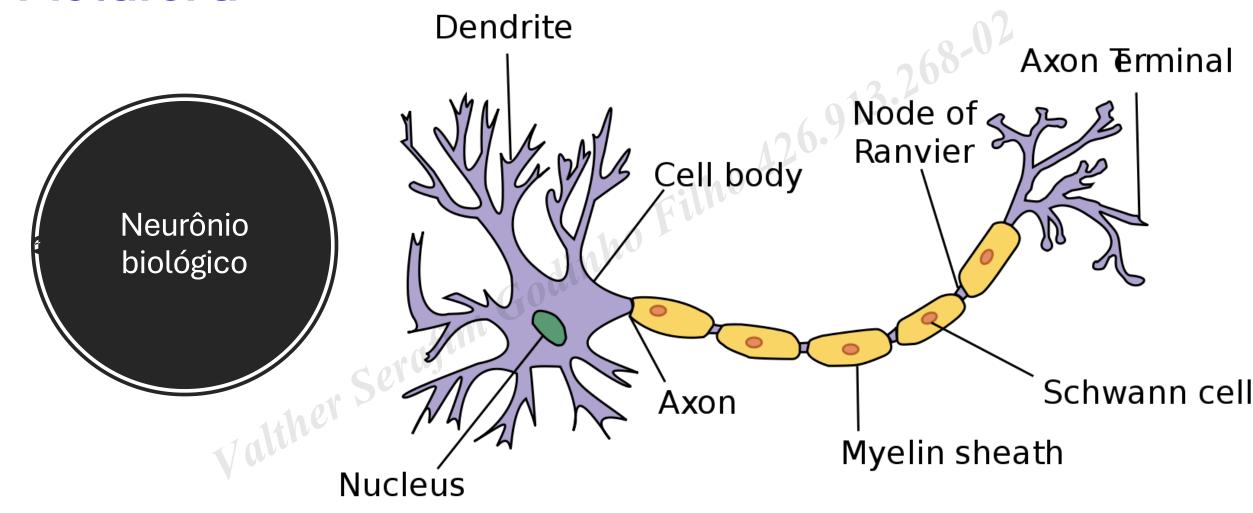
- Regressão
- GLM
- GLMM
- ANOVA

Estamos aqui!

MBAUSP

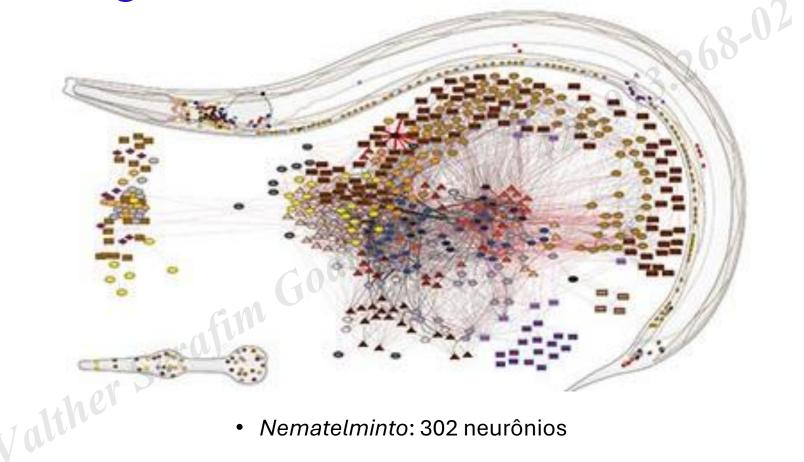


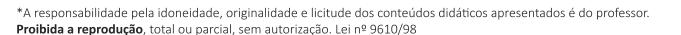
Metáfora



https://en.wikipedia.org/wiki/Myelin

Exemplo biológico

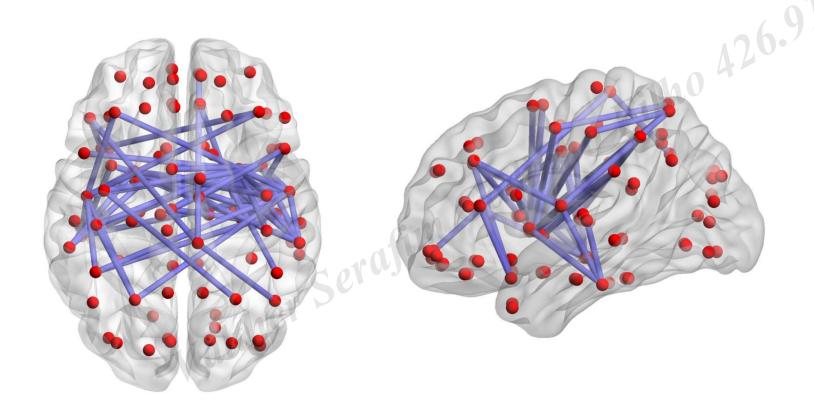


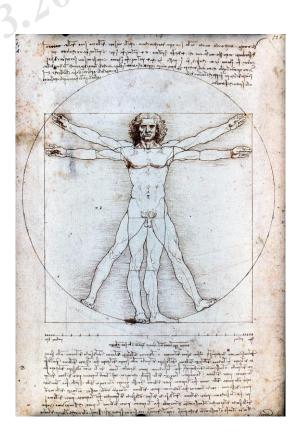




Rede Neural Humana

• *Homo sapiens*: 100.000.000 de neurônios

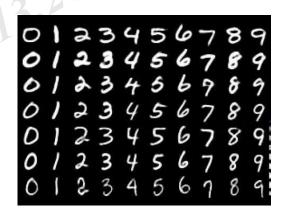




Onde vivem?







Redes Neurais Artificiais têm tido muito sucesso em problemas com dados pouco estruturados como imagens, áudios, textos e vídeos.

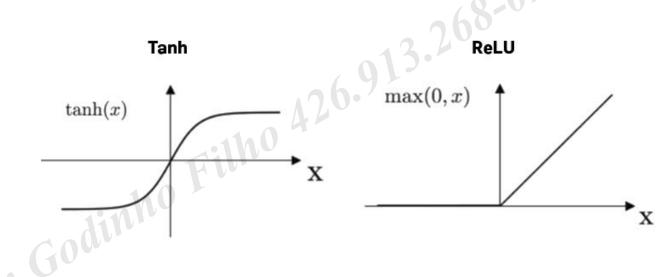


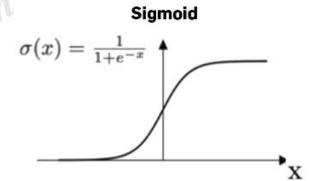
Funções de ativação

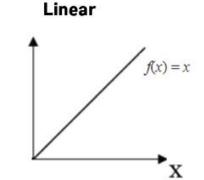
Cada neurônio da RNA é uma função não linear de uma combinação linear dos elementos da camada anterior.

Essa função é chamada de função de ativação.

Na analogia com a rede neural natural, ele visa identificar a presença ou não de um estímulo específico.





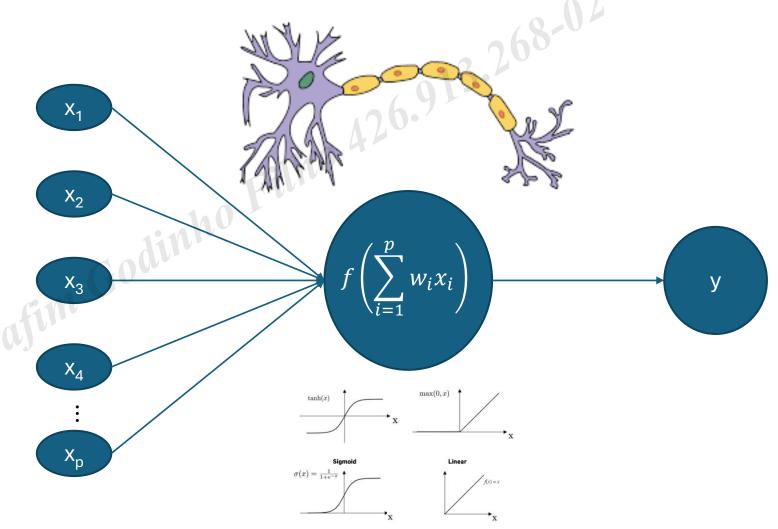


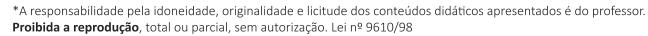


Perceptron

O perceptron é um tipo de neurônio bastante comum nas RNAs.

Eles podem ainda ser combinados de formas diferentes formando diferentes arquiteturas de RNAs.







Redes Neurais Artificiais

Combinações de perceptrons

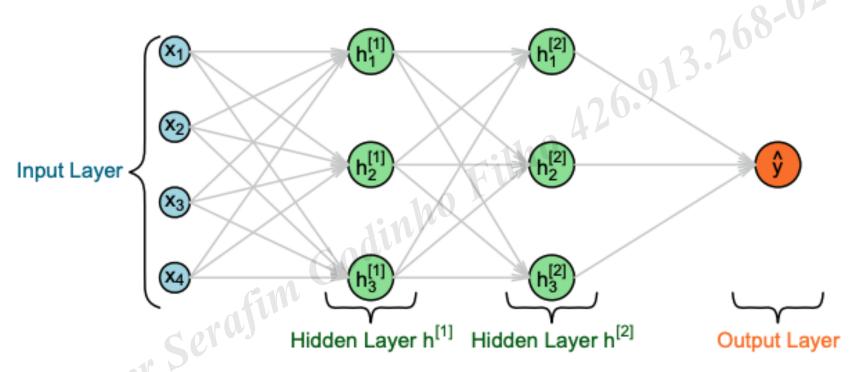


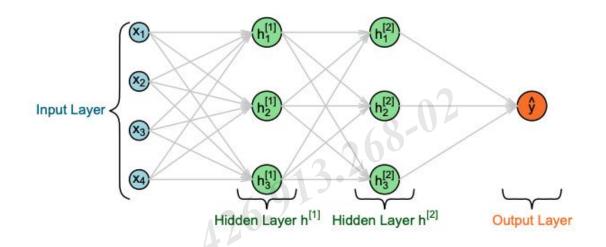
Fig. 2.3 A representation of a neural network with four input features, two hidden layers with three nodes each, and an output layer

Deep learning with R - Abhijit Ghatak, ed. Springer, 2019

- Há várias implementações de RNA disponíveis.
- O Scikit Learn já tem diversas funções implementadas, inclusive RNA.
- Pacotes bem populares e poderosos são o PyTorch do facebook, e o Tensorflow/Keras, do Google.

Valther Serafin Godinho Filmo

```
# Primeira rede neural
params = { 'hidden_layer_sizes' : [3, 3, 1],
  'activation': 'logistic',
  'solver': 'adam',
  'alpha' : 0.0,
  'batch size': 10,
                              Serafim Godinha.
  'learning_rate': 'constant',
  'learning_rate_init': 0.01,
  'random state': 1729,
  'tol': 0.0001,
  'max iter': 10000,
  'verbose' : False }
nn0 = MLPRegressor(**params)
nn0.fit(df1[['x']], df1['y'])
df1['pred0'] = nn0.predict(df1[['x']])
```



Podemos definir um dicionário com os parâmetros a passar para a função.



```
# Primeira rede neural
params = { 'hidden_layer_sizes' : [1],
  'activation': 'logistic',
  'solver': 'adam',
  'alpha' : 0.0,
  'batch size': 10,
  'learning rate': 'constant',
  'learning_rate_init': 0.01,
  'random_state': 1729,
  'tol': 0.0001,
  'max iter': 10000,
  'verbose' : False }
nn0 = MLPRegressor(**params)
nn0.fit(df1[['x']], df1['y'])
df1['pred0'] = nn0.predict(df1[['x']])
```

Aqui definimos a função de ativação como 'logística'.

$$\ln\left(\frac{p}{1-p}\right)$$



```
# Primeira rede neural
params = { 'hidden_layer_sizes' : [1],
  'activation': 'logistic',
  'solver': 'adam',
  'alpha' : 0.0,
  'batch size': 10,
  'learning rate': 'constant',
  'learning_rate_init': 0.01,
  'random_state': 1729,
  'tol': 0.0001,
  'max iter': 10000,
  'verbose' : False }
nn0 = MLPRegressor(**params)
nn0.fit(df1[['x']], df1['y'])
df1['pred0'] = nn0.predict(df1[['x']])
```

Aqui definimos o otimizados. 'adam' é um popular otimizador estocástico que costuma ser eficiente.

```
# Primeira rede neural
params = { 'hidden_layer_sizes' : [1],
  'activation' : 'logistic',
  'solver': 'adam',
  'alpha' : 0.0,
  'batch size': 10,
  'learning_rate': 'constant',
  'learning_rate_init': 0.01,
  'random state': 1729,
  'tol': 0.0001,
  'max iter': 10000,
  'verbose' : False }
nn0 = MLPRegressor(**params)
nn0.fit(df1[['x']], df1['y'])
df1['pred0'] = nn0.predict(df1[['x']])
```

Aqui definimos a taxa de regularização L2.
No caso, 0 indica que não há penalização.
Quanto maior este número, maior a 'parcimônia' da rede.

```
# Primeira rede neural
params = { 'hidden_layer_sizes' : [1],
  'activation': 'logistic',
  'solver': 'adam',
  'alpha' : 0.0,
  'batch size': 10,
  'learning rate': 'constant',
  'learning_rate_init': 0.01,
  'random_state': 1729,
  'tol': 0.0001,
  'max iter': 10000,
  'verbose' : False }
nn0 = MLPRegressor(**params)
nn0.fit(df1[['x']], df1['y'])
df1['pred0'] = nn0.predict(df1[['x']])
```

"batch" é a quantidade de linhas que serão processadas a cada momento.

```
# Primeira rede neural
params = { 'hidden_layer_sizes' : [1],
  'activation': 'logistic',
  'solver': 'adam',
  'alpha' : 0.0,
  'batch size': 10,
  'learning rate': 'constant',
  'learning_rate_init': 0.01,
  'random_state': 1729,
  'tol': 0.0001,
  'max iter': 10000,
  'verbose' : False }
nn0 = MLPRegressor(**params)
nn0.fit(df1[['x']], df1['y'])
df1['pred0'] = nn0.predict(df1[['x']])
```

O learning rate é
semelhante ao do
XGBoost. Ele pode
diminuir com o tempo
ou ser constante.

```
# Primeira rede neural
params = { 'hidden_layer_sizes' : [1],
  'activation': 'logistic',
  'solver': 'adam',
  'alpha' : 0.0,
  'batch_size': 10,
  'learning rate': 'constant',
  'learning_rate_init': 0.01,
  'random state': 1729,
  'tol': 0.0001,
  'max iter': 10000,
  'verbose' : False }
nn0 = MLPRegressor(**params)
nn0.fit(df1[['x']], df1['y'])
df1['pred0'] = nn0.predict(df1[['x']])
```

```
Chave aleatória.
```

```
# Primeira rede neural
params = { 'hidden_layer_sizes' : [1],
  'activation': 'logistic',
  'solver': 'adam',
  'alpha' : 0.0,
  'batch size': 10,
  'learning rate': 'constant',
  'learning_rate_init': 0.01,
  'random state': 1729,
  'tol': 0.0001,
  'max_iter' : 10000,
  'verbose' : False }
nn0 = MLPRegressor(**params)
nn0.fit(df1[['x']], df1['y'])
df1['pred0'] = nn0.predict(df1[['x']])
```

A tolerância é um critério de parada. Quando a melhoria é menor que este valor o algoritmo para.

```
# Primeira rede neural
params = { 'hidden_layer_sizes' : [1],
  'activation': 'logistic',
  'solver': 'adam',
  'alpha' : 0.0,
  'batch_size': 10,
  'learning rate': 'constant',
  'learning_rate_init': 0.01,
  'random_state': 1729,
  'tol': 0.0001,
  'max iter': 10000,
  'verbose' : False }
nn0 = MLPRegressor(**params)
nn0.fit(df1[['x']], df1['y'])
df1['pred0'] = nn0.predict(df1[['x']])
```

O algoritmo é iterativo. Aqui definimos o número máximo de iterações.

```
# Primeira rede neural
params = { 'hidden_layer_sizes' : [1],
  'activation': 'logistic',
  'solver': 'adam',
  'alpha' : 0.0,
  'batch_size': 10,
  'learning rate': 'constant',
  'learning_rate_init': 0.01,
  'random_state': 1729,
  'tol': 0.0001,
  'max iter': 10000,
  'verbose' : False }
nn0 = MLPRegressor(**params)
nn0.fit(df1[['x']], df1['y'])
df1['pred0'] = nn0.predict(df1[['x']])
```

Este parâmetro é para ter um output menos extenso.

```
# Primeira rede neural
params = { 'hidden_layer_sizes' : [1],
  'activation': 'logistic',
  'solver': 'adam',
  'alpha' : 0.0,
  'batch size': 10,
  'learning rate': 'constant',
  'learning_rate_init': 0.01,
  'random_state': 1729,
  'tol': 0.0001,
  'max_iter' : 10000,
  'verbose' : False }
nn0 = MLPRegressor(**params)
nn0.fit(df1[['x']], df1['y'])
df1['pred0'] = nn0.predict(df1[['x']])
```

Inserimos os dados com o método fit(), semelhante aos outros algoritmos do scikit learn.



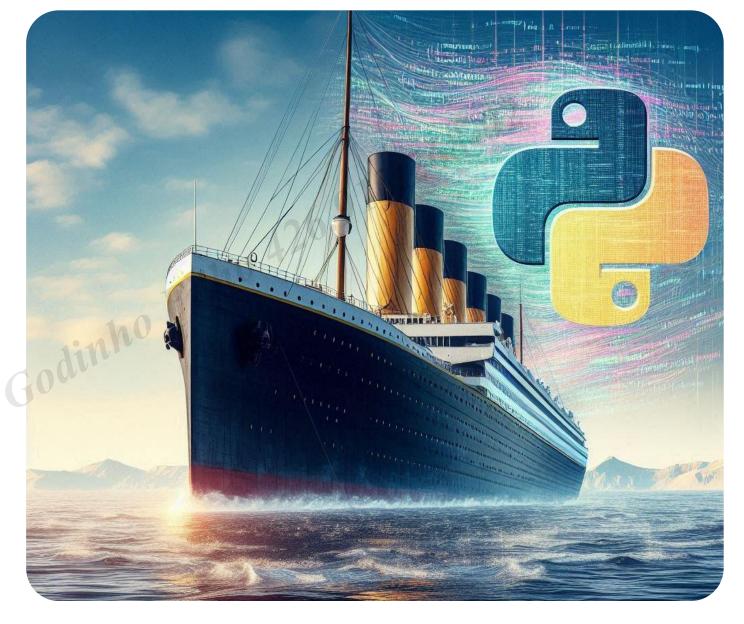
RNA_ilustracao.py



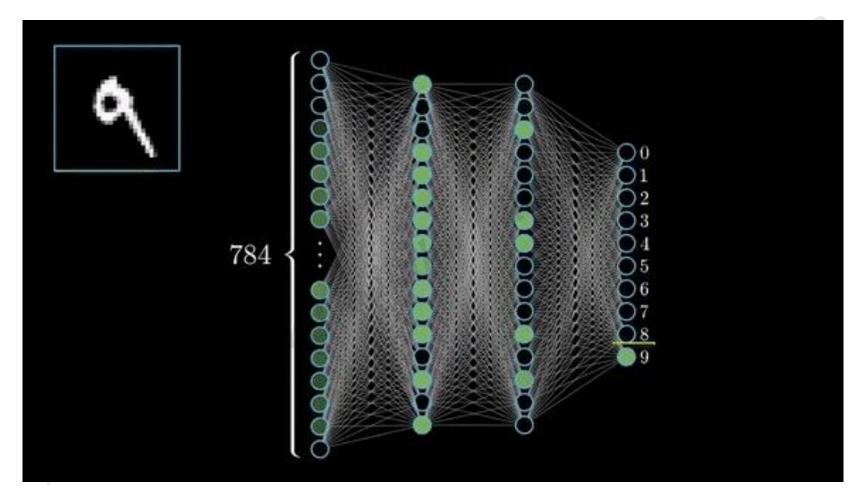
Exemplo revisado no titanic

Vamos abrir o Spyder

Valther Serasim







3blue1brown - https://www.youtube.com/watch?v=aircAruvnKk



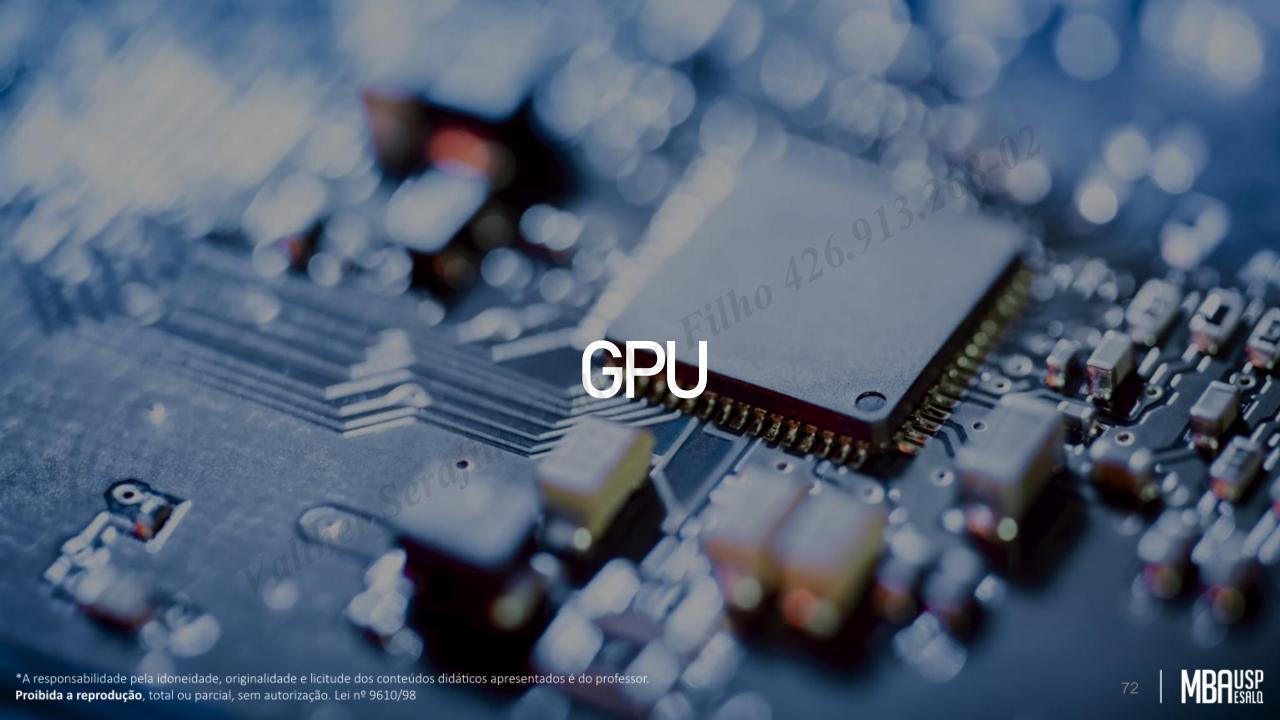
Demora pra rodar? The breve história The servicia servi





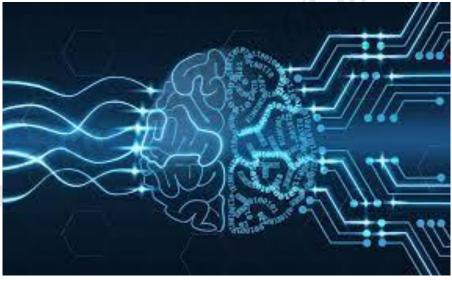
Processadores

- Distância entre transístores: 14 nm
- Fio de cabelo humano: 80.000 nm
- Diâmetro do átomo de ouro: 0,3 nm



Processamento com GPU

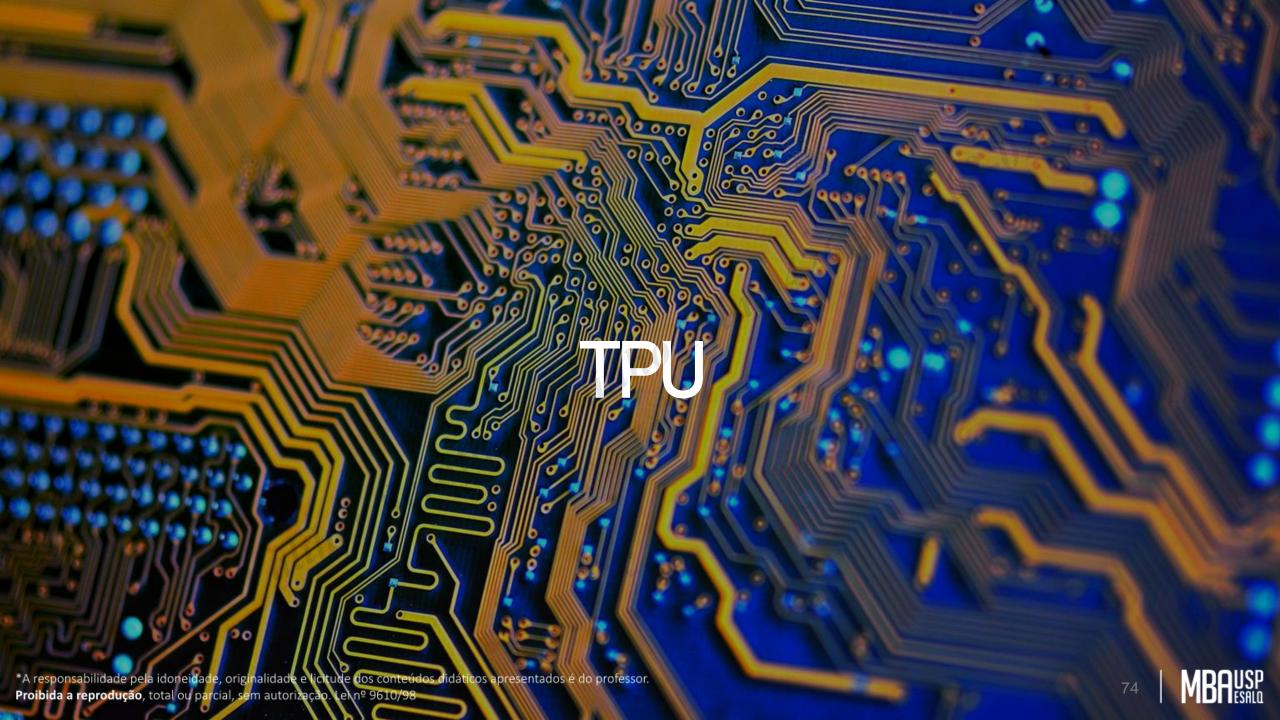












Regularização L2

Variáveis Contínuas SQE

$$SQE = \sum_{i=1}^{N} (y_i - \hat{y}_i)^2 + \lambda \sum_{i=1}^{N} \beta_i^2$$

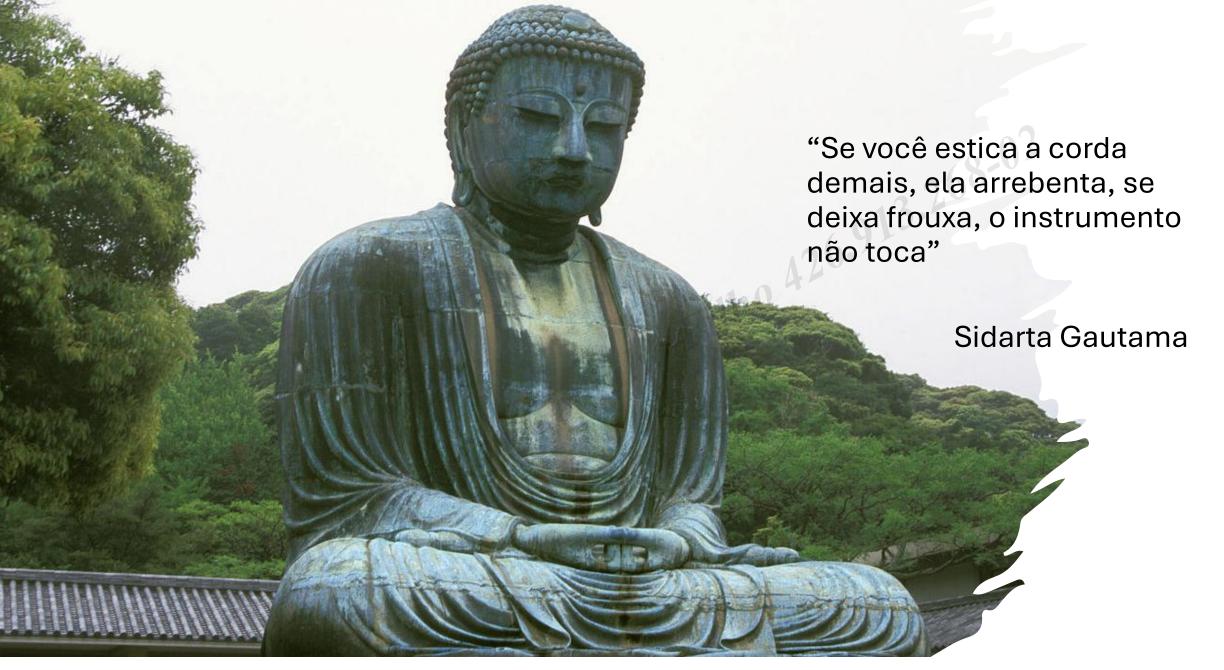
Variáveis binárias Cross-Entropy

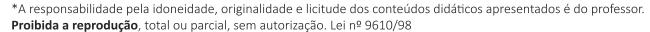
$$L = \sum y_i log(\widehat{y}_i) + \lambda \sum \beta_i^2$$

Conclusões

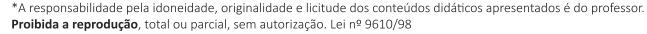
- Redes Neurais são a introdução ao Deep Learning (que é um ramo muito promissor)
- São poderosas e flexíveis
- Requerem poder computacional especial (GPU / TPU)
- São famosas em dados menos estruturados (ex: imagens, áudio)













MBAUSP ESALQ

Obrigado!

João Fernando Serrajordia Rocha de Mello linkedin.com/in/joao-serrajordia