
Tera

Módulo 3:
Aprendizado de Máquina Supervisionado

Árvores de Decisão

Luam Catão Totti

I wanna play a game…

Regras do Jogo

- Vamos dividir a turma em grupos
- Cada grupo recebe 13 cartas de um baralho comum
- Cada grupo deve **construir uma árvore de decisão para classificar suas cartas**
- Cada nó na árvore é simplesmente uma comparação com um valor entre Ás e Rei
- Você pode usar >, < ou =

Regras do Jogo

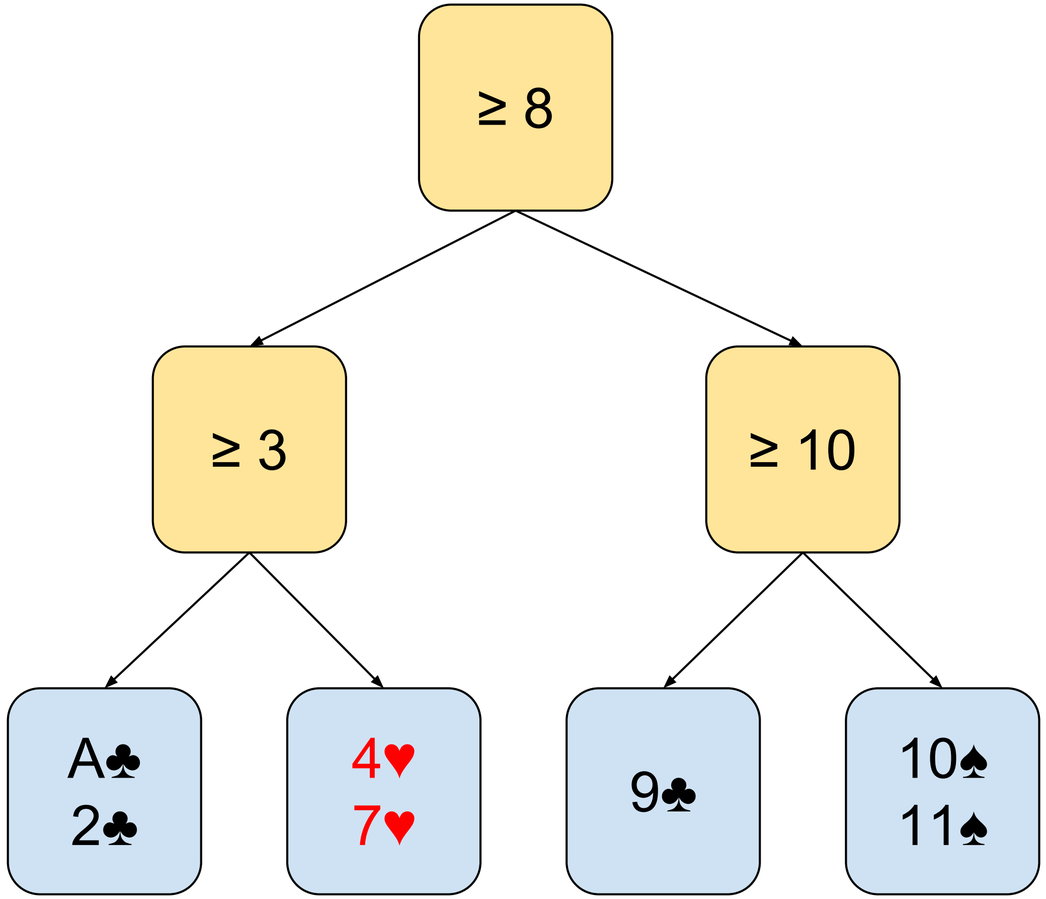
- Se a comparação é verdade para uma certa carta, ela vai para a direita do nó, caso contrário, ela vai para esquerda
- O objetivo é construir uma árvore tal que, ao passar todas cartas por ela, **cartas de um mesmo naipe devem estar separadas**
- Use a menor quantidade de nós possível!

Exemplo

- Recebi as cartas:

  2♣, 7♥, 11♠, 10♠, A♣, 4♥, 9♣

- Nossa árvore poderia ser:



Let’s do it!

E aí?

- Quantos nós foram necessários?
- Foi fácil ou difícil?
- Uma decisão diferente no início da árvore afeta as decisões seguintes?
- Se você pudesse usar a cor da carta além do valor, seria mais fácil?

Árvores de Decisão

- Usadas amplamente em aplicações reais e competições
- Resolvem problemas não lineares excepcionalmente bem
- Extremamente flexíveis e interpretáveis
- Base para métodos muito poderosos (Gradient Boosting, Random Forests)
- Aplicáveis tanto para regressão como classificação

Classificação

X	Y
Imagem	Gato ou cachorro?
Dados de uma transação bancária	Fraude?
Texto do email de um cliente	Problema que o cliente possui
Tweet	Sentimento positivo ou negativo?
Frame da câmera do seu iphone	É o seu rosto?

Regressão

X	Y
Características de um imóvel	Preço avaliado pelo corretor
Histórico de valores de uma ação e eventos econômicos	Valor máximo no dia seguinte
Perfil de uso de um cliente	Gastos no mês seguinte
Dados da operação de atendimento	Volume de tickets e chats no mês seguinte
Altura do pai	Altura do filho

Árvores de Decisão

- Mas eu já sei Regressão Logística e Regressão Linear!!

- Por que eu preciso aprender mais outro método??

- Por que nem tudo na vida é linear, tipo as marés na bahia

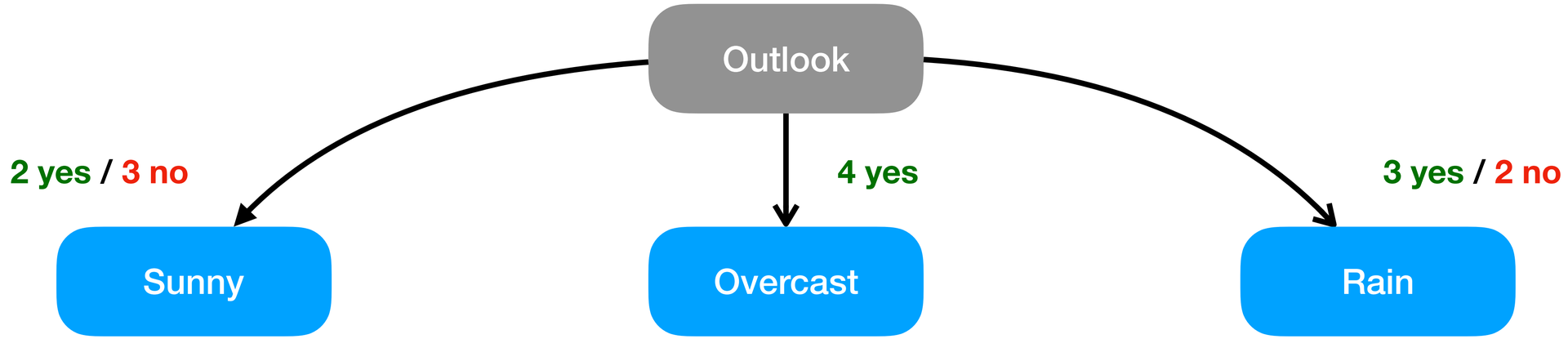
<code> … </code>

Mas como funcionam árvores de decisão?

Exemplo

Day	Outlook	Humidity	Wind	Playing?
D1	sunny	high	strong	no
D2	sunny	high	weak	no
D3	overcast	high	weak	yes
D4	rain	high	weak	yes
D5	rain	normal	weak	yes
D6	rain	normal	strong	no
D7	overcast	normal	strong	yes
D8	sunny	high	weak	no
D9	sunny	normal	weak	yes
D10	rain	normal	weak	yes
D11	sunny	normal	strong	yes
D12	overcast	high	strong	yes
D13	overcast	normal	weak	yes
D14	rain	high	strong	no

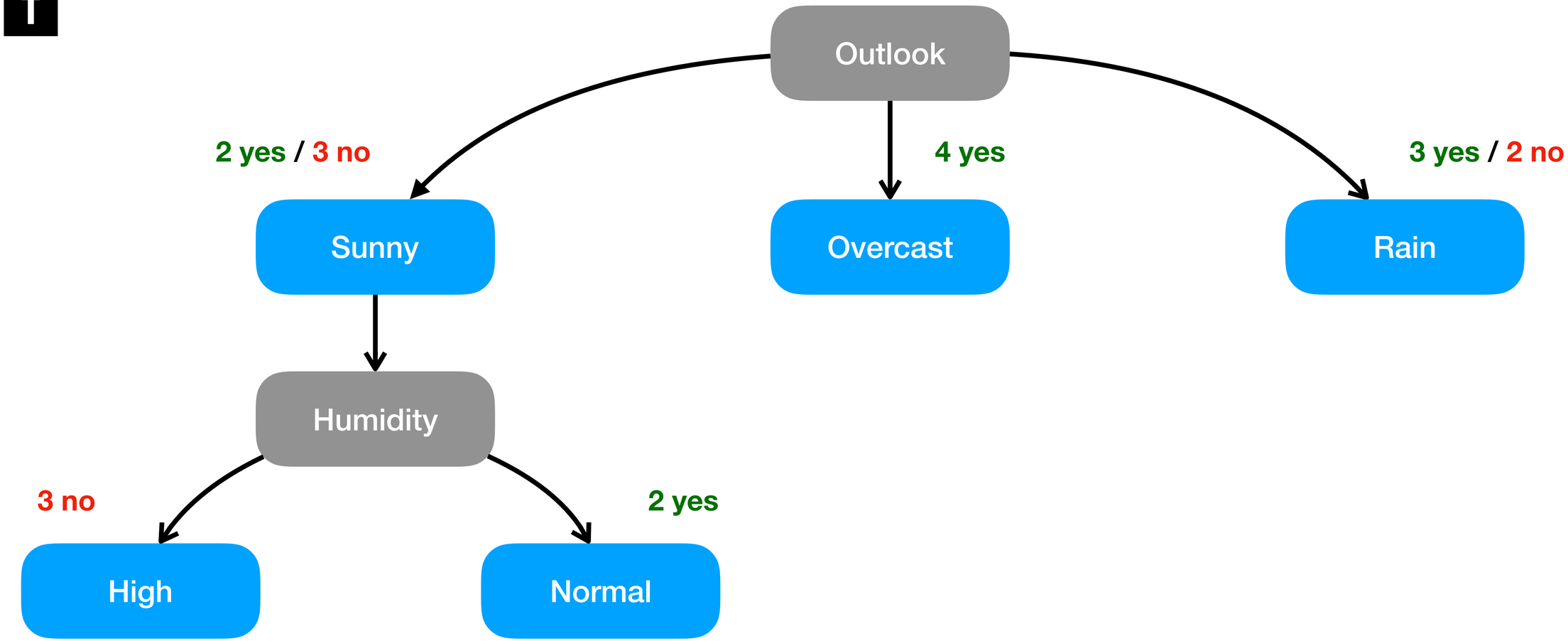
- Queremos prever (e entender) quando alguém vai estar jogando na quadra.
- Temos informações de 14 dias:
  - Sobre o tempo
  - Alguém estava jogando (target)
- Que tal começamos pelo aspecto do tempo (outlook)?



Outlook	Humidity	Wind
sunny	high	strong
sunny	high	weak
sunny	high	weak
sunny	normal	weak
sunny	normal	strong

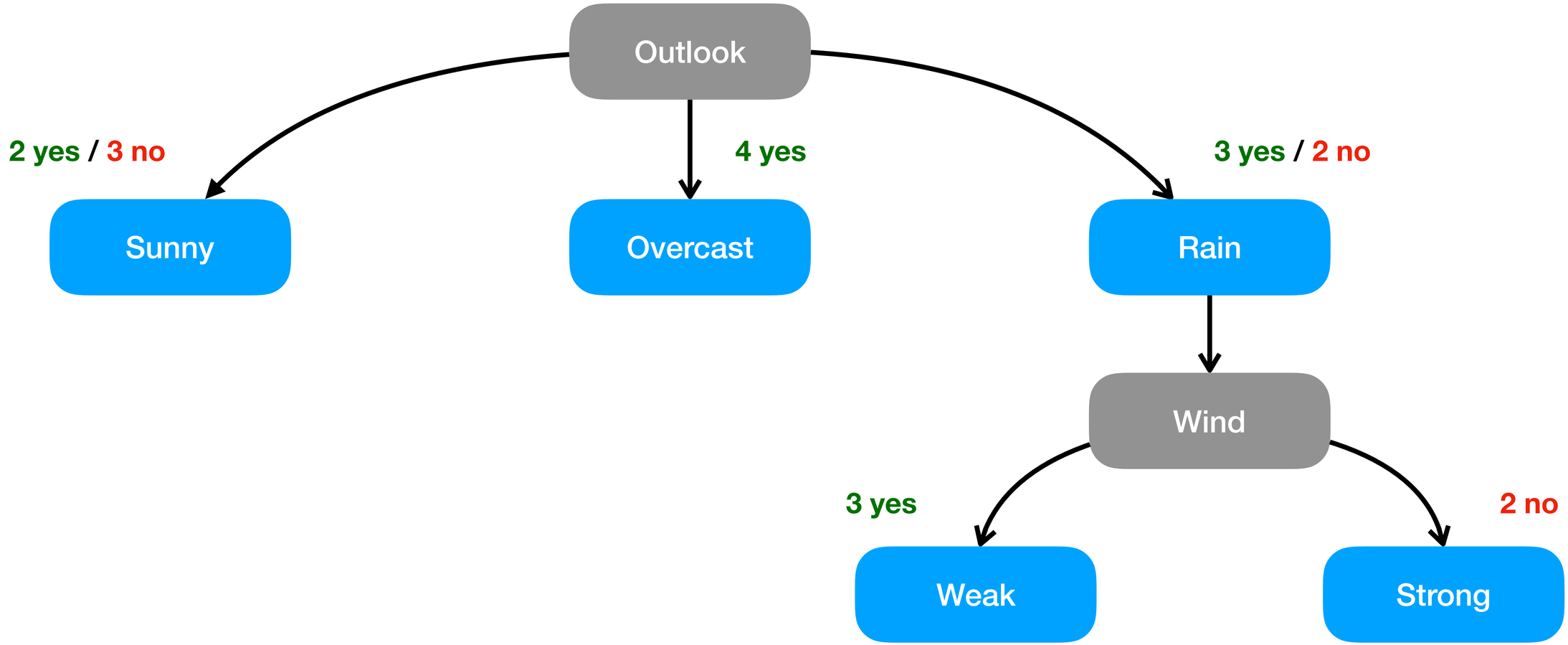
Outlook	Humidity	Wind
overcast	high	weak
overcast	normal	strong
overcast	high	strong
overcast	normal	weak

Outlook	Humidity	Wind
rain	high	weak
rain	normal	weak
rain	normal	weak
rain	normal	strong
rain	high	strong



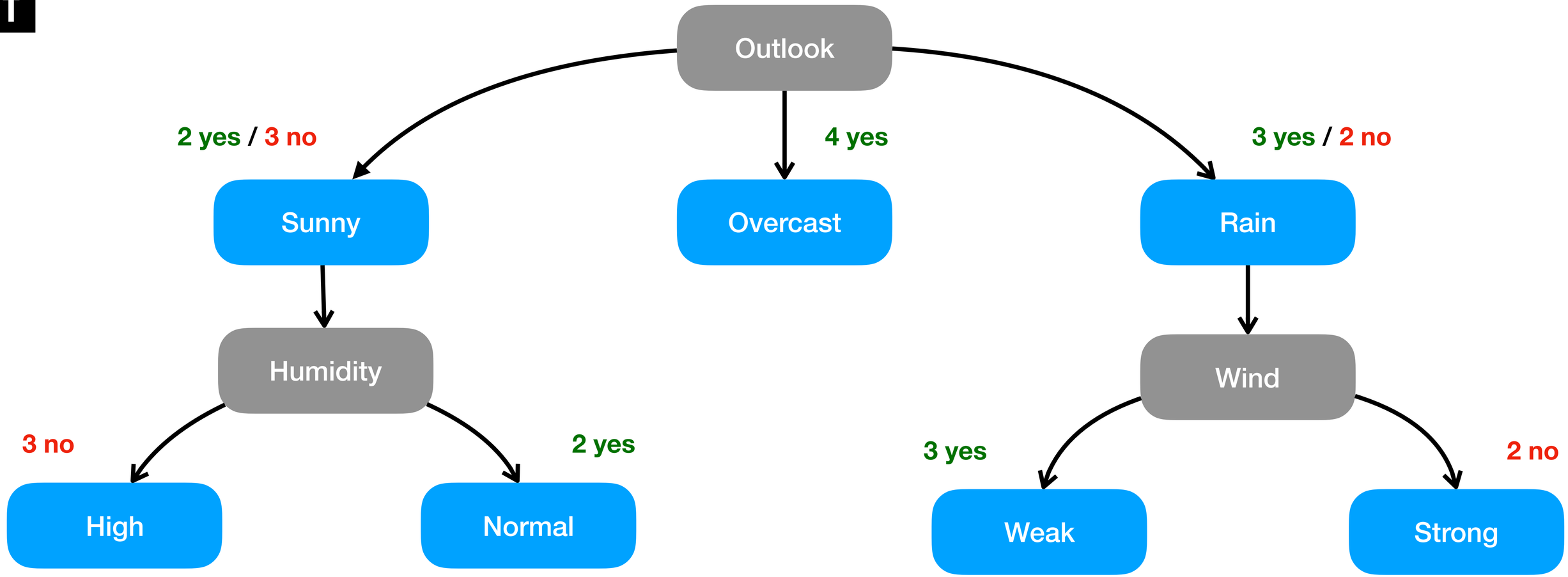
Outlook	Humidity	Wind
sunny	high	strong
sunny	high	weak
sunny	high	weak

Outlook	Humidity	Wind
sunny	normal	weak
sunny	normal	strong



Outlook	Humidity	Wind
rain	high	weak
rain	normal	weak
rain	normal	weak

Outlook	Humidity	Wind
rain	normal	strong
rain	high	strong

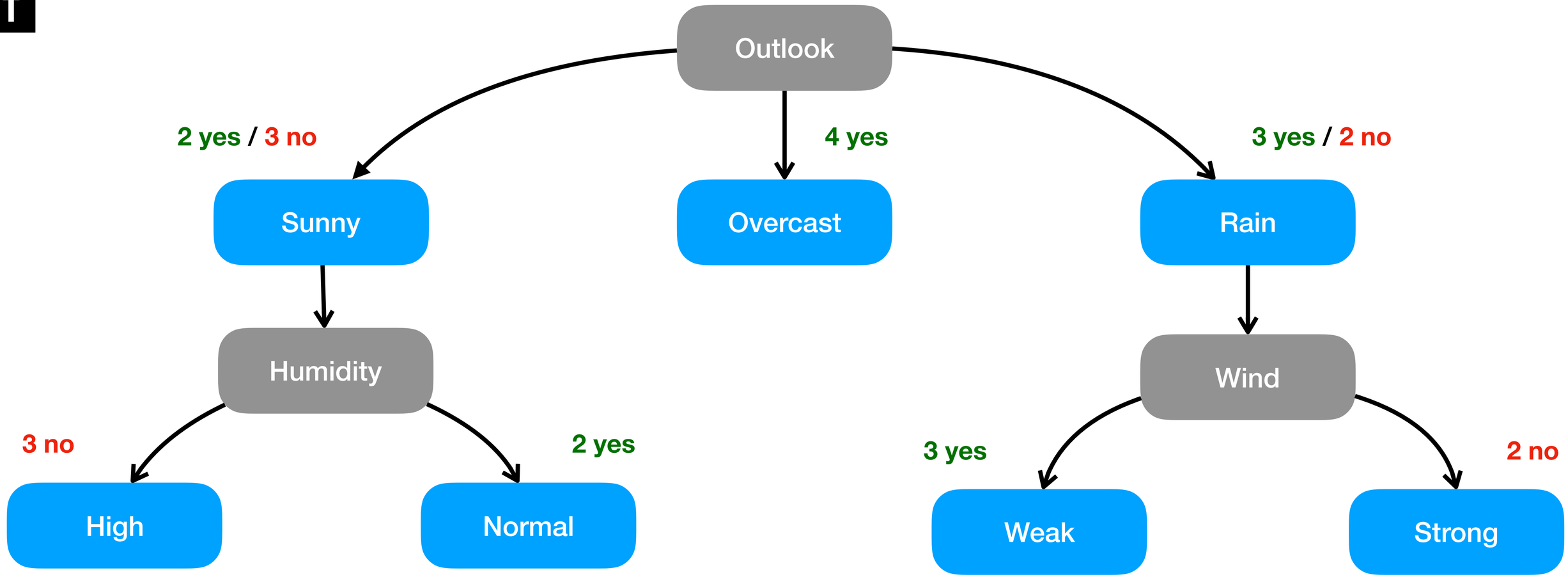


Outlook	Humidity	Wind
sunny	high	strong
sunny	high	weak
sunny	high	weak

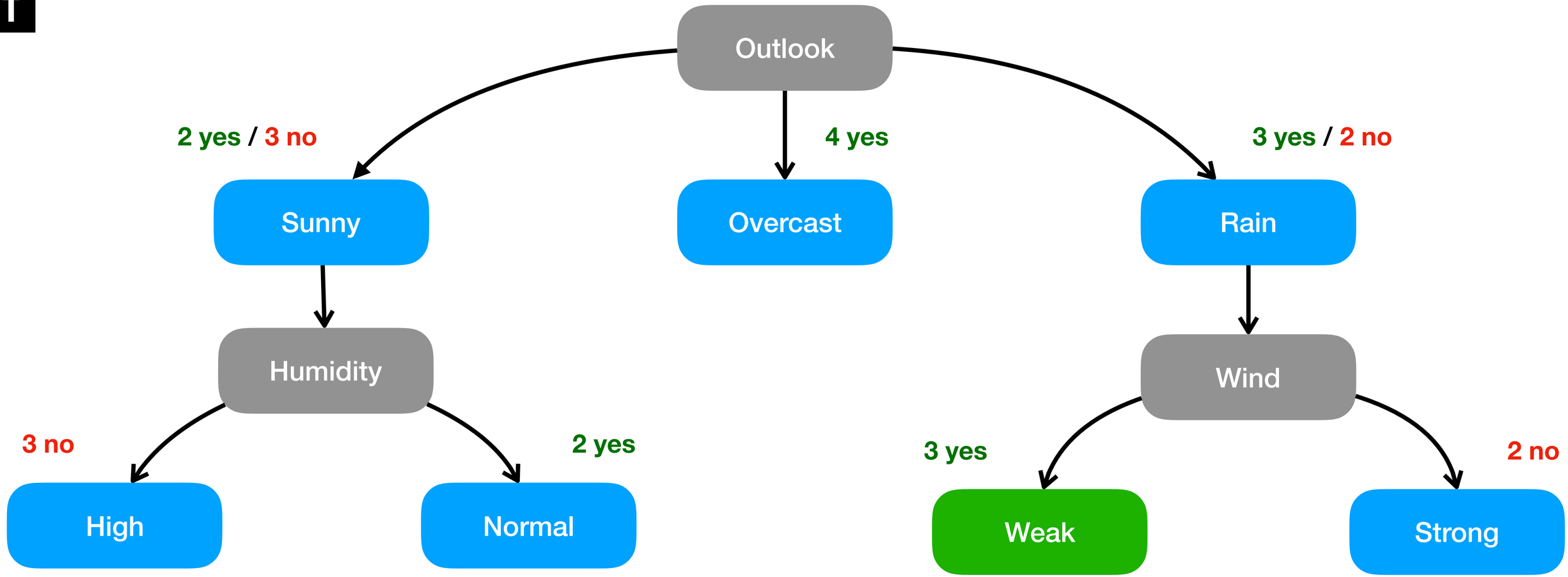
Outlook	Humidity	Wind
sunny	normal	weak
sunny	normal	strong

Outlook	Humidity	Wind
rain	high	weak
rain	normal	weak
rain	normal	weak

Outlook	Humidity	Wind
rain	normal	strong
rain	high	strong



Day	Outlook	Humidity	Wind	Playing?
D15	rain	high	weak	???



Day	Outlook	Humidity	Wind	Playing?
D15	rain	high	weak	yes

Árvore de Decisão

*Um modelo estatístico **supervisionado** que busca aprender uma **seqüência de regras** estruturadas em uma árvore de modo a maximizar a **separação** entre instâncias de diferentes classes*

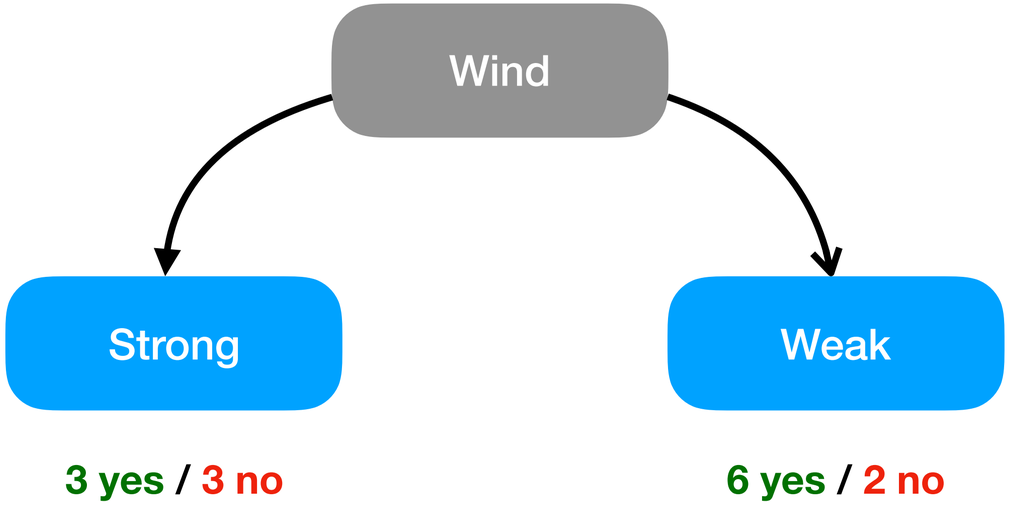
Árvore de Decisão

- Os nós finais são chamados de **folhas** e contém a decisão final em relação a classe (ou probabilidade das classes)
- Os nós com instâncias de uma só classe são chamados de **puro**
- Podem ser usadas para **classificação** e **regressão**
- Operam em atributos **numéricos** e **categóricos***

Escolhendo Atributos

- Escolhemos começar nossa árvore por Outlook
- E se tivéssemos começado por Wind?

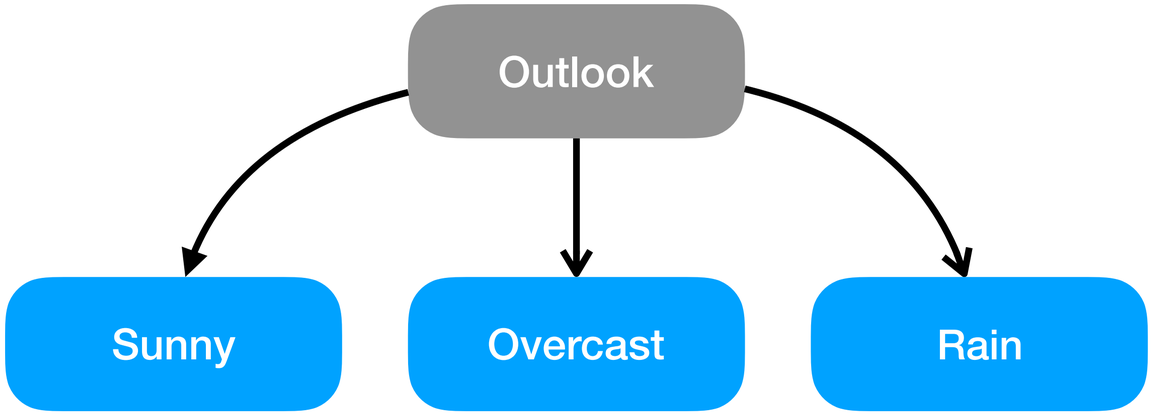
Outlook	Humidity	Wind
sunny	high	strong
rain	normal	strong
overcast	normal	strong
sunny	normal	strong
overcast	high	strong
rain	high	strong



Outlook	Humidity	Wind
sunny	high	weak
overcast	high	weak
rain	high	weak
rain	normal	weak
sunny	high	weak
sunny	normal	weak
rain	normal	weak
overcast	normal	weak

Escolhendo Atributos

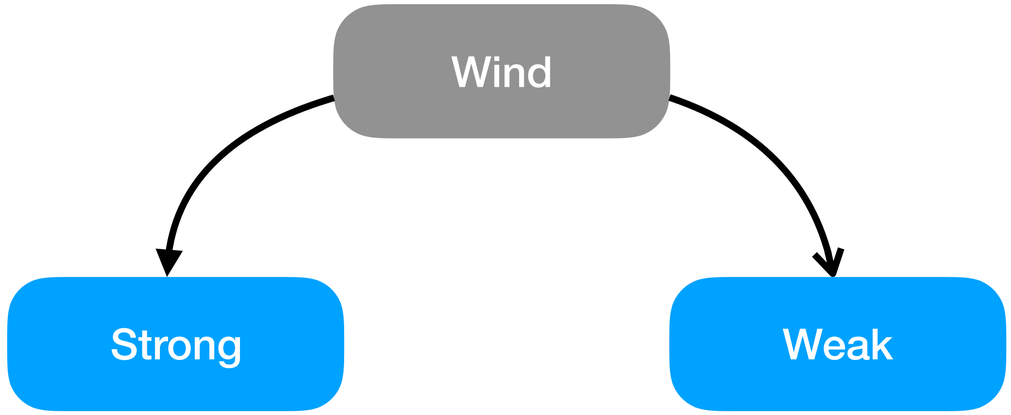
- Qual escolha de *split* foi melhor?
- Suponhamos que temos que chutar o resultado logo depois do primeiro split



2 yes / 3 no **4 yes** **3 yes / 2 no**

P(no|sunny) = 3/5 **P(yes|overcast) = 4/4** **P(yes|rain) = 3/5**

P(correct|humidity) = (0.6 + 1 + 0.6)/3 = 0,7333



3 yes / 3 no **6 yes / 2 no**

P(yes|sunny) = 3/6 **P(yes|weak) = 6/8**

P(correct|wind) = (0.5 + 0.75)/2 = 0,625

Escolhendo Atributos

- A probabilidade de acertamos é maior no primeiro split, pois ele discrimina melhor a nossa variável resposta (playing)

- O primeiro split representa um **ganho de informação** maior

Entropia

- Como escolher os melhores splits sistematicamente?
- Vamos usar a entropia dos subconjuntos como métrica de **impureza**:

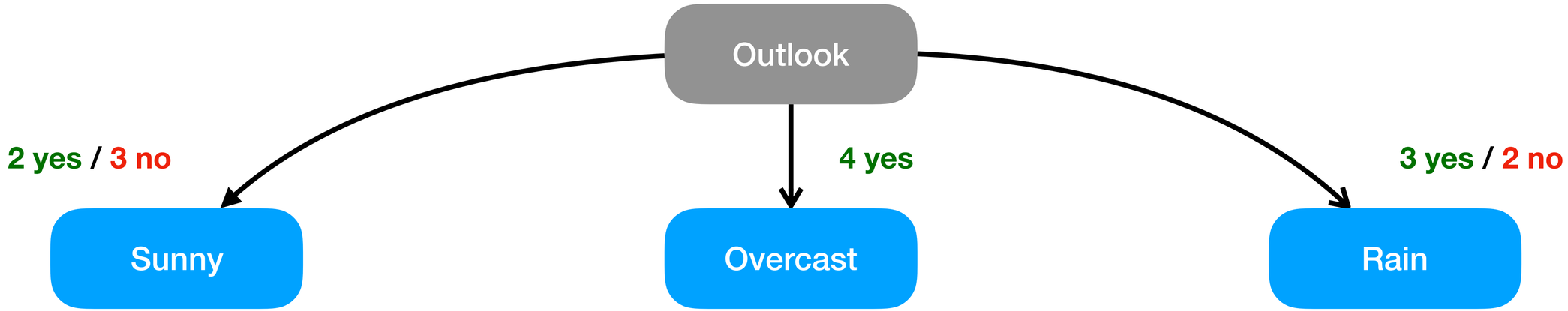
$$H(E) = -P_{yes} \log_2 P_{yes} - P_{no} \log_2 P_{no}$$

$$P_{yes} = \frac{n_{yes}}{n_{yes} + \mathrm{n}_{no}}$$

$$P_{no} = \frac{n_{no}}{n_{yes} + \mathrm{n}_{no}}$$

Exemplo

$$H(E) = -P_{yes} \log_2 P_{yes} - P_{no} \log_2 P_{no}$$



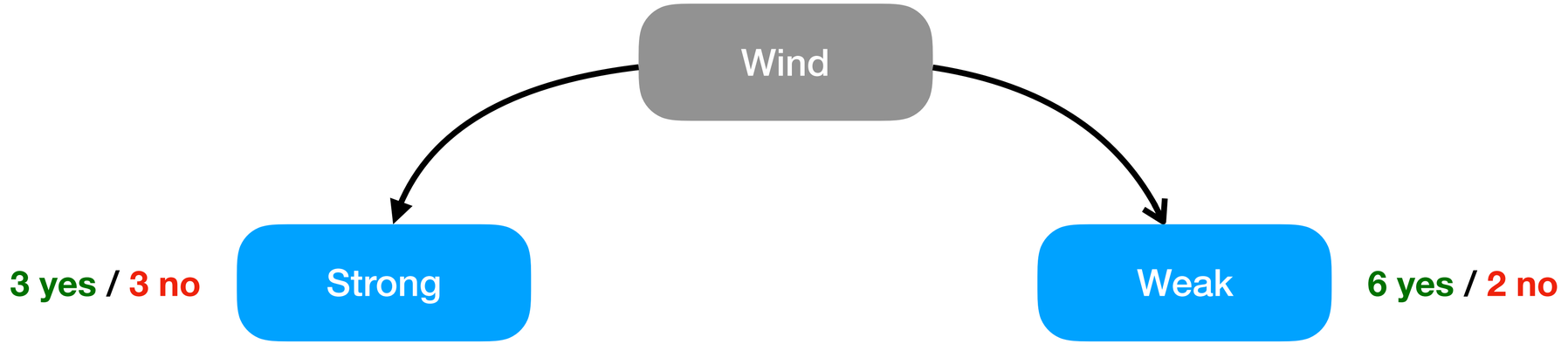
$$H(E_S) = -\frac{2}{5}\log_2\frac{2}{5} - \frac{3}{5}\log_2\frac{3}{5}$$
$$= -0.4\log_2 0.4 - 0.6\log_2 0.6$$
$$= 0.9705$$

$$H(E_O) = -\frac{4}{4}\log_2\frac{4}{4} - \frac{0}{4}\log_2\frac{0}{4}$$
$$= -1\log_2 1 - 0\log_2 0$$
$$= 0.0$$

$$H(E_R) = -\frac{3}{5}\log_2\frac{3}{5} - \frac{2}{5}\log_2\frac{2}{5}$$
$$= -0.6\log_2 0.6 - 0.4\log_2 0.4$$
$$= 0.9705$$

Exemplo

$$H(E) = -P_{yes} \log_2 P_{yes} - P_{no} \log_2 P_{no}$$



$$H(E_S) = -\frac{3}{6}\log_2\frac{3}{6} - \frac{3}{6}\log_2\frac{3}{6}$$
$$= -0.5\log_2 0.5 - 0.5\log_2 0.5$$
$$= 1$$

$$H(E_W) = -\frac{6}{8}\log_2\frac{6}{8} - \frac{2}{8}\log_2\frac{2}{8}$$
$$= -0.75\log_2 0.75 - 0.25\log_2 0.25$$
$$= 0.8112$$

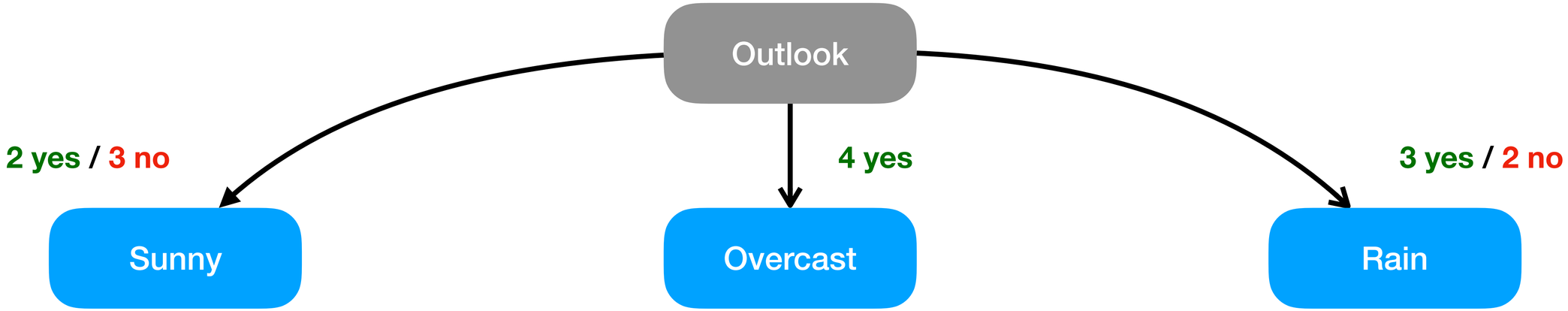
Entropia Esperada

- Ainda resta a pergunta, qual desses splits é objetivamente melhor?
- Considere um split **S** em um atributo com **K** valores diferentes, que divide o conjunto **E,** de tamanho **N**, em subconjuntos $\mathbf{E_1}$, $\mathbf{E_2}$, …, $\mathbf{E_K}$ de tamanhos $\mathbf{N_1}$, $\mathbf{N_2}$, …, $\mathbf{N_K}$, respectivamente
- Vamos definir a **entropia esperada** após esse split como:

$$EH(S) = \sum_{i=1}^{K} \frac{N_i}{N} H(E_i)$$

Exemplo

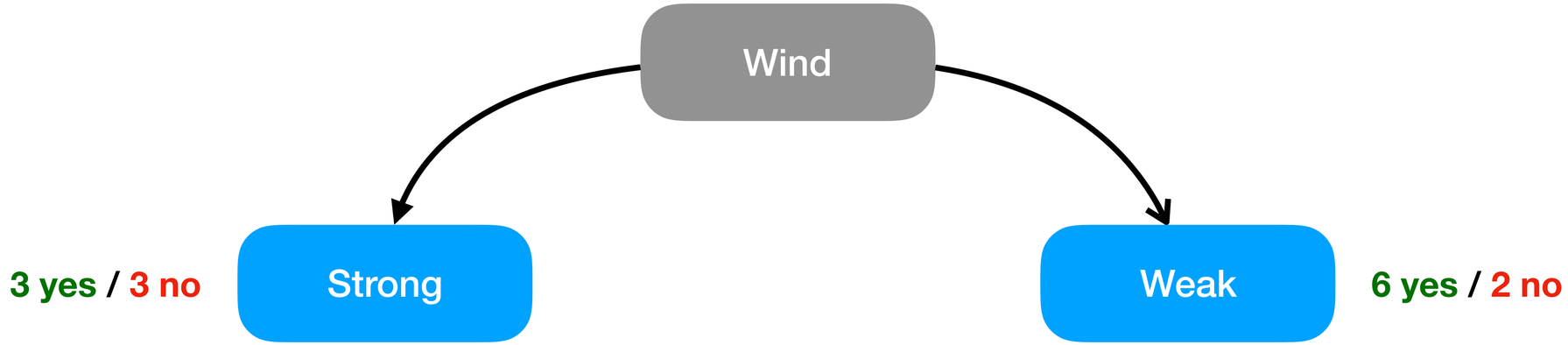
$$EH(S) = \sum_{i=1}^{K} \frac{N_i}{N} H(E_i)$$



$$EH(S_{Outlook}) = \frac{5}{14}0.9705 + \frac{4}{14}0 + \frac{5}{14}0.9705$$
$$= 0.6932$$

Exemplo

$$EH(S) = \sum_{i=1}^{K} \frac{N_i}{N} H(E_i)$$



$$EH(S_{Outlook}) = \frac{6}{14}1 + \frac{8}{14}0.8112$$
$$= 0.8921$$

Ganho de Informação

- Queremos que haja **redução de entropia** para haver ganho de informação
- Por fim, definimos o **ganho de informação** de um split **S** como:

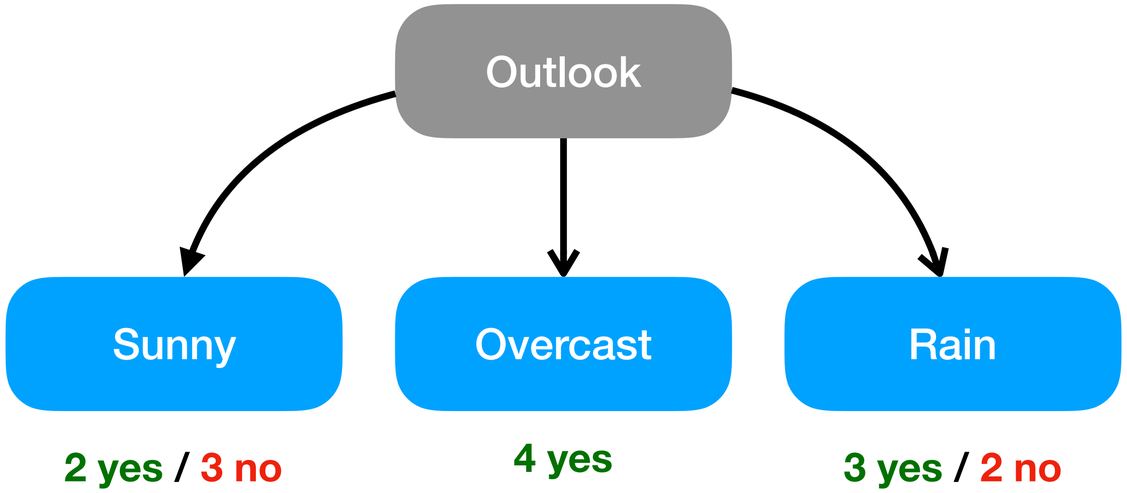
$$I(S) = H(E) - EH(S)$$

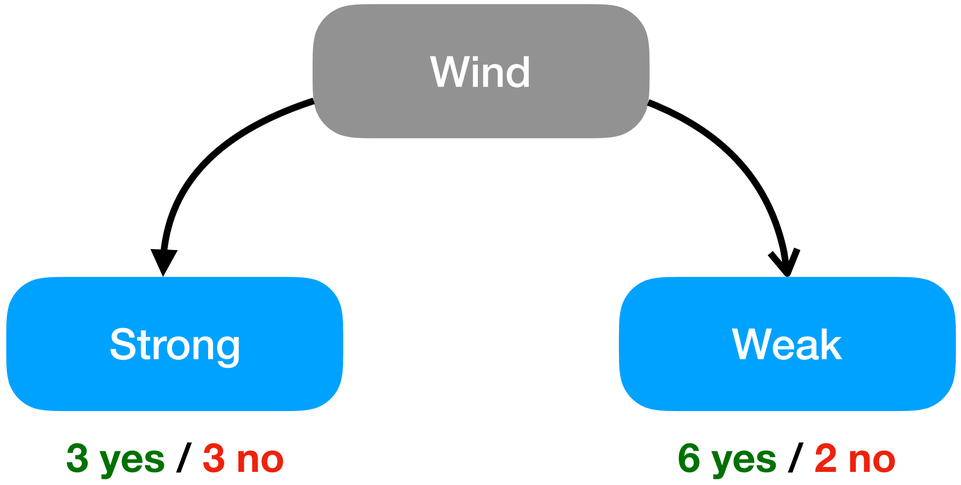
$$I(S) = H(E) - \sum_{i=1}^{K} \frac{N_i}{N} H(E_i)$$

Exemplo

$$I(S) = H(E) - EH(S)$$

$$\begin{aligned} H(E) &= -\frac{9}{14}\log_2\frac{9}{14} - \frac{5}{14}\log_2\frac{5}{14} \\ &= -0.643\log_2 0.643 - 0.357\log_2 0.357 \\ &= 0.9402 \end{aligned}$$





$$\begin{aligned} I(S_{Outlook}) &= 0.9402 - 0.6932 \\ &= 0.2470 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} I(S_{Wind}) &= 0.9402 - 0.8921 \\ &= 0.0482 \end{aligned}$$

Exemplos

- H([0,0,0])?
- H([1,0,0,1])?
- H([1,1,0]) > H([0,0,1])?
- H([1,1]) > H([1])?
- H([0,1,0]) > H([0,1,0,1,0])?

Algoritmos

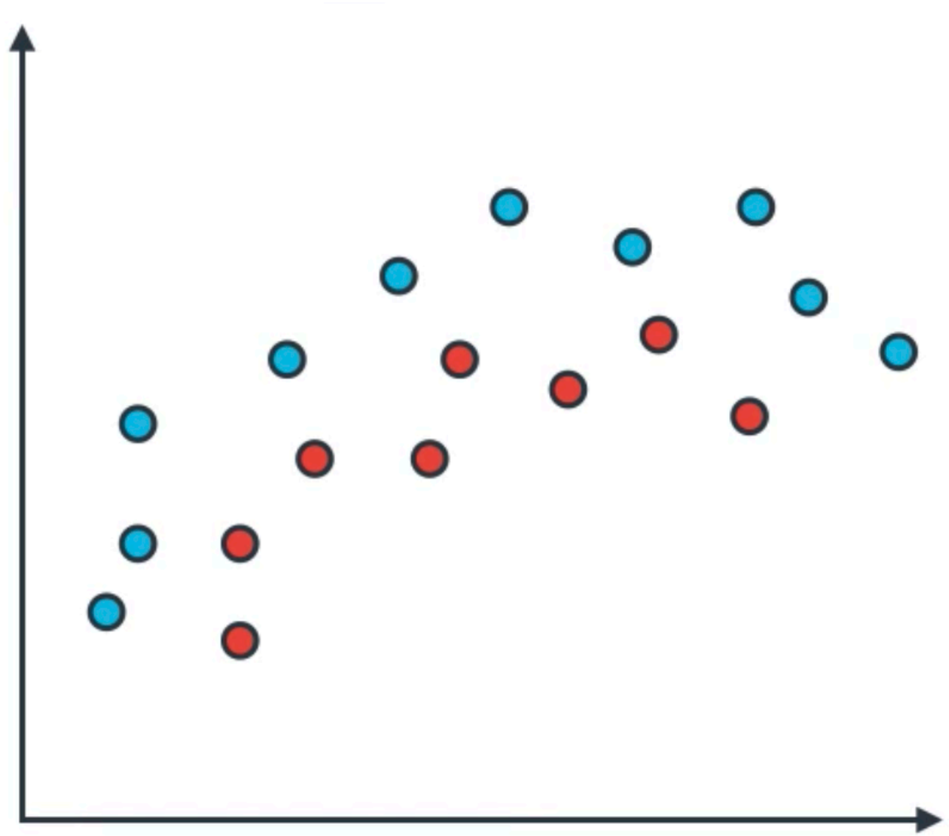
- Buscam o melhor split a todo momento
- Isso é feito achando o atributo e o valor que maximizam o ganho de informação
- Investigamos o caso de atributos **categóricos** (quente, húmido, etc), porém a lógica é a mesma para atributos **contínuos** (temperatura, humidade)
- E como vimos, funciona para **regressão** também

<code> … </code>

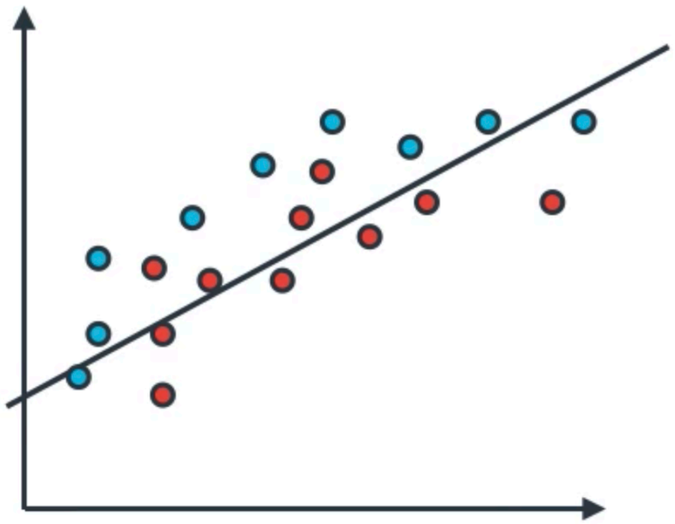
Avaliação

- Vamos supor que temos nossa árvore de decisão treinada
- Como podemos saber se ela está prevendo corretamente novos casos?
- Como avaliar a precisão dos nossos modelos?
- Existem inúmeras métricas e estratégias válidas

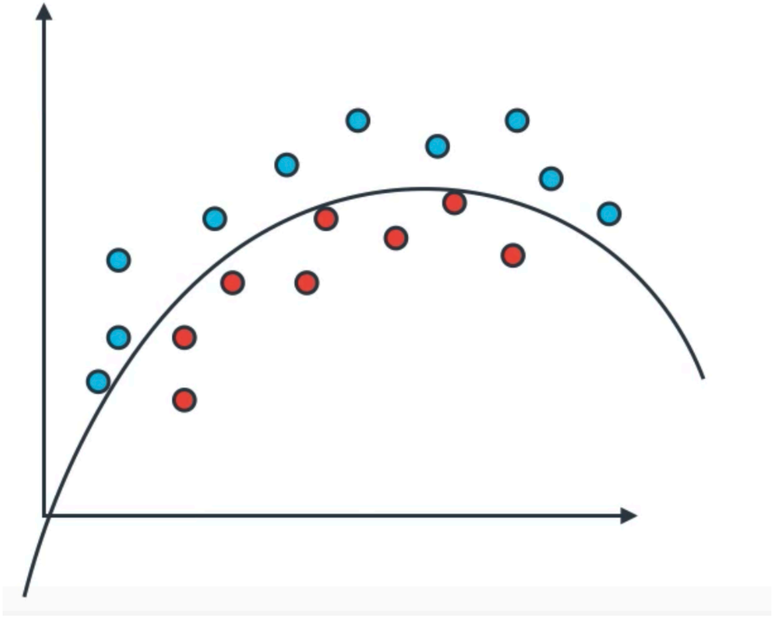
Overffiting vs Underfitting



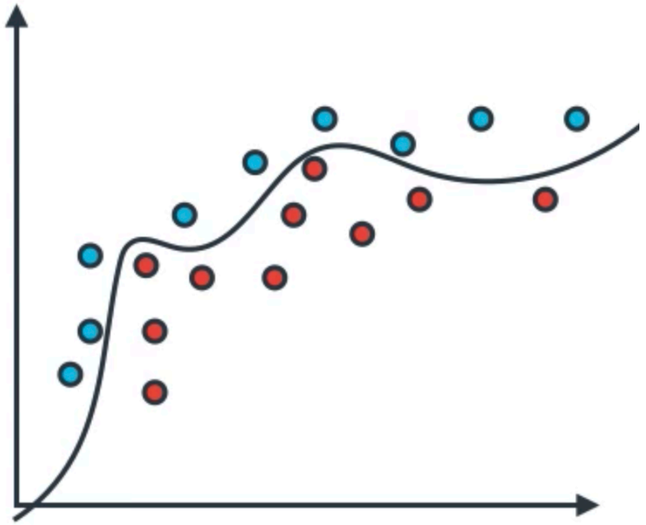
Overffiting vs Underfitting



Underfitted



Well fitted



Overfitted

Hiper-parâmetros

- Devemos encontrar o melhor fit, evitando underfitting e overfitting
- Isso geralmente é feito encontrando **os melhores hiper-parâmetros** para os nossos dados
- Os principais **hiper-parâmetros** que controlam complexidade:
  - *max_depth*: profundidade máxima da árvore
  - *min_samples_leaf*: mínimo de instâncias no nó para que haja um split

<code> … </code>

Análise e Exploração

- Vimos como árvores de decisão podem ser transparente e informativas em relação ao que elas aprendem com os dados

- São muito poderosas para oferecer *insights* para seu negócio, mesmo quando um modelo preditivo não é necessário ou possível de se implementar

<code> … </code>

Regressão

- Árvores de decisão podem também ser usadas para regressão
- Uma ideia possível é categorizar a saída em intervalos discretos e tratar o problema como classificação
- Dois aspectos precisam ser ajustados:
  - Qual métrica de impureza podemos usar para fazer os splits?
  - Que resposta retornamos nos nós folhas?

Regressão

- Ao invés de calcular a redução de entropia de cada subconjunto em um split, podemos calcular a **redução do desvio padrão:**

$$I'(S) = V(E) - EV(S)$$

- Onde V(E) é o desvio padrão de E e EV(S) é o desvio padrão esperado após o split S

$$I([[0,0],[1,1,1]]) > I([[0,1],[0,1,1]])$$

$$I'([[20,19],[7,9,6]]) > I'([[20,7],[19,9,6]])$$

Welcome to Kaggle Competitions

Challenge yourself with real-world machine learning problems

New to Data Science?
Get started with a tutorial on our most popular competition for beginners, Titanic: Machine Learning from Disaster.

Build a Model
Get the data & use whatever tools or methods you prefer to make predictions.

Make a Submission
Upload your prediction file for real-time scoring & a spot on the leaderboard.

Learn more | InClass

The Machine Learning Process

<code> … </code>

Vantagens

- Extremamente **interpretáveis** e intuitivas
- **Pouco tratamento dos dados**, pois (em teoria) não exige normalização, remoção de outliers, imputação e one-hot encoding
- Lida com atributos **categóricos e contínuos**
- Predição relativamente **rápida** em O(log(n))
- Possuem uma **seleção de atributos** natural

Desvantagens

- **Instáveis**: pequenas variações nas instâncias podem gerar árvores completamente diferentes
- Propensas a criar modelos muito complexos que não generalizam bem: **overfitting**
- O problema de criar uma árvore ótima é NP-completo, logo os algoritmos frequentemente retornam **árvores sub-ótimas**
- Felizmente, podemos mitigar muitos desses problemas com **métodos de ensembles** que aprenderemos em outra aula!

Conclusões

- Árvores de Decisão são modelos extremamente interessantes por sua versatilidade e interpretabilidade
- Muito cuidado deve ser tomado ao parametrizar o modelo devido ao risco de *overfitting*
- São muito úteis no processo de investigação e exploração, porém não tão poderosas em termos preditivos

Estudos Adicionais

- Post-pruning: removendo nós após a construção da árvore
- Extremely randomized trees
- Stacking
- XGBoost (Gradient Boosting Machine)
- Multi-output classification

DÚVIDAS?!