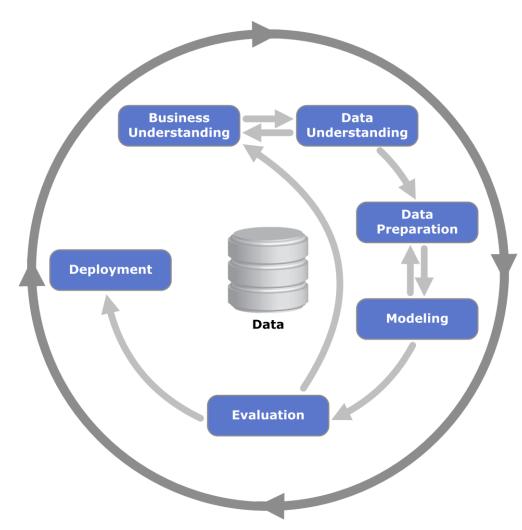




# **CONTEÚDO**

- 1. Introdução
- 2. Data mining descritivo
  - 1. Regras de Associação
- 3. Data mining preditivo
  - 1. Classificação
  - 2. Regressão

#### Modelo CRISP-DM



#### **Business Understanding:**

- Compreensão dos objetivos e requisitos do projeto
- · Conversão desse conhecimento em:
  - definição de problema de data mining
  - plano preliminar

#### **Data Understanding:**

- Recolha de dados inicial
- Familiarização com os dados
  - identificar problemas de qualidade de dados
  - · descobrir os primeiros insights sobre os dados
  - · detetar subconjuntos interessantes

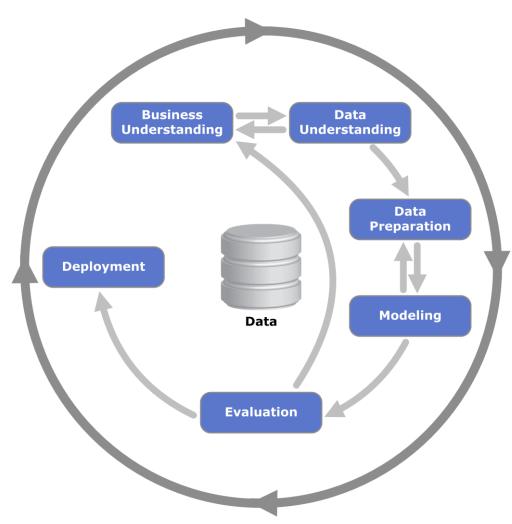
#### **Data Preparation:**

 Construir o conjunto de dados final a partir dos dados brutos iniciais.

https://www.datasciencecentral.com/profiles/blogs/crisp-dm-a-standard-methodology-to-ensure-a-good-outcome



#### Modelo CRISP-DM



#### Modeling:

- Selecionar e aplicar técnicas de modelação
  - Algumas técnicas têm requisitos específicos quanto à forma dos dados
    - Possível necessidade de voltar à preparação

#### **Evaluation:**

- · Teste dos modelos criados
  - · Com base em medidas de performance para avaliar
    - Generalização
    - · resposta ao objetivo
- Escolha do modelo "vencedor"

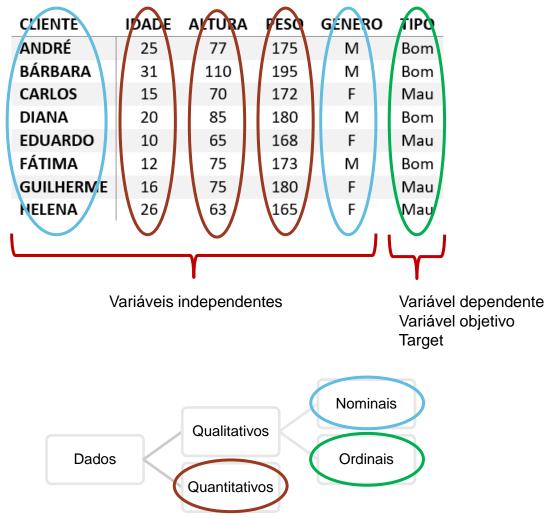
#### **Deployment:**

 Publicação do modelo escolhido de forma a poder aplicar o modelo aos novos dados

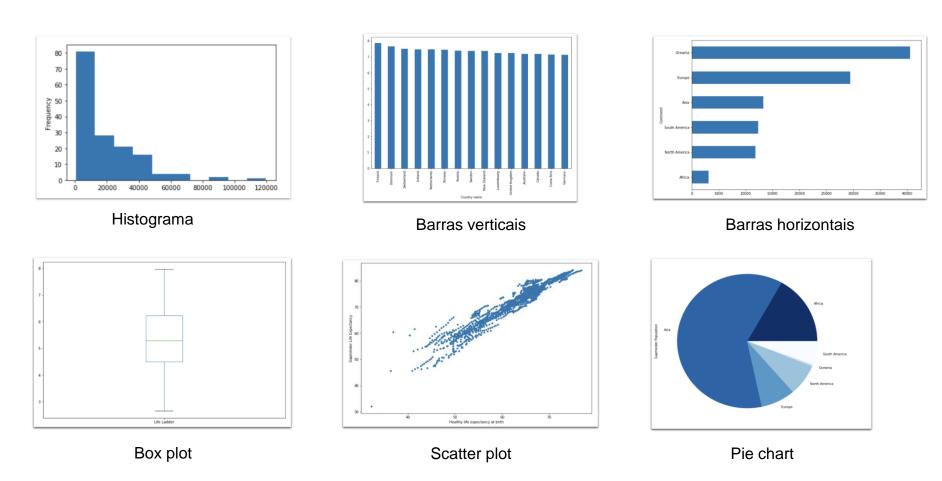
https://www.datasciencecentral.com/profiles/blogs/crisp-dm-a-standard-methodology-to-ensure-a-good-outcome



## **Tipos de Dados**



# Visualização de dados



Plots em Python: <a href="https://towardsdatascience.com/plotting-with-python-c2561b8c0f1f">https://towardsdatascience.com/plotting-with-python-c2561b8c0f1f</a>

Exploração de dados em Python: <a href="https://towardsdatascience.com/exploring-univariate-data-e7e2dc8fde80">https://towardsdatascience.com/exploring-univariate-data-e7e2dc8fde80</a>



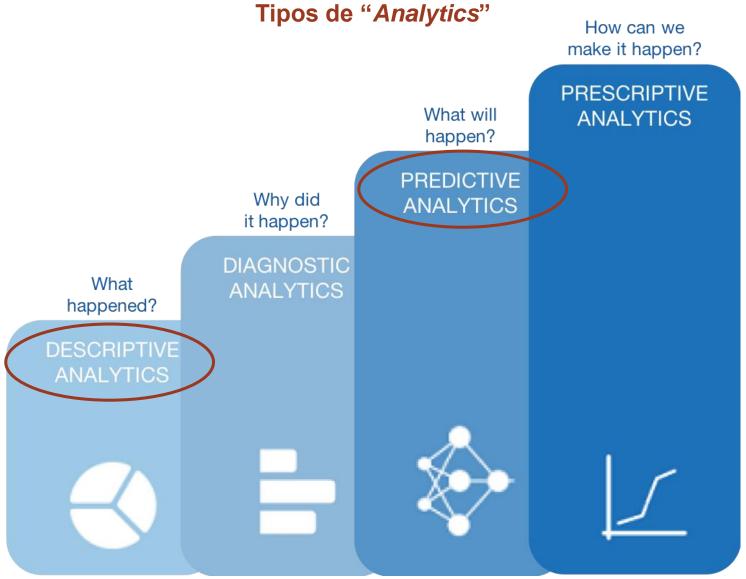
# (Possíveis) Problemas com dados / Soluções

Problemas	Exemplos	Soluções:
Campos não preenchidos		<ul> <li>Representar outra informação (ex: ND, NA)</li> <li>Preenchimento semiautomático (valor prédefinido, esperado [média, moda, mediana], previsto)</li> </ul>
Erros/ruído	localidade="Prto" idade=-1	<ul><li>Substituir valores</li><li>Representar outra informação (ex: ND, NA, Erro)</li></ul>
Erros sistemáticos	idade=99 (porque sistema obriga a inserir idade mesmo quando é desconhecida)	<ul> <li>Representar outra informação (ex: ND, NA, Erro)</li> <li>Preenchimento semiautomático (valor prédefinido, "esperado" [média, moda, mediana], previsto)</li> </ul>
Inconsistências	localidade="V.N. de Gaia" e "Gaia"	Substituir valores
Outliers	despesas em automóveis com cartões bancários de valor 100.000€	Substituir por valor extremo da distribuição

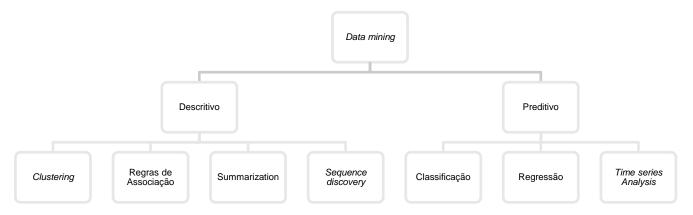
#### Solução limite: eliminar linhas/colunas

 impacto depende do número de linhas afetadas pelo problema



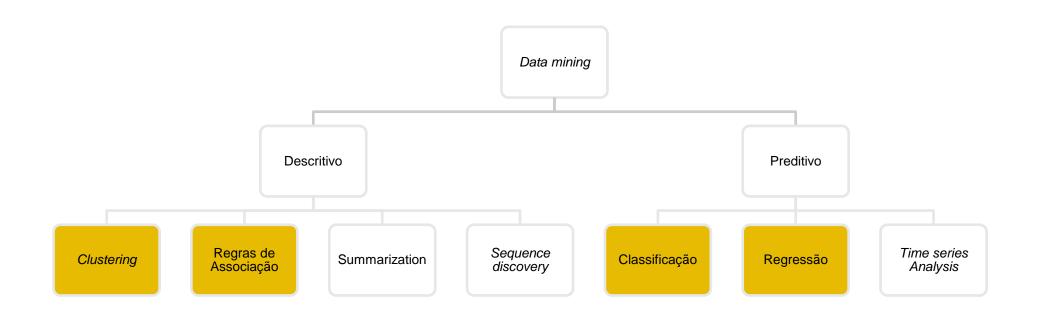


# Data mining descritivo e preditivo

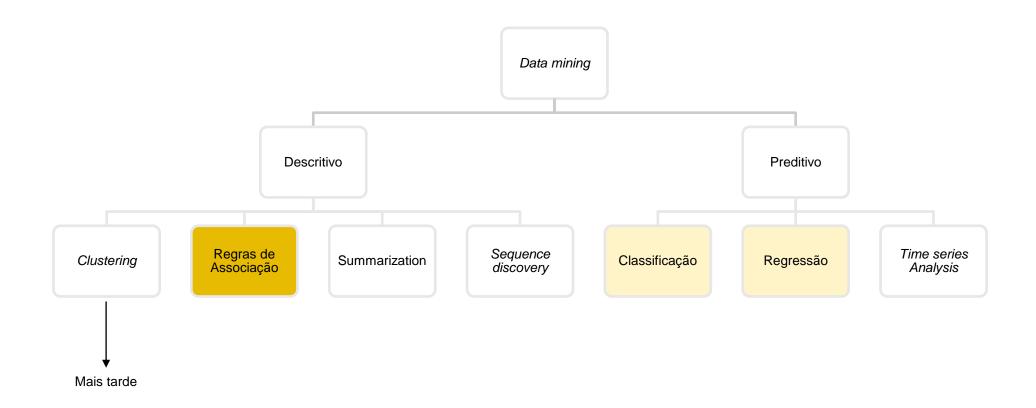


Determina	O que aconteceu no passado	O que poderá acontecer no futuro
Precisão	Resultados precisos	Não garantida
Métodos de análise prática	Relatórios padrão, consulta	Modelação preditiva, previsão, simulação e alertas.
Requisitos	Agregação de dados e data mining	Métodos estatísticos e de previsão
Abordagem	Reativa	Proativa
Descreve	Características dos dados	Indução sobre dados presentes e passados para efetuar previsões
Questões	<ul><li>O que aconteceu?</li><li>Qual é o problema?</li><li>Com que frequência acontece o problema?</li></ul>	<ul> <li>O que vai acontecer?</li> <li>Qual é o resultado se a tendência se mantiver?</li> <li>Que ações são necessárias?</li> </ul>

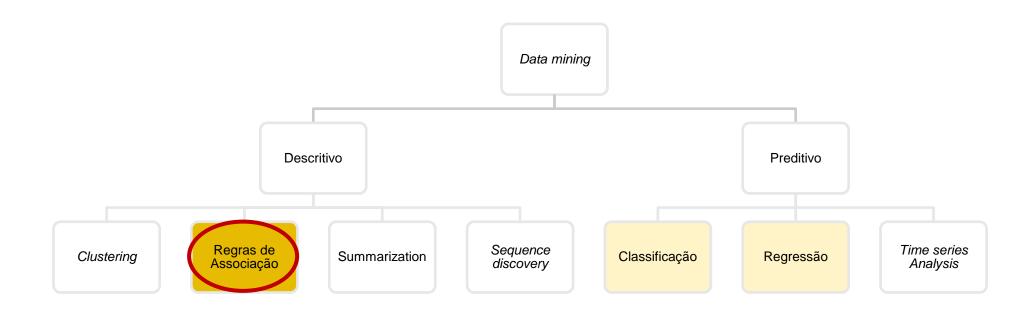
# Estimação, Deteção e Aprendizagem II



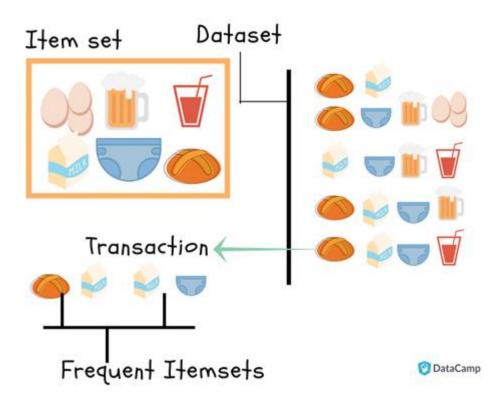
# Este capítulo



# Este capítulo



### Regras de Associação



Dado um conjunto de transações (*Transactions*)

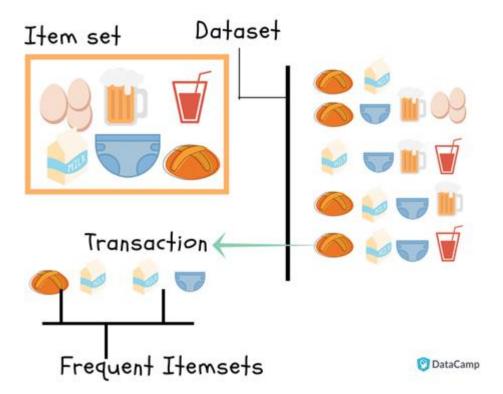
#### Identificar:

- coocorrências frequentes (Frequent Itemsets)
- Itemsets que originam outros itemsets (Regras de Associação)

#### Exemplos:

- Cestos de compras
- Transações de crédito
- Clickstreams
- Sistemas de recomendação

#### Itemset mining: Definição



#### Dado:

• Um conjunto de transações  $D = \{t_1, t_2, ..., t_n\}$ 

• Um suporte mínimo  $sup_{min} \in [0,1]$ 

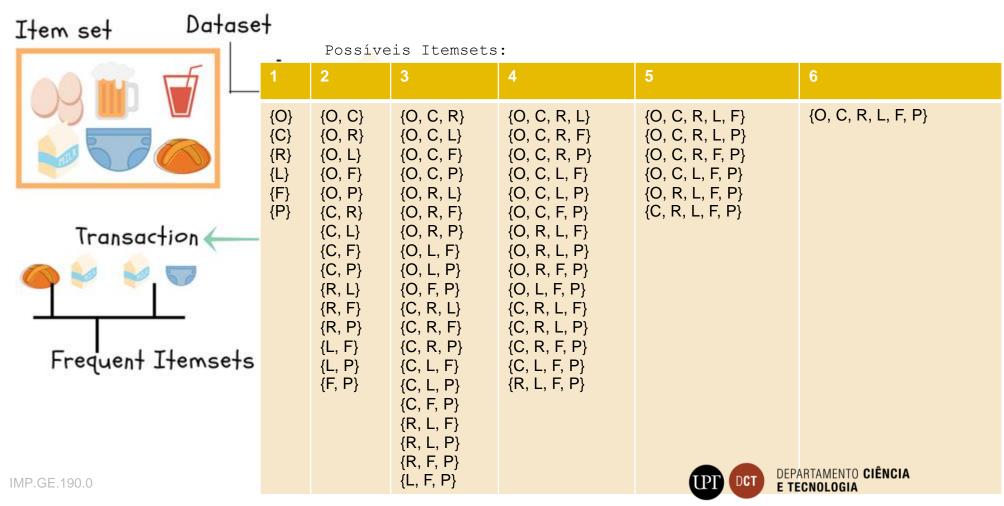
Encontrar os itemsets  $X: Support(X) > sup_{min}$ ,

Suporte: Frequência relativa (probabilidade) de X em D

$$Support(X) = P(X)$$

#### Itemset mining: Exemplo

Produtos = {ovos, cerveja, refrigerante, leite, fraldas, pão} = {O, C, R, L, F, P}



## Itemset mining: Exemplo

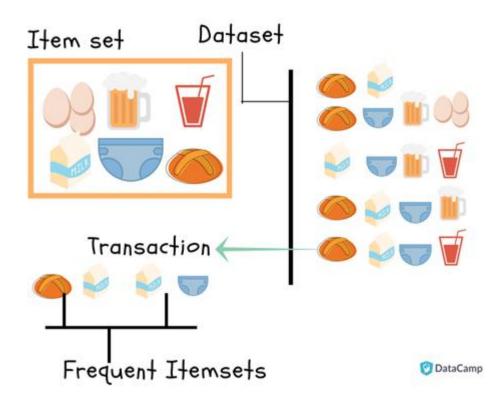


Frequência dos Itemsets:

1	# 2	#	3	#	4	#	5	#	6	#
{O}	1 {O, C}	1	{O, C, R}	0	{O, C, R, L}	0	{O, C, R, L, F}	0	{O, C, R, L, F, P}	0
{C}	3 {O, R}	0	{O, C, L}	0	{O, C, R, F}	0	{O, C, R, L, P}	0		
{R}	2 {O, L}	0	{O, C, F}	1	{O, C, R, P}	0	{O, C, R, F, P}	0		
(L)	4 {O, F}	1	{O, C, P}	1	{O, C, L, F}	0	{O, C, L, F, P}	0		
<b>(F)</b>	4 {O, P}	1	{O, R, L}	0	{O, C, L, P}	0	{O, R, L, F, P}	0		
{P}	4 {C, R}	1	{O, R, F}	0	{O, C, F, P}	1	{C, R, L, F, P}	0		
	{C, L}	2	{O, R, P}	0	{O, R, L, F}	0				
	{C, F}	3	{O, L, F}	0	{O, R, L, P}	0				
	{C, P}	2	{O, L, P}	0	{O, R, F, P}	0				
	{R, L}	1	{O, F, P}	1	{O, L, F, P}	0	_	Ιtє	emsets (Sup > 50%	<u>) :</u>
	{R, F}	1	{C, R, L}	1	{C, R, L, F}	1	{C}			
	{R, P}	1	{C, R, F}	1	{C, R, L, P}	0	{L}			
	{L, F}	3	{C, R, P}	0	{C, R, F, P}	0	{F} {P}			
	{L, P}	3	{C, L, F}	2	{C, L, F, P}	1	{C, F}			
	{F, P}	3	{C, L, P}	1	{R, L, F, P}	1	{L, F}			
			{C, F, P}	2			{L, P}			
			{R, L, F}	1			{F, P}			
			{R, L, P}	1						
			{R, F, P}	1						
			{L, F, P}	2						

Com  $sup_{min} = 50\%$ (# > 2,5)

## Regras de Associação: Conceitos



Formato: Antecedente → Consequente

"Quando o antecedente é observado, o consequente também deverá (provavelmente) ser observado"

Exemplo:

$$\{A, B\} \rightarrow \{C, D\}$$

"Quando são observados os itens A e B, os itens C e D também deverão (provavelmente) ser observados"

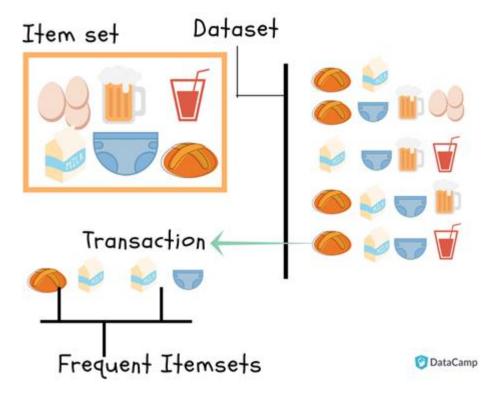
**Suporte:** percentagem de transações em que a coocorrência é observada

$$Support(\{A, B\} \rightarrow \{C, D\}) = P(\{A, B, C, D\})$$

**Confiança:** percentagem de transações em que a ocorrência do antecedente corretamente antevê a ocorrência do consequente

Confidence(
$$\{A, B\} \to \{C, D\}$$
) =  $P(\{C, D\} | \{A, B\}) = \frac{freq(\{A, B, C, D\})}{freq(\{A, B\})}$ 

## Mining Association Rules: Definição



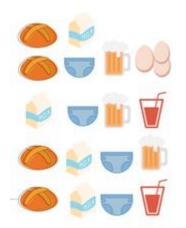
#### Dado:

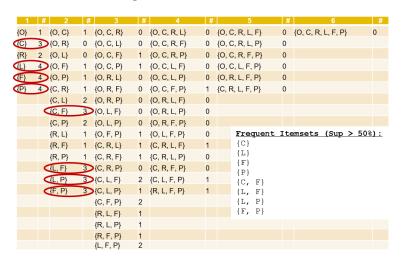
- Um conjunto de transações  $D = \{t_1, t_2, ..., t_n\}$
- Um suporte mínimo  $sup_{min} \in [0,1]$
- Uma confiança mínima  $conf_{min} \in [0,1]$

Encontrar todas as regras A→C tal que:

- $Support(A \rightarrow C) \geq sup_{min}$ ,
- $Confidence(A \rightarrow C) \geq conf_{min}$ ,

#### Mining Association Rules: Exemplo





Regra	Ant	Cons	freg(Ant)	Sup(Ant)	freg(Cons)	Sup(Cons)	frea(Ant→Cons)	Sup(Ant→Cons)	Conf(Ant→Cons)
$\mathbb{C} \rightarrow F$	С	F	3	60%	4	80%	3	60%	100%
F→C	F	С	4	80%	3	60%	3	60%	75%
L→F	L	F	4	80%	4	80%	3	60%	75%
F→L	F	L	4	80%	4	80%	3	60%	75%
L→P	L	Р	4	80%	4	80%	3	60%	75%
P→L	Р	L	4	80%	4	80%	3	60%	75%
F→P	F	Р	4	80%	4	80%	3	60%	75%
P→F	Р	F	4	80%	4	80%	3	60%	75%

 $Com sup_{min} = 50\%$ 

e  $conf_{min} = 90\%$ 

## Regras de Associação: Exercício

 $e\ conf_{min} = 90\%$ 

# Regra Ant Cons freq(Ant) Sup(Ant) freq(Cons) sup(Cons) freq(Ant—Cons) Sup(Ant—Cons) Conf(Ant—Cons) F→C F 3 60% 4 80% 3 60% 100% F→C F C 4 80% 3 60% 75% L→F L F 4 80% 4 80% 3 60% 75% F→L F L 4 80% 3 60% 75% L→P L P 4 80% 3 60% 75% P→L P L 4 80% 3 60% 75% F→P F P 4 80% 3 60% 75% P→F P F 4 80% 3 60% 75% P→F P F 4 80% 3 60% 75% P→F P F 4<

# ['p', 'l'],

from apyori import apriori

Em Python:

Rule: {'c'} -> {'f'}
Support: 0.6
Confidence: 1.0

Lift: 1.25

\_\_\_\_\_



## Avaliação de Regras de Associação: Interesse

Para uma regra de associação ser interessante, tem de ser:

- Inesperada (desviar-se do esperado)
- Útil (com benefício espectável)

Exemplo: numa bomba de gasolina, {jornal} → {combustível} não inesperada nem útil

Geralmente, uma regra A→C é interessante se A e C <u>não</u> são estatisticamente independentes

- A e C são estatisticamente independentes se:
  - $Support(A \cup C) \approx Support(C) \times Support(C)$
  - $Confidence(A \rightarrow C) \approx Confidence(\emptyset \rightarrow C)$

## Avaliação de Regras de Associação

**Lift:** mede a importância de uma regra:

- Lift > 1: o antecedente e o consequente aparecem mais frequentemente juntos do que o esperado
  - a ocorrência do antecedente tem um efeito positivo na ocorrência do consequente.
- Lift < 1: o antecedente e o consequente aparecem com menos frequência juntos do que o esperado</li>
  - a ocorrência do antecedente tem um efeito negativo na ocorrência do consequente.
- Lift ≈ 1 o antecedente e o consequente aparecem quase tão frequentemente juntos quanto o esperado
  - a ocorrência do antecedente quase não tem efeito na ocorrência do consequente.

$$Lift(A \to C) = \frac{Confidence(A \to C)}{Support(C)}$$

**Conviction**: mede a "implicação" (frequência em que o antecedente ocorre sem o consequente)

Conviction ≈ 1 se o antecedente e o consequente não são relacionados

$$Conviction(A \to C) = \frac{1 - Support(C)}{1 - Confidence(A \to C)}$$

Leverage: mede a proporção de elementos adicionais cobertos pela regra (em relação ao esperado se fossem independentes)

Leverage ≈ 0 se são independentes

$$Leverage(A \rightarrow C) = Support(A \rightarrow C) - Support(A) \times Support(C)$$

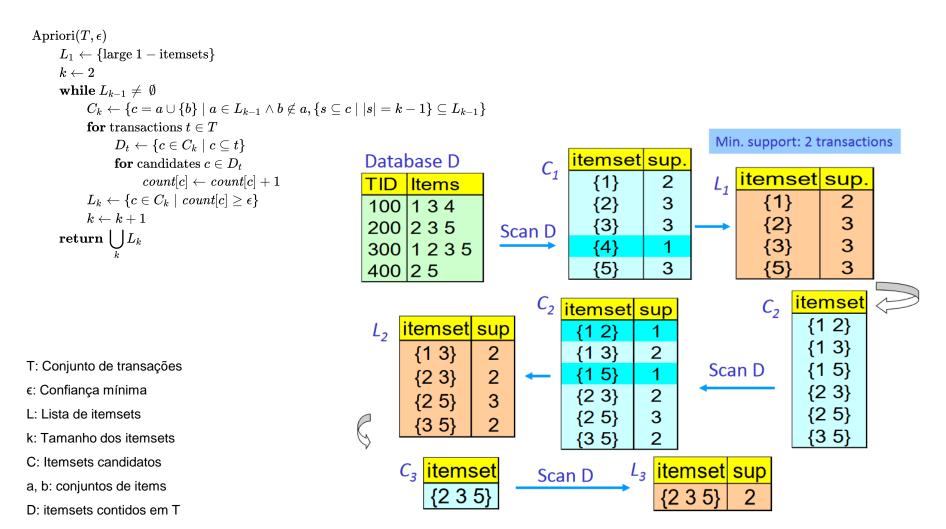
## Avaliação de Regras de Associação

Table 5: Interestingness Measures for Association Patterns

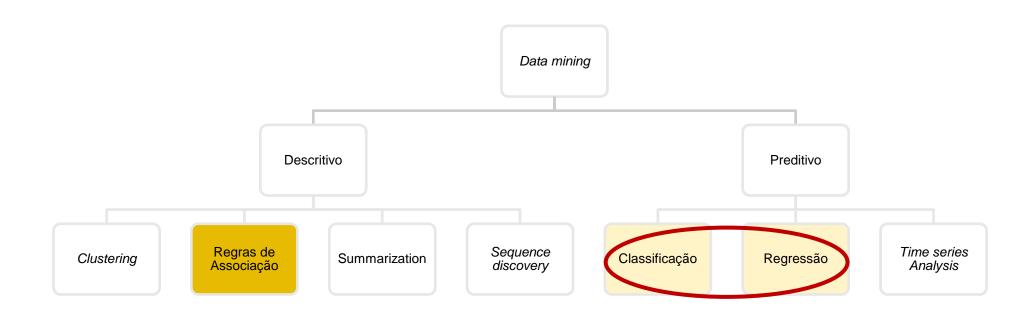
	Table 5: Interestingness Measures for Association Patterns.							
#	Measure	Formula						
1	$\phi$ -coefficient	$\frac{P(A,B) - P(A)P(B)}{\sqrt{P(A)P(B)(1 - P(A))(1 - P(B))}}$						
2	Goodman-Kruskal's $(\lambda)$	$\frac{\sqrt{P(A)P(B)(1-P(B))}}{\sqrt{P(A)P(B)(1-P(A))(1-P(B))}} \sum_{j} \max_{k} P(A_{j}, B_{k}) + \sum_{k} \max_{j} P(A_{j}, B_{k}) - \max_{j} P(A_{j}) - \max_{k} P(B_{k})} \frac{2-\max_{j} P(A_{j}) - \max_{k} P(B_{k})}{2-\max_{j} P(A_{j}) - \max_{k} P(B_{k})}$						
3	Odds ratio $(\alpha)$	$\frac{P(A,B)P(A,B)}{P(A,\overline{B})P(\overline{A},B)}$						
4	Yule's $Q$	$\frac{P(A,B)P(\overline{AB}) - P(A,\overline{B})P(\overline{A},B)}{P(A,B)P(\overline{AB}) + P(A,\overline{B})P(\overline{A},B)} = \frac{\alpha - 1}{\alpha + 1}$						
5	Yule's $Y$	$\frac{\sqrt{P(A,B)P(\overline{AB})} - \sqrt{P(A,\overline{B})P(\overline{A},\overline{B})}}{\sqrt{P(A,B)P(\overline{AB})} + \sqrt{P(A,\overline{B})P(\overline{A},\overline{B})}} = \frac{\sqrt{\alpha} - 1}{\sqrt{\alpha} + 1}$						
6	Kappa $(\kappa)$	$\frac{P(A,B)+P(\overline{A},\overline{B})-P(A)P(B)-P(\overline{A})P(\overline{B})}{1-P(A)P(B)-P(\overline{A})P(\overline{B})}$						
7	Mutual Information $(M)$	$\frac{\sum_{i}\sum_{j}P(A_{i},B_{j})\log\frac{P(A_{i},B_{j})}{P(A_{i})P(B_{j})}}{\min(-\sum_{i}P(A_{i})\log P(A_{i}),-\sum_{j}P(B_{j})\log P(B_{j}))}$						
8	J-Measure $(J)$	$\max \left(P(A,B)\log(\frac{P(B A)}{P(B)}) + P(A\overline{B})\log(\frac{P(\overline{B} A)}{P(\overline{B})}),\right)$						
9	Gini index $(G)$	$P(A,B)\log(\frac{P(A B)}{P(A)}) + P(\overline{A}B)\log(\frac{P(\overline{A} B)}{P(\overline{A})}))$ $\max(P(A)[P(B A)^{2} + P(\overline{B} A)^{2}] + P(\overline{A})[P(B \overline{A})^{2} + P(\overline{B} \overline{A})^{2}]$ $-P(B)^{2} - P(\overline{B})^{2},$ $P(B)[P(A B)^{2} + P(\overline{A} B)^{2}] + P(\overline{B})[P(A \overline{B})^{2} + P(\overline{A} \overline{B})^{2}]$ $-P(A)^{2} - P(\overline{A})^{2})$						
10	Cupport (a)	$P(A,B) = P(A)^{\alpha}$						
11	Support $(s)$ Confidence $(c)$	$\max(P(B A), P(A B))$						
12	Laplace $(L)$	$\max\left(\frac{NP(A,B)+1}{NP(A)+2}, \frac{NP(A,B)+1}{NP(B)+2}\right)$						
13	Conviction $(V)$	$\max\left(\frac{P(A) + 2}{P(A B)}, \frac{P(B) P(\overline{A})}{P(B \overline{A})}\right)$						
14	Interest $(I)$	$\frac{P(A,B)}{P(A)P(B)}$						
15	cosine $(IS)$	$\frac{P(A,B)}{\sqrt{P(A)P(B)}}$						
16	Piatetsky-Shapiro's $(PS)$	P(A,B) - P(A)P(B)						
17	Certainty factor $(F)$	$\max\left(rac{P(B A)-P(B)}{1-P(B)},rac{P(A B)-P(A)}{1-P(A)} ight)$						
18	Added Value $(AV)$	$\operatorname{max}(D(D A) = D(D) = D(A D) = D(A)$						
19	Collective strength $(S)$	$\frac{P(A,B) + P(\overline{AB})}{P(A)P(B) + P(\overline{A})P(\overline{B})} \times \frac{1 - P(A)P(B) - P(\overline{A})P(\overline{B})}{1 - P(A,B) - P(\overline{AB})}$						
20	Jaccard $(\zeta)$	$\frac{P(A,B)}{P(A)+P(B)-P(A,B)}$						
21	Klosgen $(K)$	$\sqrt{P(A,B)}\max(P(B A) - P(B), P(A B) - P(A))$						

Tan, P. N., Kumar, V., & Srivastava, J. (2002, July). Selecting the right interestingness measure for association patterns. In Proceedings of the eighth ACM SIGKDD international conference on Knowledge discovery and data mining (pp. 32-41). <a href="https://www.researchgate.net/publication/2829316">https://www.researchgate.net/publication/2829316</a> Selecting the Right Interestingness Measure for Association Patterns

#### **Algoritmo APRIORI**



# Este capítulo



## Classificação ou regressão?



# Regression

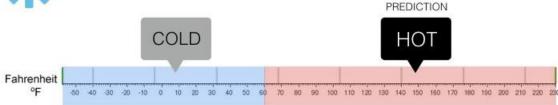
What is the temperature going to be tomorrow?



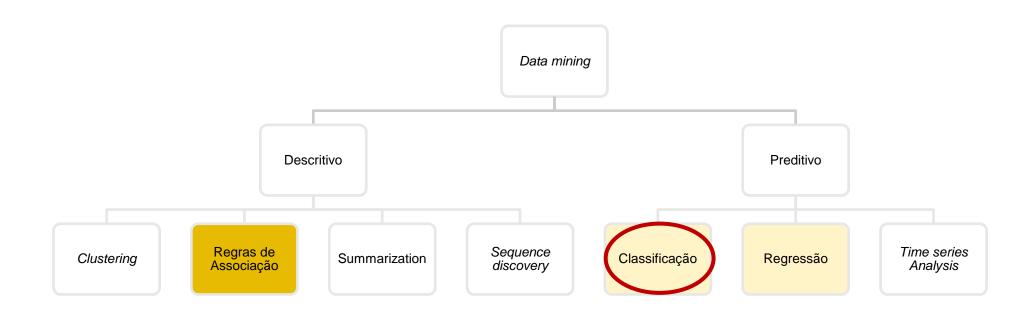


## Classification

Will it be Cold or Hot tomorrow?



# Este capítulo



# Classificação

Dados os resultados da última campanha, que conhecemos (dados históricos)

> Variável dependente Variável objetivo

Queremos prever os potenciais aderentes

Comprou	ldade	Rendimento	Ag.fam	Vendas anteriores	Ultima Venda
nao	37	49000	2	1	42000
sim	43	68000	3	0	0
sim	42	61000	4	0	0
sim	26	52000	2	0	0
sim	40	64000	1	1	21000
sim	38	52000	1	0	0
sim	45	43000	4	1	47000
sim	35	45000	2	1	34000
nao	39	43000	2	0	0
sim	31	55000	3	1	46000
sim	34	57000	3	1	52000
nan	વદ	44000	1	n	n

Comprou	ldade	Rendimento	Ag.fam	Vendas anteriores	Ultima Venda
	41	50000	2	1	0
	39	68000	2	0	30000
	58	61000	4	0	0
	26	25000	3	0	0
	21	50000	1	1	20000
	38	43000	2	0	0
	44	43000	4	1	47000
	27	47000	2	1	21000
	70	23000	2	0	25000

Variáveis independentes

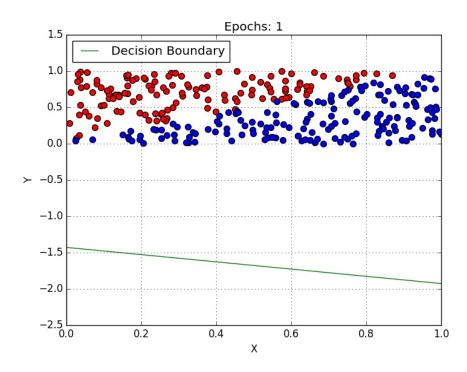
# Algoritmos de classificação

- Logistic Regression
- Naive Bayes Classifier
- K-Nearest Neighbors
- Decision Tree
  - Random Forest
- Support Vector Machines

• ..

## Logistic regression classifier

Calcula: P(Y = 1|X) ou P(Y = 0|X)A probabilidade de a variável dependente (Y) ter um determinado valor, dados os valores das variáveis independentes (X)



https://towardsdatascience.com/introduction-to-logistic-regression-66248243c148

### **Naive Bayes classifier**

Calcula:  $P(Y|X) = \frac{P(X|Y) \times P(Y)}{P(X)}$ 

A probabilidade de a variável dependente (Y) ter um determinado valor, dados os valores das variáveis independentes (X)

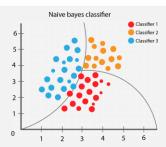
# **Naive Bayes**

**thatware.co** 

In machine learning, naive Bayes classifiers are a family of simple "probabilistic classifiers" based on applying Bayes' theorem with strong (naive) independence assumptions between the features.

$$P(A|B) = \frac{P(B|A) P(A)}{P(B)}$$

using Bayesian probability terminology, the above equation can be written as

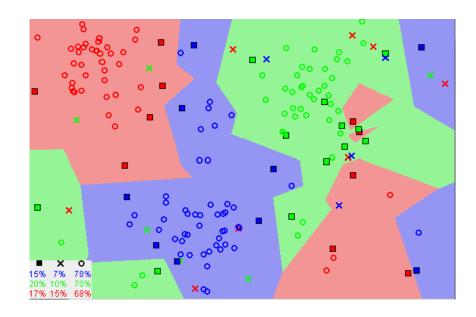


https://towardsdatascience.com/introduction-to-na%C3%AFve-bayes-classifier-fa59e3e24aaf

# K nearest neighbors classifier

Calcula a distância entre os elementos.

Assume que os elementos semelhantes se encontram próximos uns dos outros.

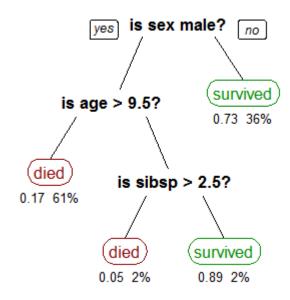


https://towardsdatascience.com/machine-learning-basics-with-the-k-nearest-neighbors-algorithm-6a6e71d01761



#### **Decision tree classifier**

Constrói uma representação de uma tabela de decisão sob a forma de árvore

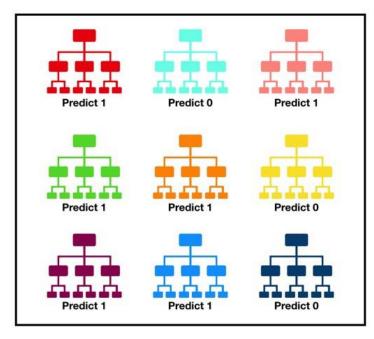


https://towardsdatascience.com/decision-trees-in-machine-learning-641b9c4e8052



#### **Random forest classifier**

Constrói um conjunto de árvores de decisão (decision trees)



Tally: Six 1s and Three 0s

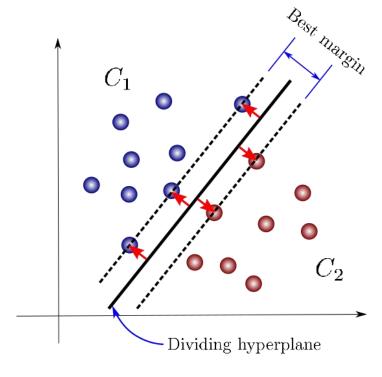
**Prediction: 1** 

https://towardsdatascience.com/understanding-random-forest-58381e0602d2



# **Support Vector Machine classifier**

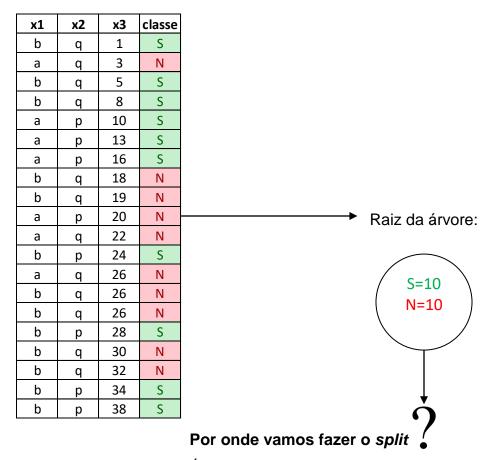
Constrói uma representação dos exemplos como pontos no espaço, mapeados de maneira que os exemplos de cada categoria estejam tão longe quanto possível



https://towardsdatascience.com/support-vector-machines-for-classification-fc7c1565e3



## Algoritmo de construção de árvores de decisão



É escolhido o *split* com menor custo (algoritmo *greedy*)

Recursivamente (grupos formados podem voltar a subdividir-se)



#### Medidas de avaliação de árvores de decisão

**Gini Index:** mede o grau ou probabilidade de uma determinada variável ser classificada incorretamente quando é escolhida aleatoriamente

$$G = 1 - \sum_{i=1}^{n} (p_i)^2$$

 $p_i$  é a probabilidade de uma observação ser classificada numa classe em particular

<b>x1</b>	х2	х3	classe
b	q	1	S
a	q	3	N
b	q	5	S
b	q	8	S
а	р	10	S
а	р	13	S
а	р	16	S
b	q	18	N
b	q	19	N
а	р	20	N
a	q	22	N
b	р	24	S
a	q	26	N
b	q	26	N
b	q	26	N
b	р	28	S
b	q	30	N
b	q	32	N
b	р	34	S
b	р	38	S

$$G = 1 - \sum_{i=1}^{n} (p_i)^2 = 1 - \left( \left( \frac{10}{20} \right)^2 + \left( \frac{10}{20} \right)^2 \right) = 0,5$$



<b>x1</b>	<b>x2</b>	х3	classe
а	q	3	N
а	р	20	N
а	р	10	S
а	р	13	S
а	р	16	S
а	q	22	N
а	q	26	N
la.	<b>a</b> :	- 1	-
b	q	1	S
b	q	32	N
b	q	26	N
b	q	18	N
b	q	19	N
b	р	24	S
b	q	8	S
b	р	34	S
b	q	5	S
b	р	28	S
b	q	30	N
b	q	26	N
b	р	38	S

IMP.GE.190.0

<b>x1</b>	х2	х3	classe
а	р	20	N
b	р	24	S
а	р	10	S
а	р	13	S
а	р	16	S
b	р	34	S
b	р	28	S
b	р	38	S
b	q	1	S
а	q	3	N
b	q	32	N
b	q	26	N
b	q	18	N
b	q	19	N
b	q	8	S
b	q	5	S
b	q	30	N
b	q	26	N
а	q	22	N
а	q	26	N

х1	x2	хЗ	classe
b	q	1	S
а	q	3	N
b	q	5	S
b	q	8	S
а	р	10	S
a	р	13	S
а	р	16	S
b	q	18	N
b	q	19	N
а	р	20	N
а	q	22	N
b	р	24	S
b	q	26	N
b	q	26	N
a	q	26	N
b	р	28	S
b	q	30	N
b	q	32	N
b	р	34	S
b	р	38	S

		Leaf /		S=: N= x3 ·	10	S=9 N=10	Decision node
	<b>x1</b>	x2	х3	classe			
	b	q	1	S		$\downarrow$	
_						?	

x1 = a	<b>V</b> ρ=7/20	s N	p=3/7 $G=0,49$ $p=4/7$	x2 = p	<b>V</b> ρ=8/20	S N	p=7/8 $G = 0,219$ $p=1/8$
	<b>F</b> p=13/20	S N	p=7/13 $G = 0,497$ $p=6/13$		<b>F</b> p=12/20	s N	p=3/12 $G = 0,375$ $p=9/12$

x3 < 2	<b>V</b>	S	p=1/1 $G=0$
	ρ=1/20	N	p=0/1
		S N	p=9/19 $G = 0,4p=10/19$

DEPARTAMENTO CIÊNCIA E TECNOLOGIA

. . .

**x2** 

q

р

**x1** 

classe

х3

3

10 13

16

18

19

22

24

26 26

26

28

32

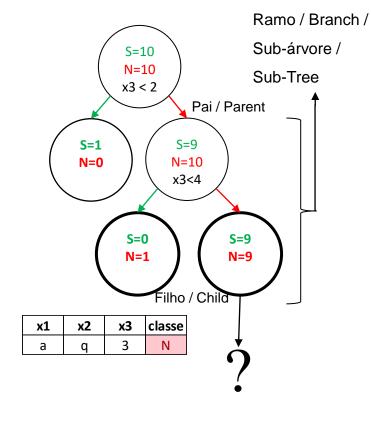
38

Ν

<b>x1</b>	x2	хЗ	classe
а	q	3	N
а	р	20	N
а	р	10	S
а	р	13	S
a	р	16	S
а	q	22	N
а	q	26	N
b	q	32	N
b	q	26	N
b	q	18	N
b	q	19	N
b	р	24	S
b	q	8	S
b	р	34	S
b	q	5	S
b	р	28	S
b	q	30	N
b	q	26	N
b	р	38	S

<b>x1</b>	x2	хЗ	classe
a	р	20	N
b	р	24	S
a	р	10	S
a	р	13	S
а	р	16	S
b	р	34	S
b	р	28	S
b	р	38	S
а	q	3	N
b	q	32	N
b	q	26	N
b	q	18	N
b	q	19	N
b	q	8	S
b	q	5	S
b	q	30	N
b	q	26	N
а	q	22	N
а	q	26	N

	а	
	b	
	b	
	b	
	а	
	b	
	b	
	b	
	b	l
	b	
0,219	x3 < 4	
0,298		



x1 = a		S	p=3/7 $G=0,49$
	p=7/19	N	p=4/7
	F	s	p=6/12 G = 0,5
	p=12/19	N	p=6/12

k2 = p	<b>V</b> p=8/19	S N	p=7/8 p=1/8	G = 0.219
	<b>F</b> p=11/19	S N	p=2/11 p=9/11	G = 0,298

x3 < 4	<b>V</b> ρ=1/19	S N	p=0/1 p=1/1	G = 0
	<b>F</b> p=18/19	S N	p=9/18 p=9/18	

. . .



<b>x1</b>	x2	х3	classe
а	р	20	N
а	р	10	S
а	р	13	S
а	р	16	S
а	q	22	N
а	q	26	N
b	q	32	N
b	q	26	N
b	q	18	N
b	q	19	N
b	р	24	S
b	q	8	S
b	р	34	S
b	q	5	S
b	р	28	S
b	q	30	N
b	q	26	N
b	р	38	S

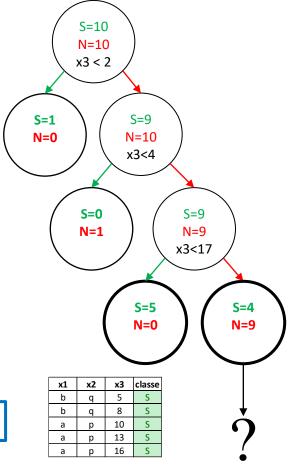
x1 = a	<b>V</b> p=6/18	S N	p=3/6 p=3/6	G = 0.5
	<b>F</b> p=12/18	S N	p=6/12 p=6/12	G = 0.5

<b>x1</b>	x2	х3	classe
а	р	20	N
р	р	24	S
а	р	10	S
a	р	13	S
a	р	16	S
b	р	34	S
b	р	28	S
b	р	38	S
b	q	32	N
b	q	26	N
b	l q	18	N
b b	q q	18 19	N N
	9 9 9		
b	q	19	N
b b	q q	19 8	N S
b b	q q q	19 8 5	N S S
b b b	q q q q	19 8 5 30	N S S N

x2 = 9	<b>V</b> p=8/18	S N	p=7/8 $G=0,498$ $p=1/8$
	<b>F</b> p=10/18	S N	p=2/10 $G = 0,278$ $p=8/10$

<b>x1</b>	x2	х3	classe
b	q	5	S
b	q	8	S
a	р	10	S
a	р	13	S
а	р	16	S
b	q	18	N
b	q	19	N
а	р	20	N
а	q	22	N
b	р	24	S
b	q	26	N
	ч		
b		26	N
	q q		
b	q	26	N
b a	q q	26 26	N N
b a b	q q p	26 26 28	N N
b a b	q q р	26 26 28 30	N N S

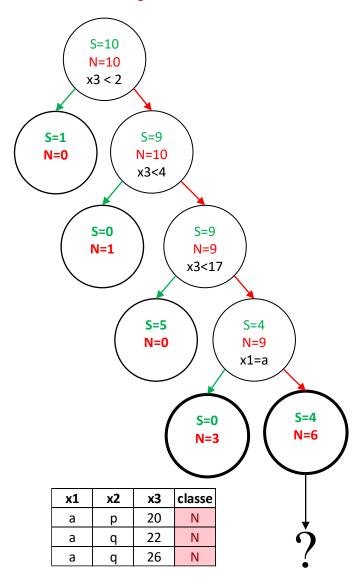
x3 < 17	<b>V</b> ρ=5/18	S N	p=5/5 p=0/5	G = 0
	<b>F</b> p=13/18	S N	p=4/13 p=9/13	G = 0,426





<b>x1</b>	x2	хЗ	classe
а	р	20	N
а	q	22	N
а	q	26	N
b	q	32	N
b	q	26	N
b	q	18	N
b	q	19	N
b	р	24	S
b	р	34	S
b	р	28	S
b	q	30	N
b	q	26	N
b	р	38	S

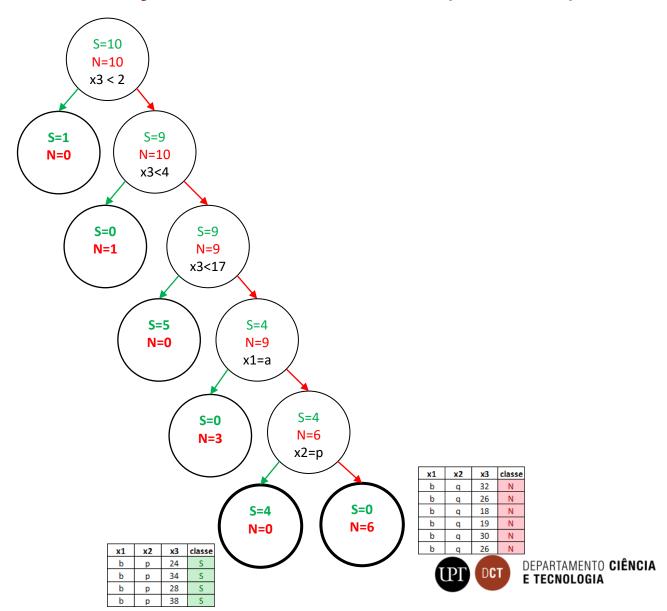
x1 = a	<b>V</b> p=3/13	S N	p=0/3 $G=0$ $p=3/3$
	<b>F</b> p=10/13	S N	p=4/10 p=6/10

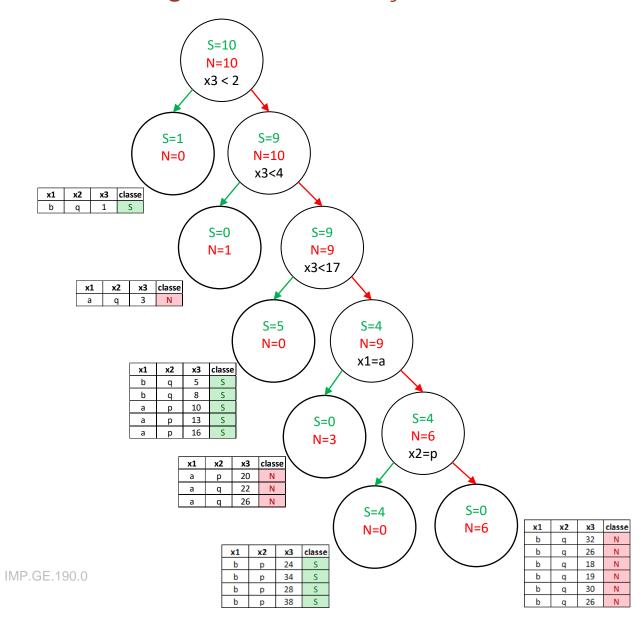




<b>x1</b>	x2	хЗ	classe
b	р	24	S
b	р	34	S
b	р	28	S
b	р	38	S
b	q	32	N
b	q	26	N
b	q	18	N
b	q	19	N
b	q	30	N
b	q	26	N

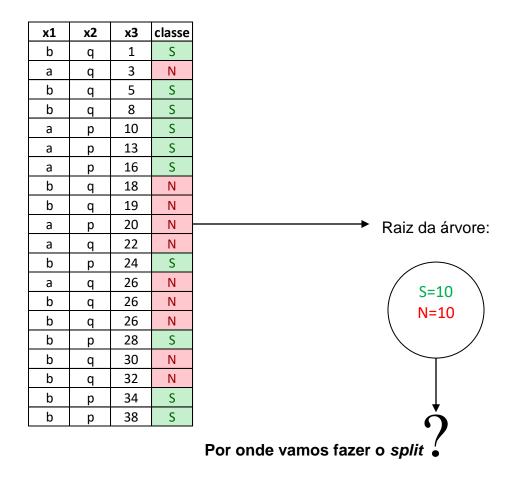
x2 = p	<b>V</b> p=4/10	S N	p=4/4 p=0/4	G = 0
	<b>F</b> p=6/10	S N	p=0/6 p=6/6	G = 0







## Algoritmo de construção de árvores de decisão





#### Medidas de avaliação de árvores de decisão

Entropy: é usada como uma forma de medir a aleatoriedade de uma coluna

$$E = -\sum_{i=1}^{n} p_i \times \log_2 p_i$$

 $p_i$  é a probabilidade de uma observação ser classificada numa classe em particular

#### Medidas de avaliação de árvores de decisão

**Information Gain:** mede a redução de entropia de um determinado *split* 

$$IG(T,A) = E(T) - \sum_{v} \frac{|T_v|}{T} \times E(T_v)$$

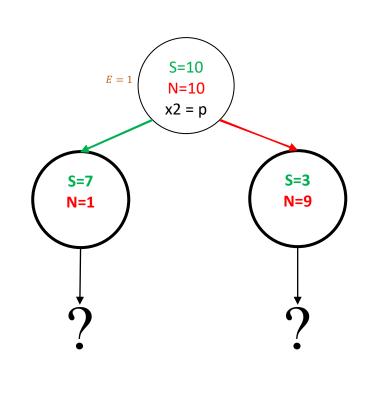
T é o target (a classe) A é a variável v é cada valor possível da variável

<b>x1</b>	x2	х3	classe	
b	q	1	S	
а	q	3	N	
b	q	5	S	
b	q	8	S	
а	р	10	S	
а	р	13	S	
а	р	16	S	
b	q	18	N	
b	q	19	N	
а	р	20	N	Raiz da árvore:
а	q	22	N	
b	р	24	S	
а	q	26	N	S-10
b	q	26	N	S=10 N=10
b	q	26	N	n
b	р	28	S	$E = -\sum_{i=1}^{n} p_i \times \log_2 p_i = -\left(\frac{10}{20}\right) \times \log_2\left(\frac{10}{20}\right) = 1$
b	q	30	N	$L = \sum_{i=1}^{p_i \times \log_2 p_i} (20)^{10g_2} (20)^{-1}$
b	q	32	N	$\iota=1$
b	р	34	S	$igg\downarrow$
b	р	38	S	$\dot{\mathbf{O}}$
				Por onde vamos fazer o <i>split</i>

<b>x1</b>	<b>x2</b>	хЗ	classe
а	q	3	N
а	р	20	N
а	р	10	S
а	р	13	S
a	р	16	S
a	q	22	N
a	q	26	N
b	q	1	S
b	q	32	N
b	q	26	N
b	q	18	N
b	q	19	N
b	р	24	S
b	q	8	S
b	р	34	S
b	q	5	S
b	р	28	S
b	q	30	N
b	q	26	N
b	р	38	S

x1	х2	хЗ	classe
а	р	20	N
b	р	24	S
a	р	10	S
a	р	13	S
a	р	16	S
b	р	34	S
b	р	28	S
b	р	38	S
b	q	1	S
а	q	3	N
b	q	32	N
b	q	26	N
b	q	18	N
b	q	19	N
b	q	8	S
b	q	5	S
b	q	30	N
b	q	26	N
а	q	22	N
а	q	26	N

<b>x1</b>	x2	х3	classe
b	q	1	S
а	q	3	N
b	q	5	S
b	q	8	S
а	р	10	S
а	р	13	S
a	р	16	S
b	q	18	N
b	q	19	N
а	р	20	N
а	q	22	N
b	р	24	S
b	q	26	N
b	q	26	N
а	q	26	N
b	р	28	S
b	q	30	N
b	q	32	N
b	р	34	S
b	р	38	S



x1 = a	<b>V</b> p=7/20	S N	p=3/7 $p=4/7$ $E=0.985$	×		
	<b>F</b> ρ=13/20	S N	p=7/13 p=6/13 $E=0,996$			
IMF	P.GE.190.0	)				
IG = 1 -	$IG = 1 - \left(\frac{7}{20} \times 0,985 + \frac{13}{20} \times 0,996\right) = 0,00795$					

x2 = p		S N	p=7/8 $p=1/8$ $E=0,544$
	<b>F</b> p=12/20	s N	p=3/12 $p=9/12$ $E=0.811$ $IG=0.295807$

х3 < 2	<b>V</b>	S	p=1/1 $G=0$
	ρ=1/20	N	p=0/1 $E=0$
	<b>F</b> p=19/20	S N	p=9/19 $p=10/19E = 0.99$

$$IG = 0,051899$$
 $IG(outros) \ll 0,295807$ 

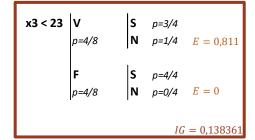


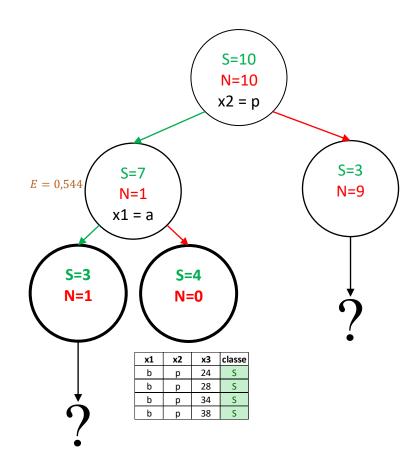
<b>x1</b>	<b>x2</b>	х3	classe
а	р	20	N
а	р	10	S
а	р	13	S
а	р	16	S
b	р	24	S
b	р	34	S
b	р	28	S
b	р	38	S

<b>x1</b>	x2	хЗ	classe
a	р	10	S
a	р	13	S
a	р	16	S
a	р	20	N
b	р	24	S
b	р	28	S
b	р	34	S
b	р	38	S

**x1 = a** | **V** | S 
$$p=3/4$$
 | N  $p=1/4$  |  $E=0,811$  | F | S  $p=4/4$  | N  $p=0/4$  |  $E=0$  |  $E=$ 

**x3 < 17** | **V** | **S** | 
$$p=3/3$$
 | **N** |  $p=0/3$  |  $E=0$  | **S** |  $p=4/5$  | **N** |  $p=1/5$  |  $E=0,722$  |  $E=0,092795$ 



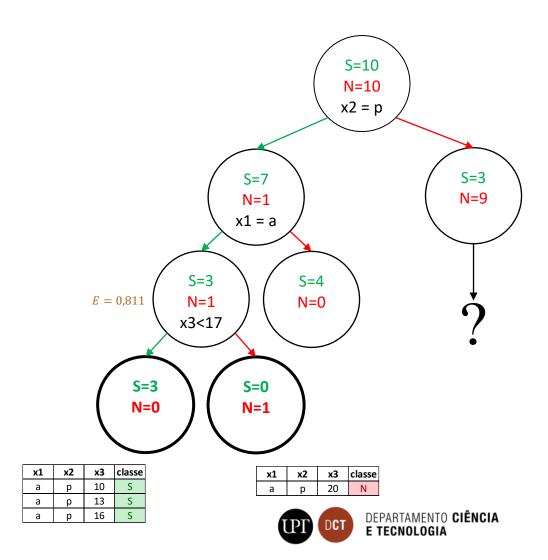




IMP.GE.190.0

х1	х2	хЗ	classe
a	р	10	S
а	р	13	S
a	р	16	S
a	р	20	N

x3 < 17	v	S	p=3/3
	<b>V</b> p=3/4	N	p=3/3 $p=0/3  E = 0$
		S	p=0/1 $p=1/1  E=0$
	p=1/4	N	p=1/1  E=0
			IG = 0.811



<b>x1</b>	x2	хЗ	classe
а	q	3	N
а	q	22	N
a	q	26	N
b	0	1	S
U	q		3
b	q	32	N
b	q	26	N
b	q	18	N
b	q	19	N
b	q	8	S
b	q	5	S
b	q	30	N
b	q	26	N

**x1 = a** 
$$\begin{vmatrix} \mathbf{V} \\ p=3/12 \end{vmatrix}$$
  $\begin{vmatrix} \mathbf{S} & p=0/3 \\ \mathbf{N} & p=3/3 \end{vmatrix}$   $E = 0$   $\begin{vmatrix} \mathbf{F} \\ p=9/12 \end{vmatrix}$   $\begin{vmatrix} \mathbf{S} & p=3/9 \\ \mathbf{N} & p=6/9 \end{vmatrix}$   $E = 0,918$ 

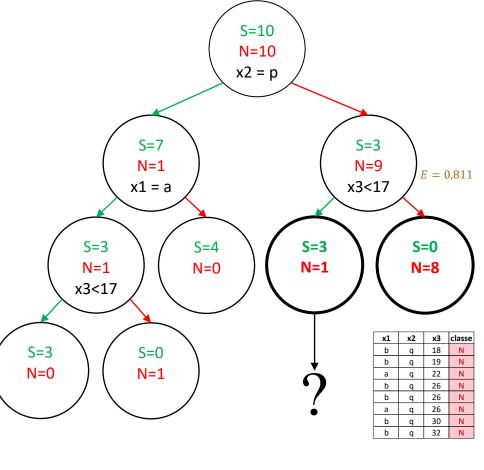
IG = 0,122278

<b>x1</b>	x2	х3	classe
b	q	1	S
а	q	3	N
b	q	5	S
b	q	8	S
b	q	18	N
b	q	19	N
а	q	22	N
b	q	26	N
b	q	26	N
а	q	26	N
b	q	30	N
b	q	32	N



**x3 < 4** 
$$\begin{vmatrix} V \\ p=2/12 \end{vmatrix}$$
  $\begin{vmatrix} S \\ N \end{vmatrix}$   $p=1/2$   $E=1$   $B = 1$   $B = 1$ 

x3 < 17	<b>V</b> p=4/12	S N	p=3/4 p=1/4	E = 0.811
	<b>F</b> p=8/12	S N	p=0/8 p=8/8	IG = 0,540574 E = 0



DEPARTAMENTO CIÊNCIA

E TECNOLOGIA

х1	x2	х3	classe
a	q	3	N
b	q	1	S
b	q	8	S
b	q	5	S

х1	х2	хЗ	classe
b	q	1	S
а	q	3	N
b	q	5	S
b	q	8	S

p=1/4

p=2/4

x3 < 2 V

**x1 = a** | **V** | 
$$p=1/4$$
 | **S** |  $p=0/1$  | **N** |  $p=1/0$  |  $p=1/0$ 

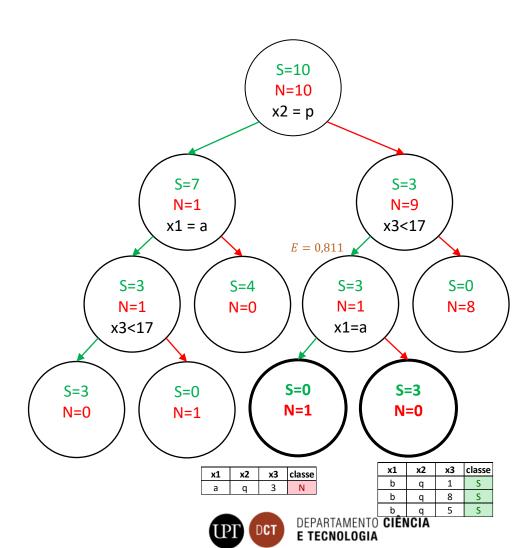
$$\begin{vmatrix} \mathbf{F} & & | \mathbf{S} & p=2/3 & IG = 0,122278 \\ \mathbf{N} & p=1/3 & E = 0,918 \end{vmatrix}$$

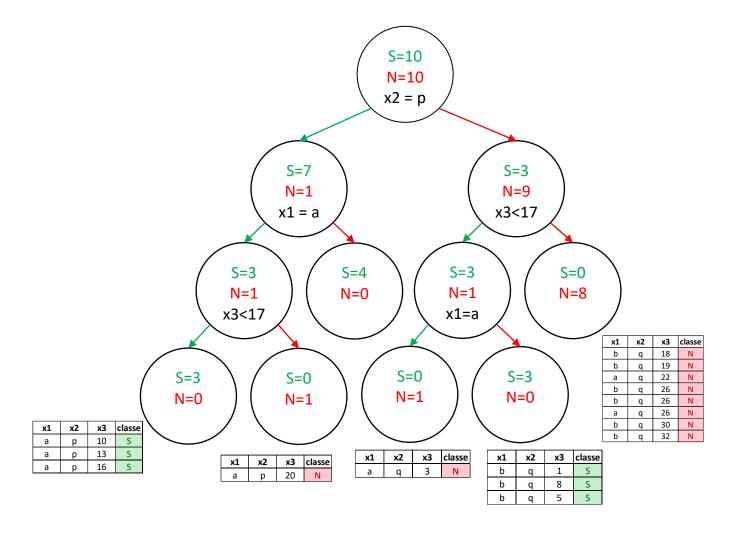
$$\mathbf{x3} < \mathbf{4} \begin{vmatrix} \mathbf{V} & & | \mathbf{S} & p=1/2 \\ p=2/4 & & | \mathbf{N} & p=1/2 & E = 1 \end{vmatrix}$$

$$\mathbf{F} & & | \mathbf{S} & p=2/2 & IG = 0,311 \\ \mathbf{P} & & | \mathbf{N} & p=0/2 & E = 0 \end{vmatrix}$$

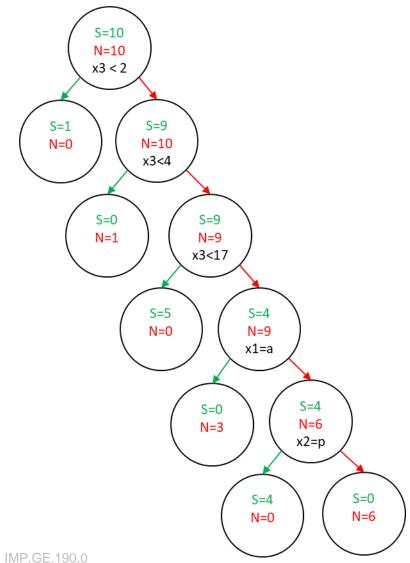
**S** *p=1/1* 

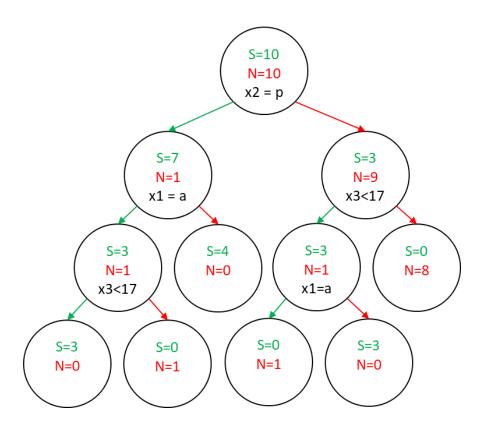
N p=0/1 E=0





### Algoritmo de construção de árvores de decisão (Gini Index vs. Information Gain)







#### Algoritmo de árvores de decisão: quando parar?

No limite, podemos ter uma "folha" para cada exemplo (overfitting)

#### Como evitar? Saber quando parar:

- Estabelecendo um número mínimo de exemplos por folha
- Estabelecendo uma profundidade máxima para a árvore
- Pruning: remover ramos que utilizam variáveis de baixa importância
  - Reduced error pruning: começa numa folha e remove os nós com a classe mais popular dessa folha, se não piorar a métrica de avaliação. Repete para outras folhas.
  - Cost complexity pruning / weakest link pruning: é utilizado um parâmetro (α) para determinar se um determinado nó pode ser removido tendo como base o tamanho da sub-árvore.

#### Mais sobre overfitting:

Hawkins, D. M. (2004). The problem of overfitting. Journal of chemical information and computer sciences, 44(1), 1-12.

https://pubs.acs.org/doi/pdf/10.1021/ci0342472

#### Avaliação do modelo de Classificação

$$Accuracy = \frac{TP + TN}{TP + TN + FP + FN}$$

Precision, Positive Predictive Value:  $PPV = \frac{TP}{TP + FP}$ 

$$Recall = \frac{TP}{TP + FN}$$

$$F_1 = \frac{2}{\frac{1}{Precision} + \frac{1}{Recall}}$$

$$Specificity = \frac{TN}{TN + FP}$$

Negative Predictive Value: 
$$NPV = \frac{TN}{TN + FN}$$

False Positive Rate: 
$$FPR = \frac{FP}{FP + TN}$$

False Negative Rate: 
$$FNR = \frac{FN}{TP + FN}$$

### Vantagens e desvantagens de árvores de decisão

Vantagens	Desvantagens	
<ul> <li>Fáceis de compreender, interpretar e visualizar</li> <li>Executam feature selection implicitamente</li> <li>Permitem usar dados numéricos e categóricos</li> <li>Conseguem lidar com dados com vários targets</li> <li>Não obrigam a muito esforço no processo de data preparation</li> <li>Relações não-lineares não afetam o desempenho da árvore</li> </ul>	<ul> <li>Podem criar árvores demasiado complexas que não generalizam (overfitting)</li> <li>Variance: Pequenas variações nos dados podem fazer com que seja criada uma árvore completamente diferente         <ul> <li>Variance pode ser reduzida com métodos como bagging<sup>(1)</sup> e boosting<sup>(1)</sup></li> </ul> </li> <li>Algoritmos greedy não garantem a criação da árvore de decisão ótima         <ul> <li>Para ultrapassar, podem criar-se várias árvores, em que as features e as amostras são selecionadas aleatoriamente: Random Forest<sup>(1)</sup></li> </ul> </li> <li>Se houver uma classe dominante, o modelo poderá criar uma árvore enviesada (biased)         <ul> <li>Recomenda-se balancear<sup>(2)</sup> os dados antes da aplicação de modelos de árvores de decisão</li> </ul> </li> </ul>	

<sup>(1)</sup> Métodos *bagging*, *boosting* e *Random Forest* serão vistos mais à frente, durante o semestre

<sup>(2)</sup> Técnicas para lidar com dados imbalanced: https://www.analyticsvidhya.com/blog/2017/03/imbalanced-data-classification/

# Árvores de decisão para regressão

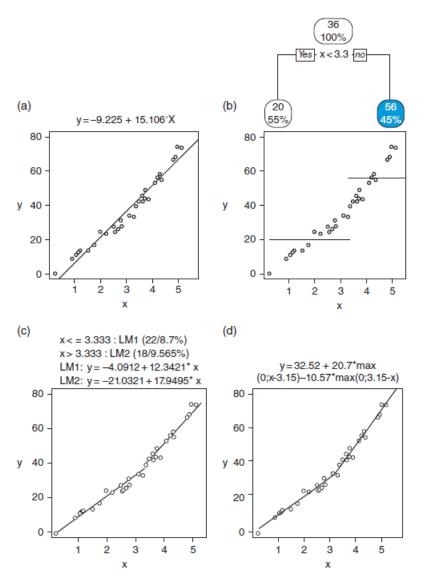
O princípio e o algoritmo são os mesmos

#### O que muda:

- Métricas. Por exemplo:
  - Redução da variância
  - Redução do desvio padrão / Standard Deviation Reduction (ver <a href="http://blog.saedsayad.com/decision\_tree\_reg.htm">http://blog.saedsayad.com/decision\_tree\_reg.htm</a>)
- Forma como as folhas preveem os valores:
  - Em classificação escolhe-se a maioria, em regressão geralmente escolhe-se a média (CART)
  - Model Trees e Multivariate Adaptive Regression Splines (MARS) usam multivariate linear regression em vez da média

[1] Quinlan, J.R. (1992) Learning with continuous classes, in *Proceedings of the 5th Australian Joint Conference on Artificial Intelligence*, World Scientific, pp. 343–348.

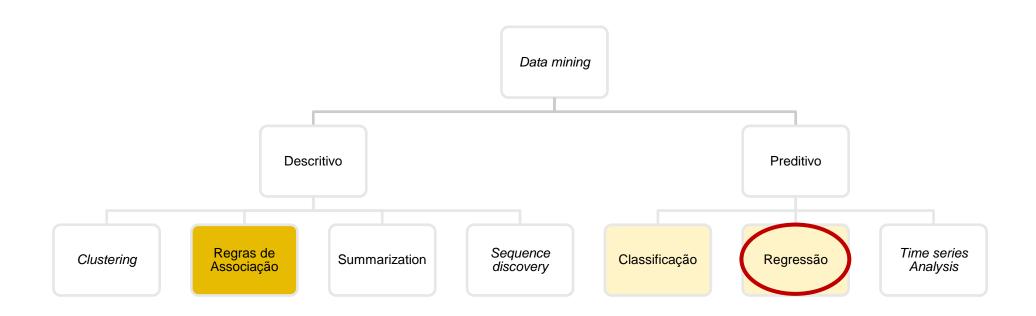
# Árvores de decisão para regressão: comparação de modelos



- (a) MLR
- (b) CART
- (c) Model trees
- (d) MARS



# Este capítulo



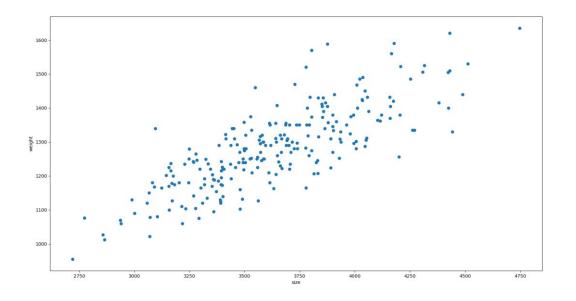
# Notação

 $oldsymbol{ar{\chi}}$  Média da variável  $oldsymbol{\chi}$ 

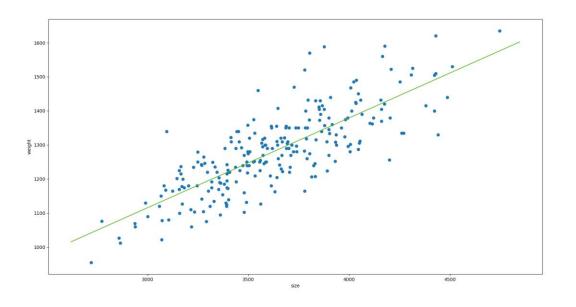
 $oldsymbol{\widehat{\chi}}$  Previsão da variável  $oldsymbol{\chi}$ 

# **Regressão Linear Simples**

size	weight
4512	153
3738	1297
4261	1335
3777	1282
4177	159
3585	13



## **Regressão Linear Simples**



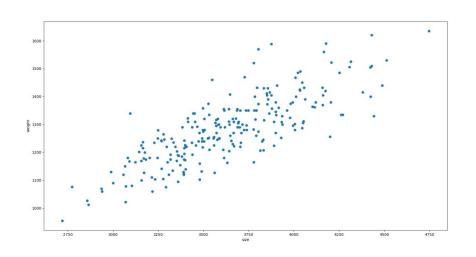
$$y = mx + b$$

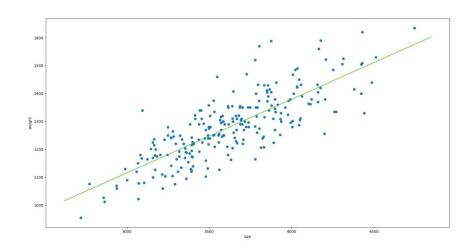
$$y = \beta_0 + \beta_1 x_1$$

$$weight = \beta_0 \times size + \beta_1$$

$$?$$

#### Determinação do declive (m) e da ordenada na origem (b)





$$\beta_1 = \frac{\sum (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})}{(x_i - \bar{x})^2}$$

$$\beta_0 = \bar{y} - \beta_1 \bar{x}$$

$$\beta_1 = 0,26342933948939945$$

$$\beta_0 = 325,57342104944223$$

$$weight \approx 0,2634 \times size + 325,5734$$

### Avaliação do modelo de Regressão

$$R^{2} = 1 - \frac{\sum_{i=1}^{n} (y_{i} - \hat{y}_{i})^{2}}{\sum_{i=1}^{n} (y_{i} - \bar{y}_{i})^{2}}$$

 $\begin{aligned} \text{Mean Absolute Error: } & \textit{MAE} = \frac{\sum_{i=1}^{n} |y_i - \hat{y}_i|}{n} & \text{Tem a mesma unidade de medida de } y \\ & \text{Mean Squared Error: } & \textit{MSE} = \frac{\sum_{i=1}^{n} (y_i - \hat{y}_i)^2}{n} & \text{Tem a mesma unidade de medida do quantification of the state of the state$ 

Tem a mesma unidade de medida do quadrado de y. Enfatiza mais os erros maiores

$$Root \ \text{Mean Squared Error} : RMSE = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^{n}(y_i - \hat{y}_i)^2}{n}} \quad ^{\text{Tem a mesma unidade de medida de } y$$

Relative Mean Squared Error: RelMSW =  $\frac{\sum_{i=1}^{n} (y_i - \hat{y}_i)^2}{\sum_{i=1}^{n} (y_i - \bar{y}_i)^2}$ 

Compara a capacidade preditiva com a da previsão trivial (média).

Valores possíveis:

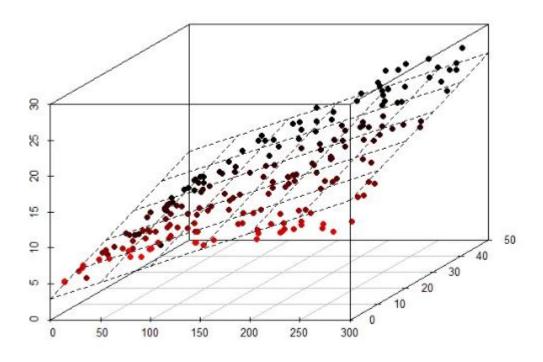
- 0: modelo perfeito
- 10,1[: modelo útil
- 1: modelo tão útil como prever a média
- >1: modelo inútil (pior do que prever a média)

Relative Root Mean Squared Error: RelRMSW = 
$$\sqrt{RMSE}$$
 =  $\sqrt{\frac{\sum_{i=1}^{n}(y_i - \hat{y}_i)^2}{\sum_{i=1}^{n}(y_i - \bar{y}_i)^2}}$ 

## Regressão Linear Múltipla

Com duas variáveis independentes  $(x_1 e x_2)$  uma dependente (y):

Em vez de uma reta, teremos um plano



$$y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2$$

#### Regressão Linear Múltipla

Com n variáveis independentes  $(x_1, x_2, ..., x_n)$  uma dependente (y):

Não é possível visualizar

Mas podemos generalizar:

$$y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \dots + \beta_n x_n$$



Do conhecimento à prática.