# 





Algoritmos de Classificação

Dheny R. Fernandes

# Agenda

#### 1. Decision Trees

- 1. Como construir uma árvore
- 2. Gini
- 3. Exemplo

#### **3.** KNN

- 1. Intuição
- 2. Características
- 3. Medida de Distância
- 4. Exemplo
- 5. Sensibilidade a escala
- 6. Implementação

# 2. Formas de Validação

- 1. Holdout
- 2. K-fold

### 4. Métricas de Avaliação

- 1. Matriz de confusão
- 2. Acurácia
- 3. Precision
- 4. Recall
- 5. F1-Score



Classification and Regression Trees, ou CART, é um termo usado para se referir aos algoritmos de Árvore de Decisão que podem ser usados para modelar problemas tanto de classificação quanto de regressão.

O Algoritmo CART é o fundamento para importantes algoritmos como *Bagged Decision Trees, Boosted Decision Trees* e *Random Forest*.

Aqui, vamos entender de modo geral as Decision Trees, visto que já estudamos profundamente as Regression Trees



Para começar, vamos entender como construir uma árvore de decisão. Para tanto, suponha que eu possua os seguintes dados:

Dor no peito	Boa circulação Sanguínea	Artérias bloqueadas	Doença cardíaca
N	N	N	N
Υ	Υ	Υ	Υ
Υ	Υ	N	N
Υ	N	?	Υ

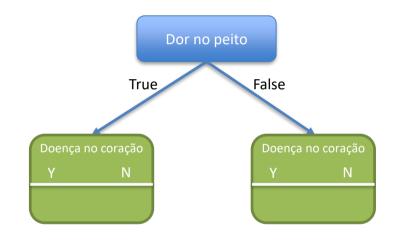
Assim como nas regression trees, a primeira coisa a ser feita é avaliar cada feature como uma possível candidata a ser o nó raiz.





# Vamos verificar como Dor no peito prediz doença cardíaca:

Dor no peito	Boa circulação Sanguínea	Artérias bloqueadas	Doença cardíaca
N	N	N	N
Υ	Υ	Υ	Υ
Υ	Υ	N	N
Υ	N	?	Υ





# Agora contamos os valores para cada combinação:

Dor no peito	Boa circulação Sanguínea	Artérias bloqueadas	Doença cardíaca
N	N	N	N
Υ	Υ	Y	Υ
Υ	Υ	N	N
Υ	N	?	Υ

# Agora contamos os valores para cada combinação:

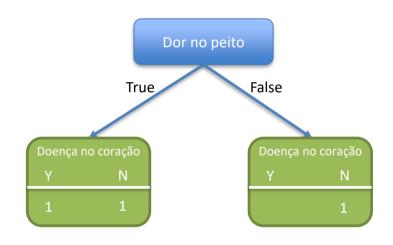
Dor no peito	Boa circulação Sanguínea	Artérias bloqueadas	Doença cardíaca	Dor no peito  True False
N	N	N	N	
Υ	Υ	Υ	Υ	Doença no coração Doença no cora
Υ	Y	N	N	Y N Y
Υ	N	?	Υ	





# Agora contamos os valores para cada combinação:

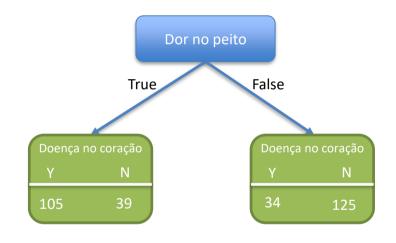
Dor no peito	Boa circulação Sanguínea	Artérias bloqueadas	Doença cardíaca
N	N	N	N
Υ	Υ	Υ	Υ
Υ	Υ	N	N
Υ	N	?	Υ





#### E calculamos até obter o valor relativo a todas as linhas do data set:

Dor no peito	Boa circulação Sanguínea	Artérias bloqueadas	Doença cardíaca
N	N	N	N
Υ	Υ	Υ	Υ
Υ	Υ	N	N
Υ	N	?	Υ

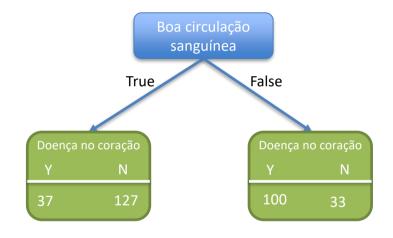






# Agora repetimos o processo para Boa circulação sanguínea

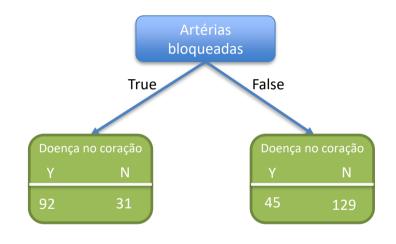
Dor no peito	Boa circulação Sanguínea	Artérias bloqueadas	Doença cardíaca
N	N	N	N
Υ	Υ	Υ	Υ
Υ	Υ	N	N
Υ	N	?	Υ





### E para Artérias bloqueadas também:

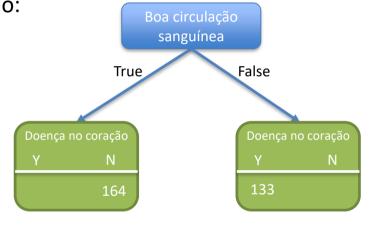
Dor no peito	Boa circulação Sanguínea	Artérias bloqueadas	Doença cardíaca
N	N	N	N
Υ	Υ	Υ	Υ
Υ	Υ	N	N
Υ	N	?	Υ



Importante notar que, como não sabemos o valor para esse paciente, não o levamos em consideração

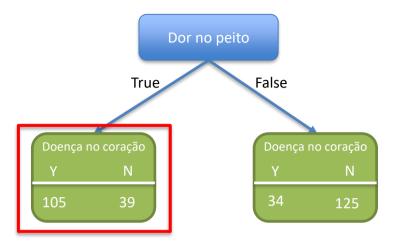


Agora, precisamos determinar quão bem cada feature conseguiu separar os pacientes com e sem doença cardíaca. Olhando os dados, vimos que nenhuma feature conseguiu uma separação perfeita. Exemplo:

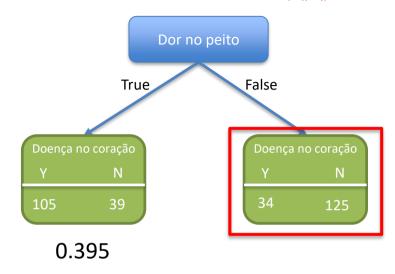


Isso significa que todas as features são impuras. Assim, para determinar qual feature deve ser o nó raiz, precisamos de uma maneira de mensurar e comparar impureza.

Aqui, vamos usar a métrica Gini:  $Gini = 1 - \sum_{i=1}^{k} p_i^2$ 



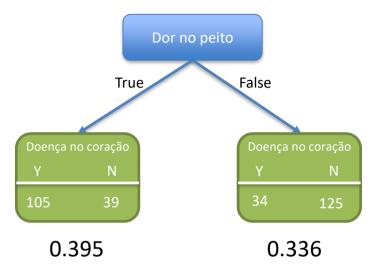
$$Gini = 1 - (p(Y)^2 - p(N)^2) = 1 - \left(\frac{105}{105 + 39}\right)^2 - \left(\frac{39}{105 + 39}\right)^2 = 0.395$$



$$Gini = 1 - (p(Y)^2 - p(N)^2) = 1 - \left(\frac{34}{34 + 125}\right)^2 - \left(\frac{125}{34 + 125}\right)^2 = 0.336$$

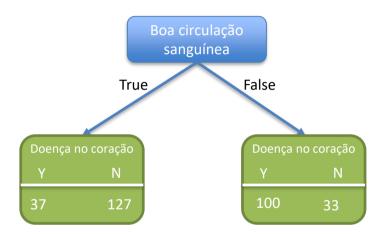
Agora que calculamos o Gini para ambas as folhas, podemos calcular o Gini total do nó Dor no peito para separar pacientes com ou sem doença cardíaca.

Vamos usar a média ponderada pela quantidade de pacientes para determinar o Gini total

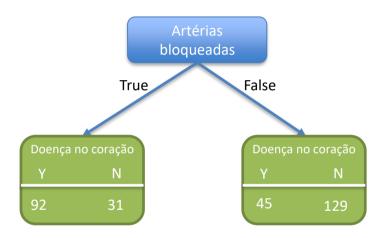


$$GiniTotal = \left(\frac{144}{144 + 159}\right) \times 0.395 + \left(\frac{159}{144 + 159}\right) \times 0.336 = 0.364$$

#### Repetimos o processo para as outras features:



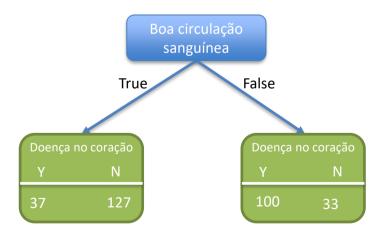
$$Gini = 0.360$$



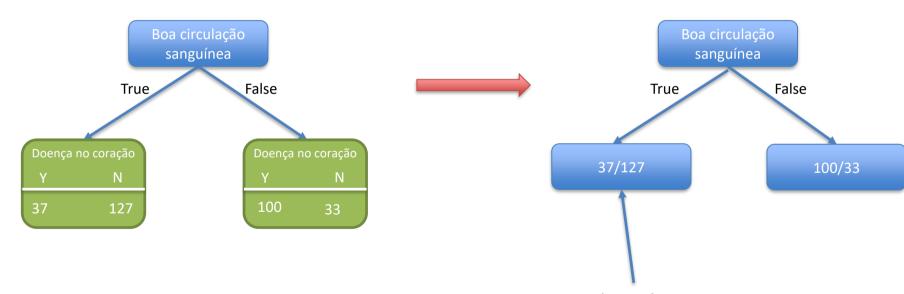
$$Gini = 0.381$$

Das métricas, conseguimos observar que Boa circulação sanguínea possui o menor valor de Gini, isto é, é a feature que melhor separa os pacientes entre aqueles que possuem doença cardíaca e aqueles que não possuem.

Portanto, ela sera usada como nó raiz:



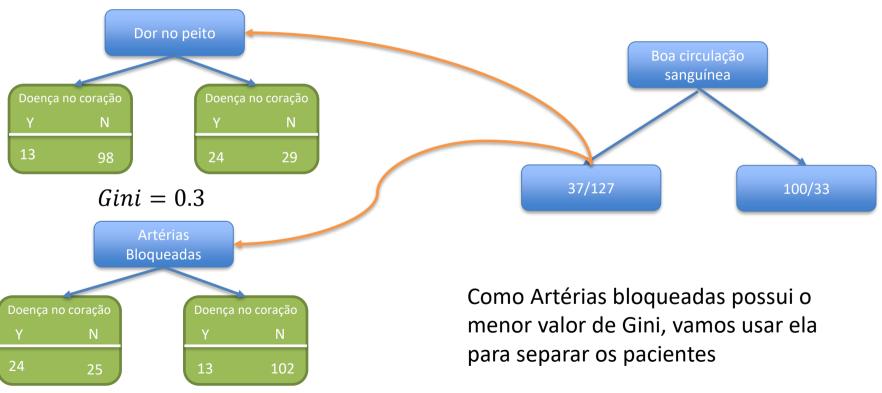
Importante notar que os nós folhas de Boa circulação sanguínea agora se comportarão como nós da árvore. Assim, temos que:



E agora precisamos descobrir como Dor no peito e Artérias bloqueadas separam esse nó.

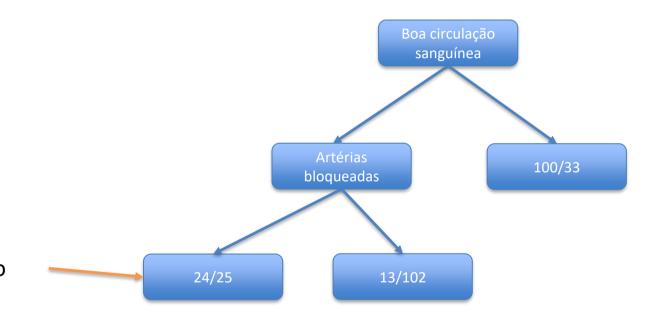
Gini = 0.29

Da mesma forma que fizemos antes, separamos os pacientes baseados em Dor no peito e Artérias bloqueadas e calculamos o valor da impureza



Esta é a árvore que temos até agora:

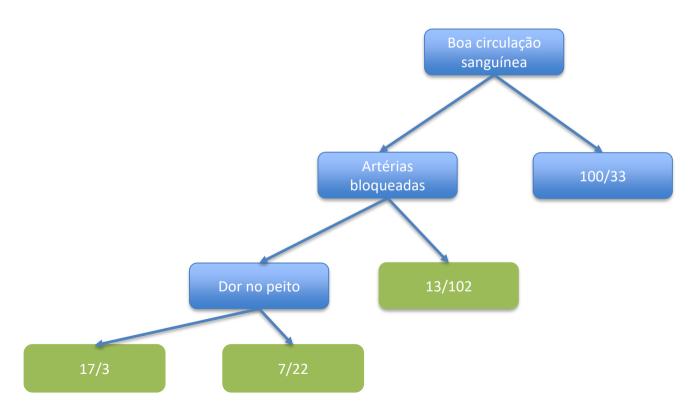
Tudo que restou é a feature Dor no peito, então vamos ver quão bem ela separa essas amostras.



A separação forneceu bons resultados.

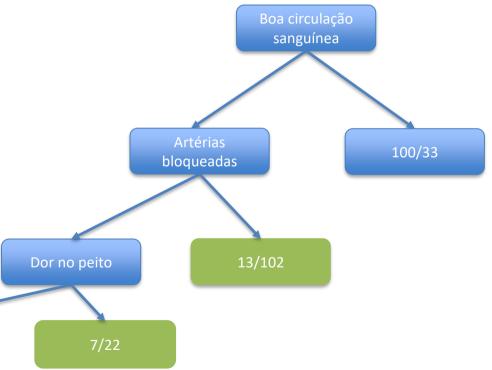


A separação forneceu bons resultados.

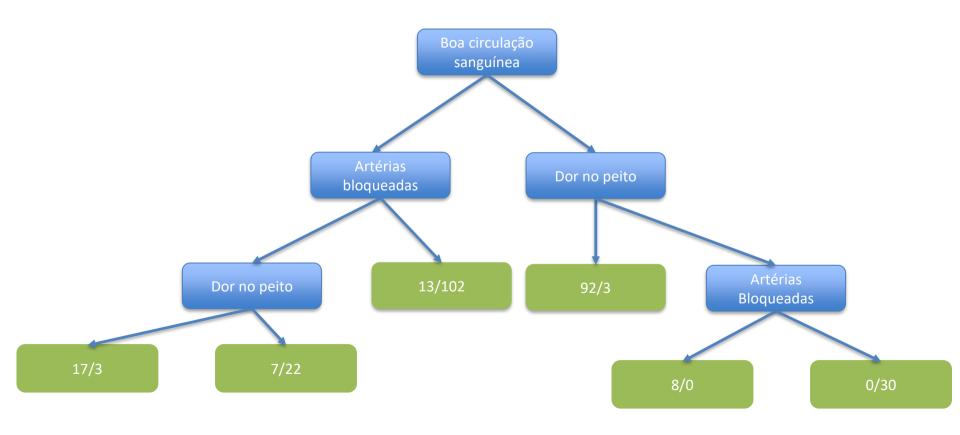


Agora, precisamos trabalhar no lado direito da árvore. Para isso, só repetimos os passos vistos até aqui:

- 1. Calcule todos os Gini scores
- Se o nó por si só possui o menor valor de Gini, não há razão para separar os dados. Assim, ele se torna um nó folha
- Caso contrário, separe os dados baseado no menor valor de Gini



#### E obteremos essa árvore



Uma importante etapa nas árvores de decisão é o ajuste nos hiperparâmetros.

Antes, porém, é importante fazer uma distinção entre parâmetros e hiperparâmetros:

- **1. Parâmetros**: são ajustados em tempo de execução do modelo, mais especificamente na etapa de treino.
- 2. Hiperparâmetros: são ajustados antes da etapa de treino.

  Obviamente, se não valor for selecionado, os valores padrões serão usados.

Aqui, vamos focar em encontrar os melhores hiperparametros.

O primeiro hiperparâmetros que vamos entender é o *max\_depth*, que define a profundidade de uma árvore. Por padrão, não há limite para *max\_depth*, então podem existir milhões de splits numa árvore, resultando em overfitting. Limitando *max\_depth* a pequenos números, a variância é reduzida e o modelo generaliza melhor para novos dados.

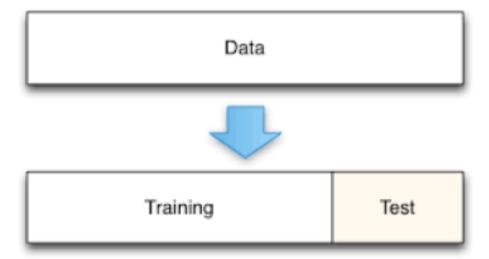
O segundo hiperparâmetro é o *min\_samples\_leaf*, que provê uma restrição aumentando o número de amostras que uma folha pode ter. Quando não há, restrição, *min\_samples\_leaf=1*, o que significa que os nós folhas podem conter apenas uma amostra (propenso a overfitting). Quando aumentamos *min\_samples\_leaf*, reduzimos variância.

Existem vários outros hiperparâmetros a serem analisados e a documentação da scikit-learn provê detalhes de cada um deles.



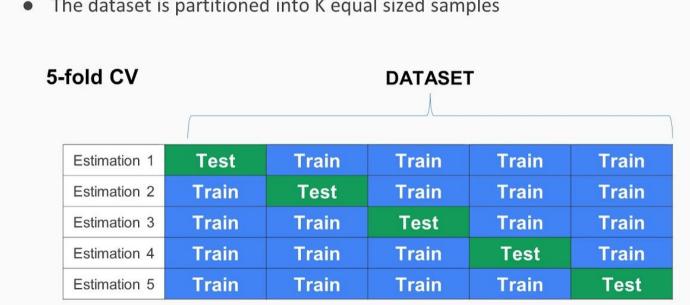
# Formas de Validação

Holdout





The dataset is partitioned into K equal sized samples





**KNN** 

Imagine que você esteja tentando predizer qual meu filme favorito. Se você não sabe mais nada a meu respeito, uma abordagem seria perguntar o filme favorito das pessoas que convivem comigo.

Agora imagine que você possua mais informações sobre mim: quais serviçoes de streaming eu assisto, o tipo de filme que mais gosto, meu diretor e ator favoritos e assim por diante.

Na medida em que meu comportamento é influenciado por essas coisas, olhar apenas para os amigos mais chegados dentro todos os que convivem comigo torna-se um preditor melhor do meu filme favorito.

Esta é a ideia por trás do KNN

### KNN requer apenas duas coisas para executar:

- 1. Alguma noção de distância
- Uma suposição de que pontos próximos uns aos outros são similares

Vamos entender o algoritmo em mais detalhes:

# KNN possui três características importantes:

- 1. Aprendizado baseado em exemplos:
  - 1. Todas as instâncias de treino são usadas para se fazer uma predição
- 2. Aprendizado preguiçoso:
  - Não existe aprendizado do modelo e todo trabalho acontece no tempo de predição
- 3. Não paramétrico:
  - 1. O KNN não faz suposições sobre o problema a ser resolvido

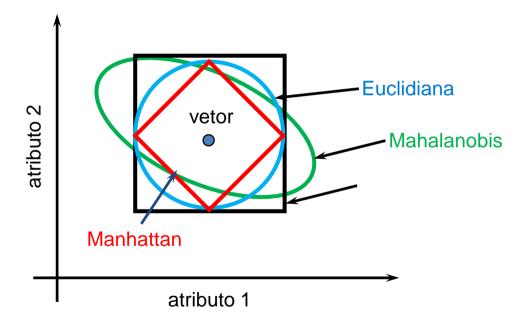
- Os exemplos correspondem a pontos no espaço n-dimensional;
- Em geral, os vizinhos são definidos em função de uma medida de distância. Podemos usar a distância Euclidiana, Manhattan ou Mahalanobis, pra citar algumas
- As distâncias possuem a seguinte formulação matemática:

$$d(x,y) = \sqrt{\sum_{i=1}^{n} (x_i - y_i)^2} \qquad d(x,y) = \sum_{i=1}^{n} |x_i - y_i| \qquad d(x,y) = \sqrt{(x-y)^T S^{-1}(x-y)}$$

Manhattan

**Mahalanobis** 

Para um espaço de duas características, elas podem ser interpretadas da seguinte maneira:



#	a1	a2	Classe
1	0.5	1	2
2	2.9	1.9	2
3	1.2	3.1	2
4	8.0	4.7	2
5	2.7	5.4	2
6	8.1	4.7	1
7	8.3	6.6	1
8	6.3	6.7	1
9	8	9.1	1
10	5.4	8.4 1	
11	5	7 ?	

$$d_E(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \sqrt{\sum_{i=1}^{n} (x_i - y_i)^2}$$

$$d_E(\#1, \#11) = \sqrt{(0.5 - 5)^2 + (1 - 7)^2}$$

$$d_E(\#1, \#11) = \sqrt{(-4.5)^2 + (-6)^2}$$

$$d_E(\#1, \#11) = \sqrt{20.25 + 36}$$

$$d_E(\#1, \#11) = \sqrt{56.25}$$

$$d_E(\#1, \#11) = 7.5$$

 Determine a distância de #11 para todas as demais amostras

#	a1	a2	Classe	
1	0.5	1	2	$\frac{n}{2}$
2	2.9	1.9	2	$d_E(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \sqrt{\sum_{i=1}^{n} (x_i - y_i)^2}$
3	1.2	3.1	2	<b>V</b> <i>i</i> =1
4	8.0	4.7	2	
5	2.7	5.4	2	$d_E(\#2,\#11) = \sqrt{(2.9-5)^2 + (1.9-1)^2}$
6	8.1	4.7	1	- · · · · · · · · · · · · · · · · · · ·
7	8.3	6.6	1	$d_E(\#2,\#11) = \sqrt{(-2.1)^2 + (-5.1)^2}$
8	6.3	6.7	1	_ , , , , , , , , , , , , , , , , , , ,
9	8	9.1	1	$d_E(\#2,\#11) = \sqrt{4.41 + 26.1}$
10	5.4	8.4	1	
11	5	7	?	$d_E(\#2,\#11) = \sqrt{30.51}$
	1	ı	1	$d_E(\#2,\#11) = 5.5$

#	a1	a2	Classe
1	0.5	1	2
2	2.9	1.9	2
3	1.2	3.1	2
4	0.8	4.7	2
5	2.7	5.4	2
6	8.1	4.7	1
7	8.3	6.6	1
8	6.3	6.7	1
9	8	9.1	1
10	5.4	8.4	1
11	5	7	?

$$d_E(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \sqrt{\sum_{i=1}^{n} (x_i - y_i)^2}$$

$$d_E(\#3,\#11) = 5.4$$

#	a1	a2	Classe
1	0.5	1	2
2	2.9	1.9	2
3	1.2	3.1	2
4	0.8	4.7	2
5	2.7	5.4	2
6	8.1	4.7	1
7	8.3	6.6	1
8	6.3	6.7	1
9	8	9.1	1
10	5.4	8.4	1
11	5	7	?

$$d_E(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \sqrt{\sum_{i=1}^n (x_i - y_i)^2}$$

$$d_E(\#4,\#11) = 4.7$$

#	a1	a2	Classe
1	0.5	1	2
2	2.9	1.9	2
3	1.2	3.1	2
4	0.8	4.7 2	
5	2.7	5.4	2
6	8.1	4.7	1
7	8.3	6.6	1
8	6.3	6.7	1
9	8	9.1	1
10	5.4	8.4	1
11	5	7	?

$$d_E(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \sqrt{\sum_{i=1}^{n} (x_i - y_i)^2}$$

$$d_E(\#5,\#11) = 2.8$$

#	a1	a2	Classe
1	0.5	1	2
2	2.9	1.9	2
3	1.2	3.1	2
4	0.8	4.7	2
5	2.7	5.4	2
6	8.1	4.7	1
7	8.3	6.6	1
8	6.3	6.7	1
9	8	9.1	1
10	5.4	8.4	1
11	5	7	?

$$d_E(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \sqrt{\sum_{i=1}^{n} (x_i - y_i)^2}$$

$$d_E(\#6,\#11) = 3.8$$

#	a1	a2	Classe
1	0.5	1	2
2	2.9	1.9	2
3	1.2	3.1	2
4	8.0	4.7	2
5	2.7	5.4	2
6	8.1	4.7	1
7	8.3	6.6	1
8	6.3	6.7	1
9	8	9.1	1
10	5.4	8.4	1
11	5	7	?

$$d_E(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \sqrt{\sum_{i=1}^{n} (x_i - y_i)^2}$$

$$d_E(\# 7, \#11) = 3.3$$

#	a1	a2	Classe
1	0.5	1	2
2	2.9	1.9	2
3	1.2	3.1	2
4	0.8	4.7	2
5	2.7	5.4	2
6	8.1	4.7	1
7	8.3 6.6		1
8	6.3	6.7	1
9	8	9.1	1
10	5.4	8.4 1	
11	5	7	?

$$d_E(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \sqrt{\sum_{i=1}^{n} (x_i - y_i)^2}$$

$$d_E(\#8,\#11) = 1.3$$

#	a1	a2	Classe
1	0.5	1	2
2	2.9	1.9	2
3	1.2	3.1	2
4	8.0	4.7	2
5	2.7	5.4	2
6	8.1	4.7	1
7	8.3	6.6	1
8	6.3	6.7	1
9	8	9.1	1
10	5.4	8.4	1
11	5	7	?

$$d_E(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \sqrt{\sum_{i=1}^{n} (x_i - y_i)^2}$$

$$d_E(\#9,\#11) = 3.6$$

#	a1	a2	Classe
1	0.5	1	2
2	2.9	1.9	2
3	1.2	3.1	2
4	0.8	4.7	2
5	2.7	5.4	2
6	8.1	4.7	1
7	8.3	6.6	1
8	6.3	6.7	1
9	8	9.1	1
10	5.4	8.4	1
11	5	7	?

$$d_E(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \sqrt{\sum_{i=1}^{n} (x_i - y_i)^2}$$

$$d_E(\#10,\#11)=1.4$$

#	a1	a2	Classe	Distância para a instância #11
1	0.5	1	2	7.5
2	2.9	1.9	2	5.5
3	1.2	3.1	2	5.4
4	8.0	4.7	2	4.7
5	2.7	5.4	2	2.8
6	8.1	4.7	1	3.8
7	8.3	6.6	1	3.3
8	6.3	6.7	1	1.3
9	8	9.1	1	3.6
10	5.4	8.4	1	1.4
11	5	7	?	

#	a1	a2	Classe	Distância para a instância #11
1	0.5	1	2	7.5
2	2.9	1.9	2	5.5
3	1.2	3.1	2	5.4
4	8.0	4.7	2	4.7
5	2.7	5.4	2	2.8
6	8.1	4.7	1	3.8
7	8.3	6.6	1	3.3
8	6.3	6.7	1	1.3
9	8	9.1	1	3.6
10	5.4	8.4	1	1.4
11	5	7	?	

- Determine a distância de #11 para todas as demais amostras
- 2. Escolha um valor de k para determinar a classe de #11



#	a1	a2	Classe	Distância para a instância #11
1	0.5	1	2	7.5
2	2.9	1.9	2	5.5
3	1.2	3.1	2	5.4
4	8.0	4.7	2	4.7
5	2.7	5.4	2	2.8
6	8.1	4.7	1	3.8
7	8.3	6.6	1	3.3
8	6.3	6.7	1	1.3
9	8	9.1	1	3.6
10	5.4	8.4	1	1.4
11	5	7	?	

Para k=1, temos o 1-NN e a classe da instância #11 seria 1.

- Determine a distância de #11 para todas as demais amostras
- 2. Escolha um valor de k para determinar a classe de #11



#	a1	a2	Classe	Distância para a instância #11
1	0.5	1	2	7.5
2	2.9	1.9	2	5.5
3	1.2	3.1	2	5.4
4	8.0	4.7	2	4.7
5	2.7	5.4	2	2.8
6	8.1	4.7	1	3.8
7	8.3	6.6	1	3.3
8	6.3	6.7	1	1.3
9	8	9.1	1	3.6
10	5.4	8.4	1	1.4
11	5	7	?	

Para k=2, temos o 2-NN e a classe da instância #11 seria?

- Determine a distância de #11 para todas as demais amostras
- 2. Escolha um valor de k para determinar a classe de #11

#	a1	a2	Classe	Distância para a instância #11
1	0.5	1	2	7.5
2	2.9	1.9	2	5.5
3	1.2	3.1	2	5.4
4	8.0	4.7	2	4.7
5	2.7	5.4	2	2.8
6	8.1	4.7	1	3.8
7	8.3	6.6	1	3.3
8	6.3	6.7	1	1.3
9	8	9.1	1	3.6
10	5.4	8.4	1	1.4
11	5	7	?	

Para k=2, temos o 2-NN e a classe da instância #11 seria 1

- Determine a distância de #11 para todas as demais amostras
- 2. Escolha um valor de k para determinar a classe de #11

#	a1	a2	Classe	Distância para a instância #11
1	0.5	1	2	7.5
2	2.9	1.9	2	5.5
3	1.2	3.1	2	5.4
4	8.0	4.7	2	4.7
5	2.7	5.4	2	2.8
6	8.1	4.7	1	3.8
7	8.3	6.6	1	3.3
8	6.3	6.7	1	1.3
9	8	9.1	1	3.6
10	5.4	8.4	1	1.4
11	5	7	?	

Para k=3, temos o 3-NN e a classe da instância #11 seria?

- Determine a distância de #11 para todas as demais amostras
- 2. Escolha um valor de k para determinar a classe de #11

#	a1	a2	Classe	Distância para a instância #11
1	0.5	1	2	7.5
2	2.9	1.9	2	5.5
3	1.2	3.1	2	5.4
4	8.0	4.7	2	4.7
5	2.7	5.4	2	2.8
6	8.1	4.7	1	3.8
7	8.3	6.6	1	3.3
8	6.3	6.7	1	1.3
9	8	9.1	1	3.6
10	5.4	8.4	1	1.4
11	5	7	?	

Para k=3, temos o 3-NN e a classe da instância #11 seria 1, pois temos 2 vizinho da classe 1 e apenas 1 vizinho da classe 2.

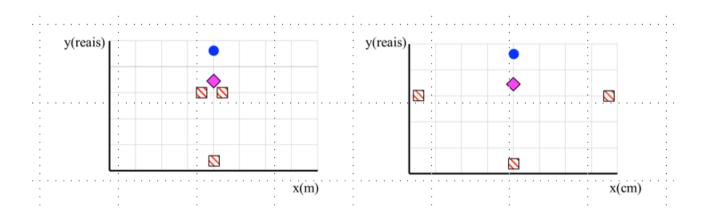
- Determine a distância de #11 para todas as demais amostras
- 2. Escolha um valor de k para determinar a classe de #11

#	a1	a2	Classe	Distância para a instância #11
1	0.5	1	2	7.5
2	2.9	1.9	2	5.5
3	1.2	3.1	2	5.4
4	8.0	4.7	2	4.7
5	2.7	5.4	2	2.8
6	8.1	4.7	1	3.8
7	8.3	6.6	1	3.3
8	6.3	6.7	1	1.3
9	8	9.1	1	3.6
10	5.4	8.4	1	1.4
11	5	7	?	

Para k=4, temos o 4-NN e a classe da instância #11 seria?

- Determine a distância de #11 para todas as demais amostras
- 2. Escolha um valor de k para determinar a classe de #11

Um dos problemas relacionados ao KNN é a sensibilidade em relação à escala. Observe o exemplo abaixo:

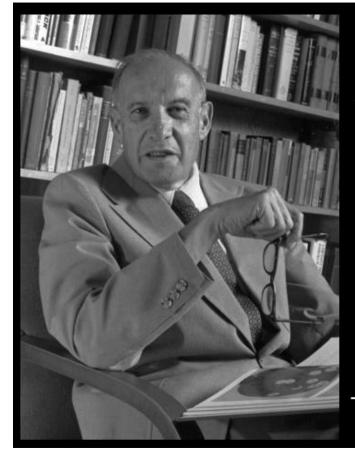


Como podemos resolver?

Em geral, normalização dos dados resolvem o problema (StandardScaler, MinMaxScaler)



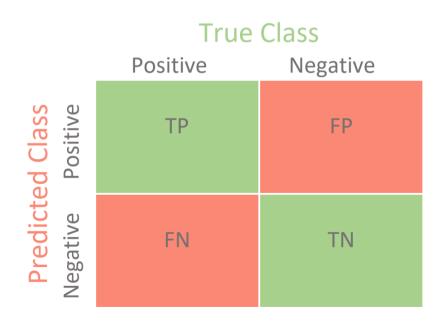
## Métricas de Avaliação



You can't manage what you can't measure

-Peter Drucker

Precisamos de maneiras de mensurar a qualidade de predição de nosso algoritmo. Em classificação, as métricas mais comuns, e as mais simples, são **Acurácia**, **Precision**, **Recall e F1 Score**. Elas são obtidas a partir da Matriz de Confusão, apresentada abaixo:



A acurácia é dada pela seguinte função:

$$acc = \frac{tp + tn}{(tp + tn + fp + fn)}$$

Precision (acurácia das predições positivas) pode ser calculado da seguinte maneira:

$$P = \frac{tp}{(tp + fp)}$$

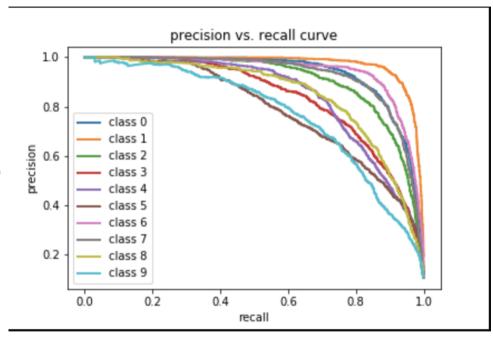
Já o Recall (taxa de amostras positivas corretamente encontradas pelo classificador) é calculado da seguinte forma:

$$R = \frac{tp}{(tp + fn)}$$

**Precision** e **Recall** tendem a ser inversamente proporcionais, como apresentado no gráfico ao lado.

Para minimizar esse problema, existe a métrica **F1-Score**, que leva em consideração tanto Precision quanto Recall.

$$F1 = \frac{2PR}{P+R}$$



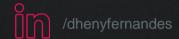


## Implementação



## Obrigado!

profdheny.fernandes@fiap.com.br





Copyright © 2022 | Professor Dheny R. Fernandes

Todos os direitos reservados. Reprodução ou divulgação total ou parcial deste documento, é expressamente
proibido sem consentimento formal, por escrito, do professor/autor.

