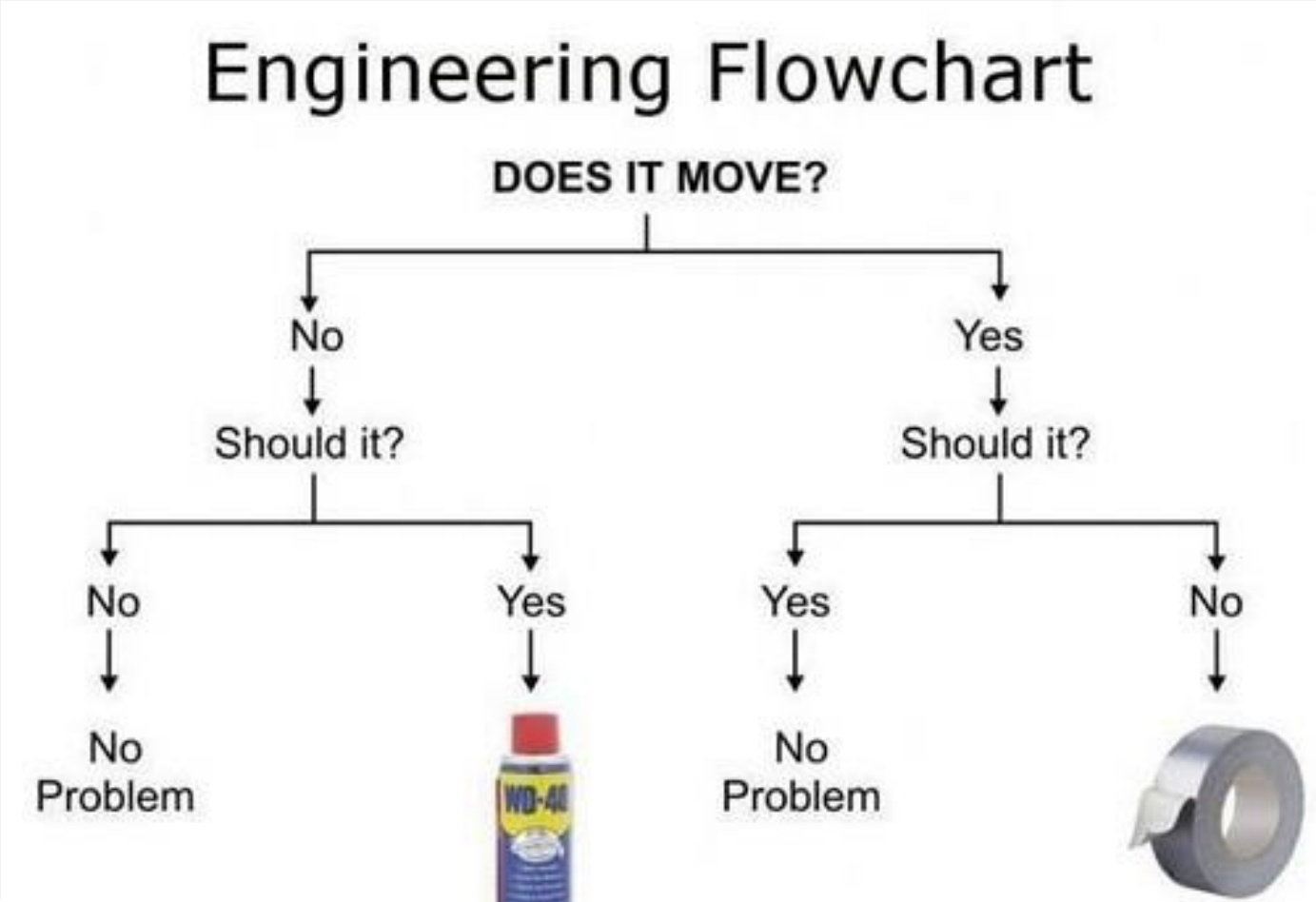
TÉCNICO LISBOA

Arvores de Decisão



TÉCNICO LISBOA

Índice (cont)

- **Aprendizagem com árvores de decisão**
  - Conceitos básicos
  - Expressividade das árvores de decisão
  - Indução de árvores de decisão a partir de exemplos
  - Escolha de testes atributo
  - Avaliação da performance do algoritmo de aprendizagem
  - Ruído e overfitting
  - Expansão da aplicabilidade das árvores de decisão

Conceitos básicos

- Uma árvore de decisão é um exemplo muito simples (e de grande sucesso) de um algoritmo de aprendizagem que se enquadra na área de aprendizagem supervisionada

TÉCNICO LISBOA

Conceitos básicos

- Uma árvore de decisão recebe como **input** um objecto ou situação descritos **por um conjunto de atributos** e devolve uma "decisão" (o valor de output para o input recebido)
  - Os atributos de input podem ser discretos ou contínuos
  - O valor de output também pode ser discreto ou contínuo
  - Vamos tratar casos de classificação Booleana em que cada exemplo é classificado como positivo ou negativo
  - **Funciona como elemento de desempenho (responsável por seleccionar acções do agente)**

Exemplo

Problema: **decidir se esperamos (esperamos?) por uma mesa num restaurante....**

Conceitos Básicos (exemplo)

Problema: decidir se esperamos (esperamos?) por uma mesa num restaurante, com base nos seguintes atributos:

1. Alternativa: existe um restaurante alternativo próximo?
2. Bar: existe uma área de bar confortável para esperar?
3. Sexta/Sábado: hoje é Sexta ou Sábado?
4. Fome: temos fome?
5. Clientes: número de pessoas no restaurante (Nenhum, Algum, Cheio)
6. Preço: gama de preços ($, $$, $$$)
7. Chuva: está a chover lá fora?
8. Reserva: fizemos uma reserva?
9. Tipo de restaurante: Francês, Italiano, Tailandês, Burger, …
10. Estimativa do tempo de espera: 0-10, 10-30, 30-60, >60

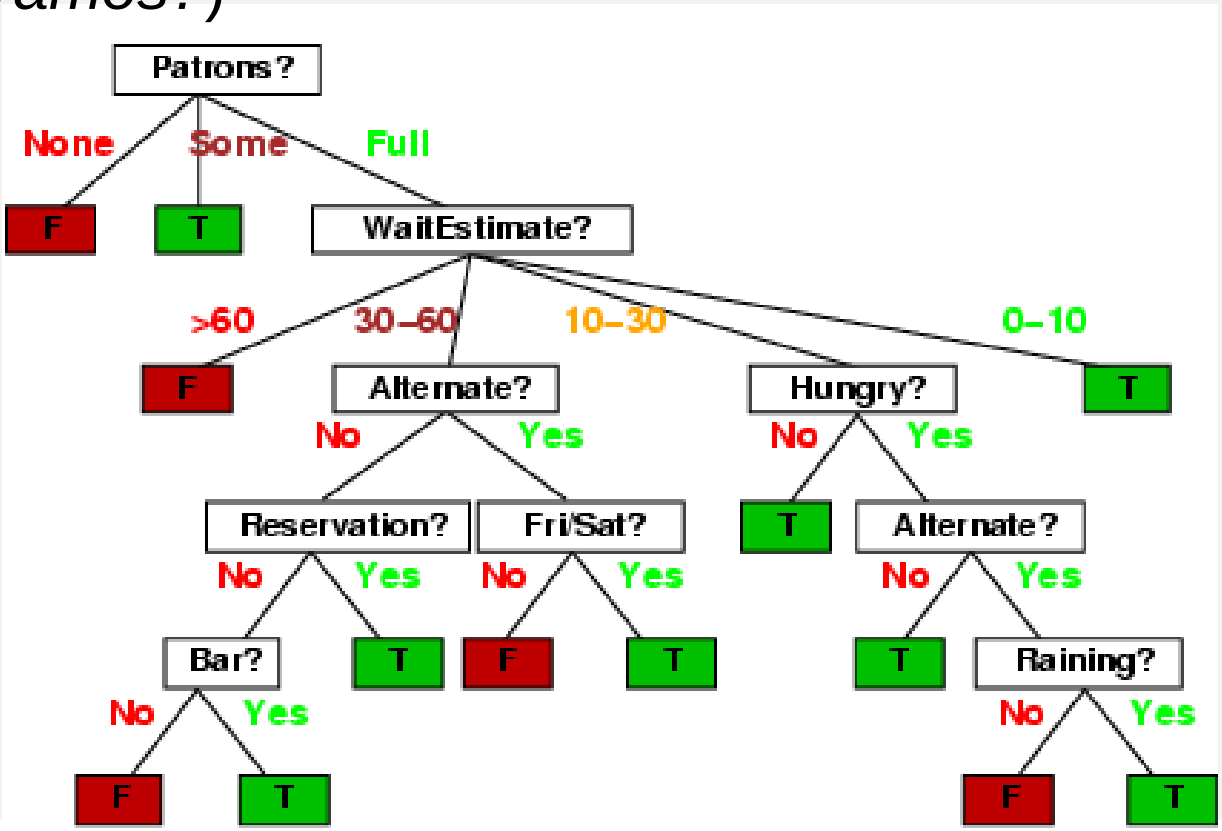
TÉCNICO LISBOA

Conceitos básicos

- Uma árvore de decisão chega a uma decisão executando uma sequência de testes.
  - Cada nó da árvore corresponde ao teste de um atributo;
  - Cada ramo está etiquetado com possíveis valores do atributo testado;
  - Cada folha representa o valor a ser devolvido se essa folha for atingida.

Conceitos básicos (exemplo)

- Árvore para decidir se esperamos ou não (função *esperamos?*)



Expressividade de árvores de decisão

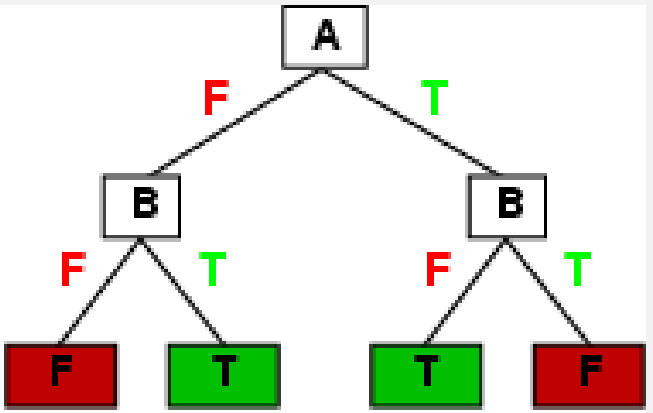
- Qualquer árvore de decisão para o predicado objectivo **esperamos?** pode ser vista como a seguinte frase:
  - $\forall_s$ esperamos?(s) $\Leftrightarrow$ (P_1(s) $\vee$ P_2(s) $\vee$ ... $\vee$ P_n(s))

    Cada P_i(s) é uma conjunção de testes correspondente a um caminho da raiz até uma folha com valor T

Expressividade de árvores de decisão

- Na verdade, qualquer função Booleana pode ser representada como uma árvore de decisão
  - Cada linha da tabela de verdade é um caminho na árvore
    - Este processo leva a uma árvore de decisão de dimensão exponencial

A	B	A xor B
F	F	F
F	T	T
T	F	T
T	T	F



  - As árvores de decisão *podem* representar funções de modo muito mais compacto
    - No pior caso têm na mesma dimensão exponencial

Expressividade de árvores de decisão (espaços de hipóteses)

- As árvores de decisão são boas para representar algumas funções e más para outras
  - Por exemplo, para representar as funções AND e OR é possível podar a árvore mas para representar as funções PARIDADE (verdadeiro *sse* nº de entradas verdadeiras é par) e MAIORIA (verdadeiro *sse* maioria de entradas são verdadeiras) não é
- Será que existe alguma representação que é boa para todas as funções? Não!
  - Porque qualquer que seja a representação esta será sempre exponencial (ver slide seguinte) para algumas funções

Expressividade de árvores de decisão (espaços de hipóteses)

- Considere-se o conjunto de todas as funções Booleanas com n atributos Booleanos
  - O número de possíveis inputs corresponde ao número de diferentes entradas da tabela de verdade (2^n)
  - O número de funções distintas (output) para n atributos é 2^{2^n}

    Exº para n=2

Input	
X	**Y**
T	T
T	F
F	T
F	F

Output															
T	T	T	T	T	T	T	T	F	F	F	F	F	F	F	F
T	T	T	T	F	F	F	F	T	T	T	T	F	F	F	F
T	T	F	F	T	T	F	F	T	T	F	F	T	T	F	F
T	F	T	F	T	F	T	F	T	F	T	F	T	F	T	F

- E para 6 atributos Booleanos existem 18,446,744,073,709,551,616 árvores!

Expressividade de árvores de decisão (espaços de hipóteses)

Quantas hipóteses puramente conjuntivas (e.g., *Hungry* $\wedge$ $\neg$*Rain*)?

- Cada atributo pode aparecer positivo ou negativo ou não aparecer
  $\Rightarrow 3^n$ hipóteses conjuntivas distintas
- Maior expressividade do espaço de estados
  - Aumenta a possibilidade da função alvo ser expressa
  - Aumenta o número de hipóteses consistentes com o conjunto de treino
    $\Rightarrow$ pode dar origem a previsões piores

TÉCNICO LISBOA

Como aprender árvores de decisão?

Indução de árvores de decisão com base em exemplos

- **Conjunto de treino**:
  - exemplos descritos por valores de atributos (Booleanos, discretos, contínuos)
  - a classificação de exemplos é positiva (T) ou negativa (F)
  - objectivo: aprender função objectivo
- E.g., conjunto de treino para o caso esperamos?

Example	Attributes										Target
	Alt	*Bar*	*Fri*	*Hun*	*Pat*	*Price*	*Rain*	*Res*	*Type*	*Est*	*Wait*
X_1	T	F	F	T	Some	$$$	F	T	French	0–10	T
X_2	T	F	F	T	Full	$	F	F	Thai	30–60	F
X_3	F	T	F	F	Some	$	F	F	Burger	0–10	T
X_4	T	F	T	T	Full	$	F	F	Thai	10–30	T
X_5	T	F	T	F	Full	$$$	F	T	French	>60	F
X_6	F	T	F	T	Some	$$	T	T	Italian	0–10	T
X_7	F	T	F	F	None	$	T	F	Burger	0–10	F
X_8	F	F	F	T	Some	$$	T	T	Thai	0–10	T
X_9	F	T	T	F	Full	$	T	F	Burger	>60	F
X_{10}	T	T	T	T	Full	$$$	F	T	Italian	10–30	F
X_{11}	F	F	F	F	None	$	F	F	Thai	0–10	F
X_{12}	T	T	T	T	Full	$	F	F	Burger	30–60	T

Indução de árvores de decisão com base em exemplos

- Pode ser extraída uma árvore de decisão consistente para qualquer conjunto de treino em que cada exemplo corresponde a uma caminho até uma folha, onde o caminho testa um atributo de cada vez e segue os valores do exemplo e cada folha tem a classificação do exemplo (a não ser que *f* seja não–determinística)
  - não há dúvida que seguindo este processo a árvore atribui os resultados correctos aos exemplos dados
  - mas provavelmente não será possível generalizá-la para novos exemplos (apenas memoriza os exemplos)
- Preferência dada a árvores de decisão compactas

TÉCNICO LISBOA

Indução de árvores de decisão com base em exemplos

- Objectivo: encontrar uma árvore tão pequena quanto possível consistente com os exemplos de treino
- Ideia: (recursivamente) escolher o atributo "mais significativo" como raiz da (sub-)árvore
  1. Se não restam exemplos, então tal situação nunca foi observada e devolvemos um valor por omissão calculado a partir da classificação maioritária do nó pai.
  2. Se os exemplos são todos positivos ou todos negativos podemos terminar (podemos logo dizer *sim* ou *não*)
  3. Se não restam atributos e ainda temos exemplos positivos e negativos então temos um problema… $\Rightarrow$ ruído nos dados (tipicamente devolve-se valor em maioria)
  4. Se há exemplos positivos e negativos escolher o melhor atributo para os separar

Algoritmo DTL *(Decision Tree Learning)*

Função DTL (*exemplos,atributos,exp_pais*) devolve árvore de decisão

1. se *exemplos* vazio então devolve *VALOR-MAIORIA(exp_pais)*
2. senão se todos os *exemplos* têm a mesma *classificação* então devolve *classificação*
3. senão se *atributos* está vazio então devolve *VALOR-MAIORIA(exemplos)*
4. senão

    $A \leftarrow \underset{a \in \text{atributos}}{\text{argmax}}$ IMPORTÂNCIA *(a, exemplos)*

    árvore ← nova árvore com *a* raiz teste A

    para cada valor v_i de *A*

        exs ← {e: e ∈ *exemplos* e e.A = v_i }

        sub-árvore ←DTL(*exs ,atributos - A,exemplos)*

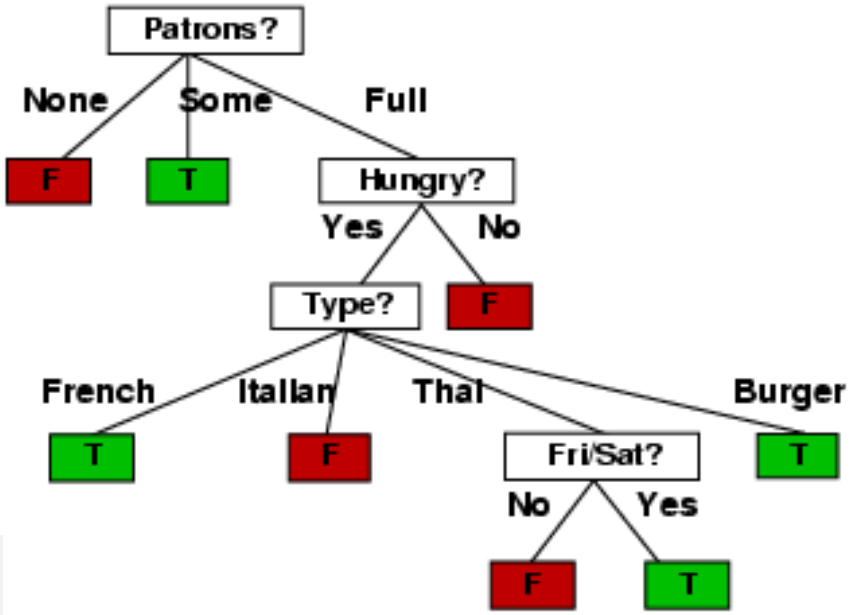
        adiciona um ramo à *árvore* com etiqueta *(A =* v_i *)* e *sub-árvore*

    devolve *árvore*

Indução de árvores de decisão com base em exemplos

- Árvore de decisão aprendida a partir dos 12 exemplos:

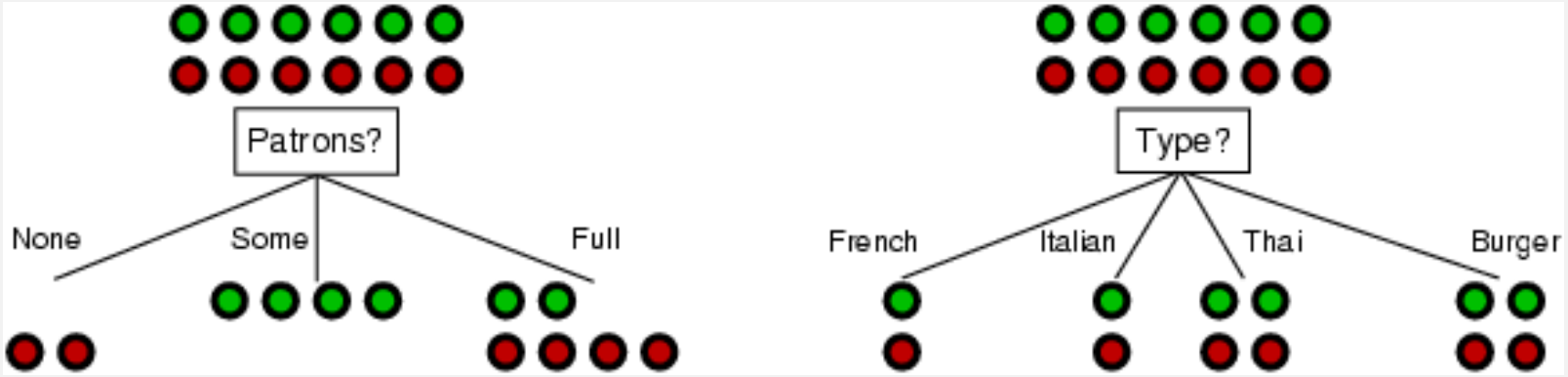
Example	Attributes										Target
	Alt	*Bar*	*Fri*	*Hun*	*Pat*	*Price*	*Rain*	*Res*	*Type*	*Est*	*Wait*
X_1	T	F	F	T	Some	$$$	F	T	French	0–10	T
X_2	T	F	F	T	Full	$	F	F	Thai	30–60	F
X_3	F	T	F	F	Some	$	F	F	Burger	0–10	T
X_4	T	F	T	T	Full	$	F	F	Thai	10–30	T
X_5	T	F	T	F	Full	$$$	F	T	French	>60	F
X_6	F	T	F	T	Some	$$	T	T	Italian	0–10	T
X_7	F	T	F	F	None	$	T	F	Burger	0–10	F
X_8	F	F	F	T	Some	$$	T	T	Thai	0–10	T
X_9	F	T	T	F	Full	$	T	F	Burger	>60	F
X_{10}	T	T	T	T	Full	$$$	F	T	Italian	10–30	F
X_{11}	F	F	F	F	None	$	F	F	Thai	0–10	F
X_{12}	T	T	T	T	Full	$	F	F	Burger	30–60	T



- Substancialmente mais compacta do que a árvore inicial

Escolha de atributo

- IMPORTÂNCIA no algoritmo DTL
- Ideia: um bom atributo separa exemplos em subconjuntos que são (idealmente) “todos positivos” ou “todos negativos”



- *Clientes vs. Tipo? Clientes* é melhor escolha!

TÉCNICO LISBOA

Escolha de atributo

- Esta estratégia é a usada para implementar `IMPORTÂNCIA` no algoritmo DTL
- E como decidir se um atributo é bom ou não?
  - Uma boa medida seria medir a quantidade de informação dada pelo atributo
  - Em teoria de informação mede-se a quantidade de informação em ***bits*** sendo que a quantidade de informação depende do conhecimento pré-existente
    - E.g. um bit de informação é suficiente para responder a uma pergunta do tipo sim/não, sobre a qual não temos nenhuma ideia, como por exemplo o lançamento de uma moeda ao ar

TÉCNICO LISBOA

Teoria da Informação

- Entropia....

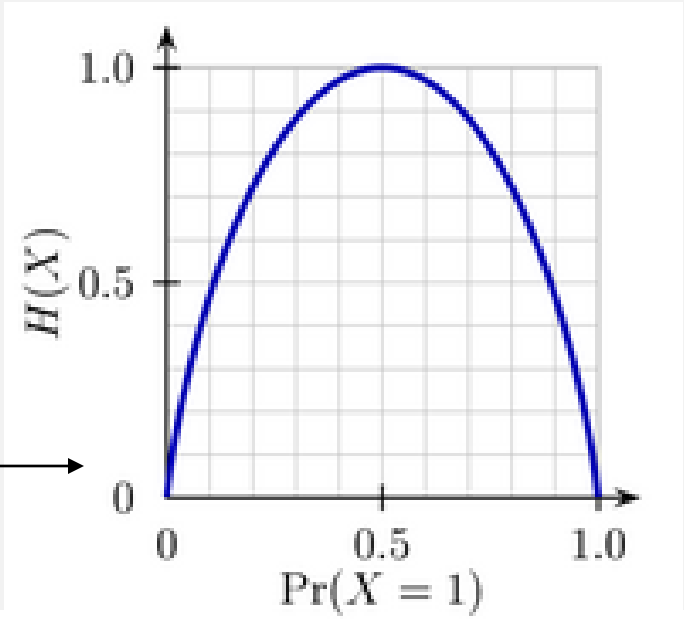
Teoria da informação

- Entropia mede a quantidade de incerteza numa distribuição de probabilidade:

Considere-se o atirar ao ar uma moeda "tendenciosa". Se atirarmos ao ar a moeda muitas vezes, a frequência para *cara* é p e consequentemente a frequência para *coroa* é 1-p. (Para uma moeda normal p=0.5)

A incerteza de um valor de output é dado pela entropia.

O valor da entropia é 0 se p=0 ou p=1 e é máximo (=1) se p=0.5.



TÉCNICO LISBOA

Teoria da informação

- Se existem mais do que dois estados s=1,2,..n (por exº se temos um dado) vem:

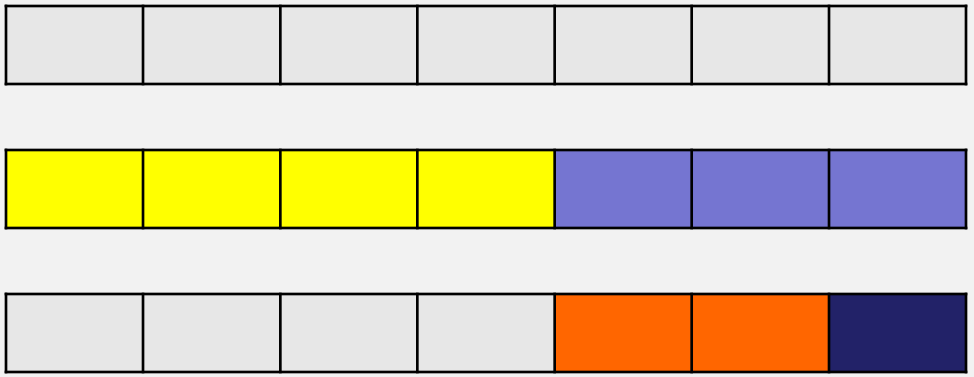
$$\begin{aligned} Entropy(p) = & -p(s=1)\log[p(s=1)] \\ & - p(s=2)\log[p(s=2)] \\ & \ldots \\ & - p(s=n)\log[p(s=n)] \end{aligned}$$

$$\sum_{s=1}^{n} p(s) = 1$$

Porquê log?

- Considere-se um conjunto de S elementos
  - $\log_2(|S|)$ corresponde ao número **mínimo** de vezes que temos de **dividir um conjunto ao meio** para garantidamente identificar **um elemento**
    - $\log_2(1) = 0$,
    - $\log_2(2) = 1$,
    - $\log_2(3) = 2$,
    - $\log_2(4) = 2$,
    - $\log_2(5) = 3$,
    - $\log_2(6) = 3$,
    - $\log_2(7) = 3$,
    - $\log_2(8) = 3$, …

Exemplo para S=7



  - Podemos considerar que o número de divisões corresponde ao número de questões que vamos ter de responder (testes da árvore)

TÉCNICO LISBOA

Escolha de atributo

- Considere-se agora um conjunto de P+N elementos, sendo P/N os elementos classificados positivamente/negativamente, respectivamente. Temos que:
  - $\log_2(|P|)$ questões no caso do elemento pertencer a P
  - $\log_2(|N|)$ questões no caso do elemento pertencer a N
  - Número de questões: $-P_P \log_2(P_P) - P_N \log_2(P_N)$ em que
    - $P_{P/N}$ é a probabilidade do elemento pertencer a P/N, respectivamente (ou seja, por exemplo, é $P_P = P/(P+N)$)
  - **$I(P,N) = -P_P \log_2(P_P) - P_N \log_2(P_N)$**

TÉCNICO LISBOA

Escolha de atributo

- **$I(P,N) = -P_P \log_2(P_P) - P_N \log_2(P_N)$**
- Para o caso do restaurante: P=N=6

$$I(\frac{6}{12},\frac{6}{12}) = -\frac{6}{12}\log_2\frac{6}{12} - \frac{6}{12}\log_2\frac{6}{12} = 1$$

TÉCNICO LISBOA

Teoria da informação

- O que ganhamos em termos de informação se soubermos o valor de determinado atributo?

- Resposta:

  incerteza antes de escolher o atributo
  menos incerteza depois de o escolher

TÉCNICO LISBOA

Escolha de atributo

- Qualquer atributo *A* divide o conjunto de treino *E* em sub-conjuntos $E_1, \ldots, E_v$ de acordo com os valores para *A*, em que *A* tem v valores distintos
- Entropia depois da separação em função de A dada por:

$$resto(A) = \sum_{i=1}^{v} \frac{p_i + n_i}{p + n} I\left(\frac{p_i}{p_i + n_i}, \frac{n_i}{p_i + n_i}\right)$$

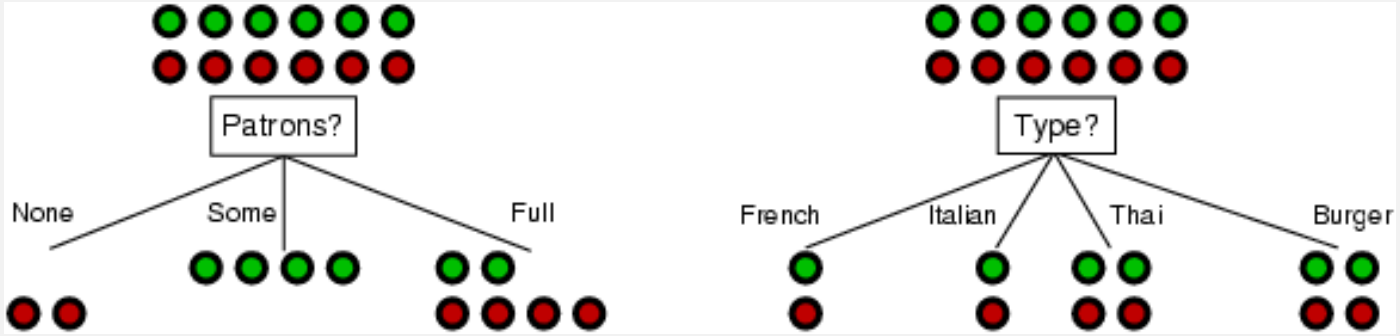
- Ganho de informação (GI) ou redução de entropia para o atributo A:

$$GI(A) = I\left(\frac{p}{p+n}, \frac{n}{p+n}\right) - resto(A)$$

- **Escolher o atributo com o maior GI**

Escolha de atributo

Para o conjunto de treino, $p = n = 6$, $I(6/12, 6/12) = 1$ bit



Considerar os atributos *Clientes* e *Tipo* (e todos os outros):

$$GI(Clientes) = 1 - [\frac{2}{12} I(0,1) + \frac{4}{12} I(1,0) + \frac{6}{12} I(\frac{2}{6}, \frac{4}{6})] = .0541 \text{ bits}$$

$$GI(Tipo) = 1 - [\frac{2}{12} I(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}) + \frac{2}{12} I(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}) + \frac{4}{12} I(\frac{2}{4}, \frac{2}{4}) + \frac{4}{12} I(\frac{2}{4}, \frac{2}{4})] = 0 \text{ bits}$$

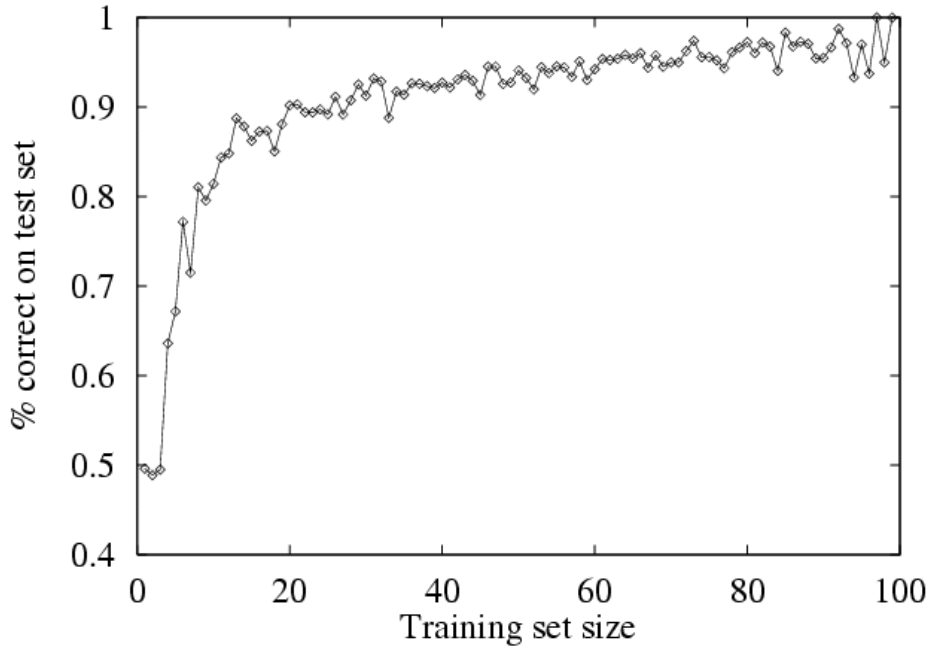
Clientes tem o GI mais elevado entre todos os atributos e portanto é escolhido pelo algoritmo DTL como raiz

Avaliando a performance do algoritmo de aprendizagem (medida de desempenho)

- Como é que sabemos se $h \approx f$?
  - Idealmente, verificando se a classificação prevista coincide com a classificação real para um conjunto de teste de exemplos
  - Na prática é adoptado um procedimento iterativo
    1. Obter um conjunto de exemplos
    2. Dividir o conjunto em 2 conjuntos disjuntos: conjunto de treino e conjunto de teste
    3. Aplicar o algoritmo de aprendizagem ao conjunto de treino, e obter uma hipótese *h*
    4. Medir a percentagem de exemplos do conjunto de teste correctamente classificados por *h*
    5. Repetir os passos 2-4 para diferentes conjuntos de treino de diferentes dimensões (obtidos aleatoriamente)

Avaliando a performance do algoritmo de aprendizagem (medida de desempenho)

Curva de aprendizagem = % $h \approx f$ no conjunto de teste em função da dimensão do conjunto de treino



TÉCNICO LISBOA

Ruído e Overfitting (Problemas com o DTL)

- Problema 1: se existem **dois ou mais exemplos com a mesma descrição** (em termos dos atributos), **mas com diferentes classificações**, o DTL não consegue encontrar uma árvore de decisão consistente com os dados
- Solução: fazer com que cada folha indique uma classificação por **maioria** para o seu conjunto de exemplos (no caso de ser necessário uma hipótese determinística) ou uma estimativa da **probabilidade** para cada classificação, usando frequências relativas

Ruído e Overfitting (Problemas com o DTL)

- Problema 2: é possível que, mesmo quando **falta informação vital**, o DTL seja capaz de encontrar uma árvore de decisão consistente com todos os exemplos. Isto acontece quando o algoritmo usa **atributos irrelevantes** (caso existam) para fazer distinções erradas entre os exemplos
  - Exemplo: Considere-se a experiência de lançar um dado, várias vezes, sendo a experiência caracterizada pelos seguintes parâmetros:
    - Dia: dia em que foi lançado o dado (2ª, 3ª, 4ª, 5ª)
    - Mês: Mês em que foi lançado o dado (Janeiro ou Fevereiro)
    - Cor: cor do dado (azul ou vermelho)
- O DTL vai encontrar uma hipótese exacta mas incorrecta! Pretendia-se apenas uma árvore com um único nó e com 1/6 associado a cada face do dado...

TÉCNICO LISBOA

Ruído e Overfitting (Problemas com o DTL)

- Problema 3: Quando o **conjunto de hipóteses** consistentes com os exemplos **é muito grande**, é possível que se encontrem **regularidades sem sentido** nos dados. A este problema chama-se ***overfitting*** e é um problema geral nos algoritmos de aprendizagem.
- Solução:
  - Podar a árvore de decisão (decision tree pruning)
  - Validação cruzada (cross validation)

Ruído e Overfitting (Problemas com o DTL)

- E em que consiste a poda da árvore de decisão?
  - Basicamente consiste em evitar a divisão em atributos que são irrelevantes

Ruído e Overfitting (Problemas com o DTL)

- E em que consiste a validação cruzada?
  - Pode ser aplicado a qualquer algoritmo de aprendizagem e pode ser combinado com outras técnicas ou até usado na construção da árvore de decisão
  - A ideia básica é estimar quão bem uma hipótese vai estimar dados não vistos
    - Assim, considerando k iterações, parte dos dados são postos de lado (1/k) e usados para testar a capacidade de previsão da hipótese induzida pelo resto dos dados.

TÉCNICO LISBOA

Alargando a aplicabilidade das árvores de decisão

- Problemas a ter em conta:
  - **Faltas de dados:** em muitos domínios, por vezes existem valores desconhecidos para os atributos, às vezes pode ser muito caro encontrar estes valores. Isto levanta dois problemas:
    - Dada uma árvore de decisão completa, como classificar um objecto do qual não se conhece algum valor dos atributos?
    - Como modificar a fórmula do ganho quando alguns exemplos têm valores desconhecidos para os atributos?
  - **Atributos com inúmeros valores:** nestes casos a medida usada para o ganho de informação dá uma indicação inapropriada da utilidade do atributo. Solução: usar o rácio do ganho.

Alargando a aplicabilidade das árvores de decisão

- Problemas a ter em conta (cont):
  - **Atributos com domínios contínuos ou contínuos mas ilimitados:** é o caso de pesos ou alturas. Nestes casos não tem sentido ter um número infinito de ramos, mas encontrar um ponto de divisão dos valores que represente um maior ganho. Há muitos algoritmos eficientes a tratar este problema, mas isto representa um dos maiores custos destas aplicações a problemas reais
  - **Classificações não discretas:** se estamos a tentar prever um valor numérico, tal como o preço de uma obra de arte, mais do que uma classificação discreta precisamos é de uma árvore de regressão *(regression tree)*. Esta árvore tem em cada folha uma função linear de um subconjunto de atributos numéricos, em vez de um único valor. O algoritmo tem de decidir quando deve parar para aplicar a regressão linear sobre os atributos restantes.
- Aplicações reais têm de considerar estes aspectos

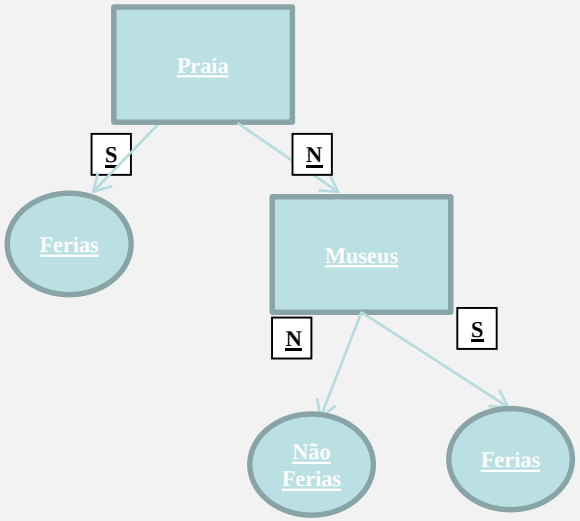
TÉCNICO LISBOA

Exemplo

Cidade	Praia	Sol	Museus	Férias
Conjunto de Treino				
Barcelona	1	1	1	Sim
Tavira	1	1	0	Sim
Berlin	0	0	1	Sim
Beja	0	1	0	Não
Povoa do Varzim	1	0	0	Não
Exemplos Futuros				
Helsinquia	1	0	1	Sim
Badajoz	0	0	0	Não

Exemplo

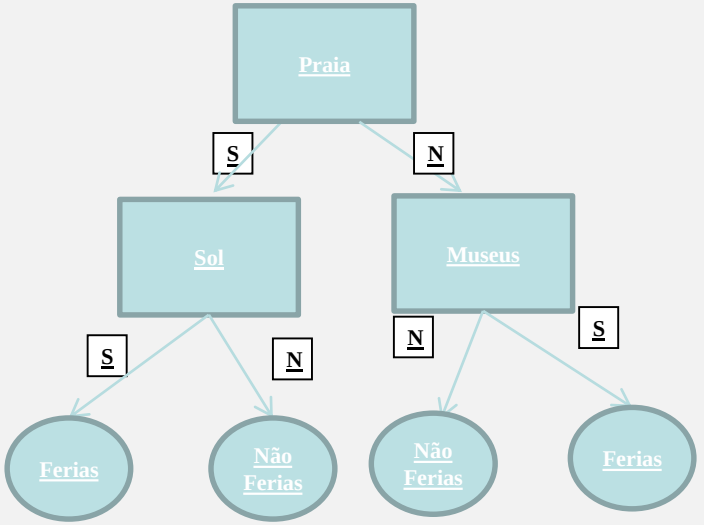
Cidade	Praia	Sol	Museus	Férias
Barcelona	1	1	1	Sim
Tavira	1	1	0	Sim
Berlin	0	0	1	Sim
Beja	0	1	0	Não
~~Povoa do Varzim~~	~~1~~	~~0~~	~~0~~	~~Não~~



GI(Praia)=1-(2/4 I(0,1) + 2/4 I(0.5,0.5))=0.5
GI(Sol)=1-(3/4 I(2/3,1/3) + 1/4 I(0,1))=0.3
GI(Museus)=1-(2/4 I(0,1) + 2/4 I(0.5,0.5))=0.5

Exemplo

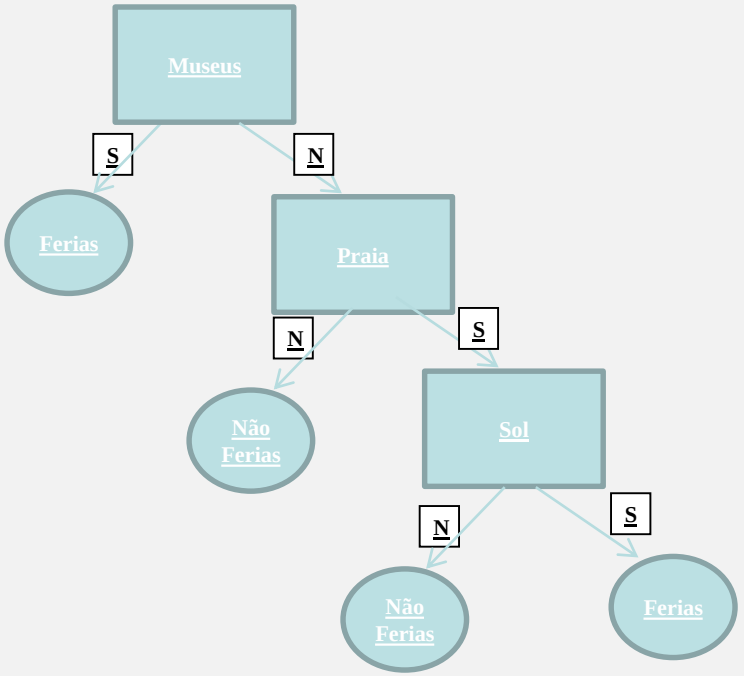
Cidade	Praia	Sol	Museus	Férias
Barcelona	1	1	1	Sim
Tavira	1	1	0	Sim
~~Berlin~~	~~0~~	~~0~~	~~1~~	~~Sim~~
Beja	0	1	0	Não
Povoa do Varzim	1	0	0	Não



GI(Praia)=1-(3/4 I(2/3,1/3) + 1/4 I(0,1)) = 0.3
GI(Sol)=1-(3/4 I(2/3,1/3) + 1/4 I(0,1)) = 0.3
GI(Museus)=1-(1/4 I(0,1) + 3/4 I(1/3,2/3)) = 0.3

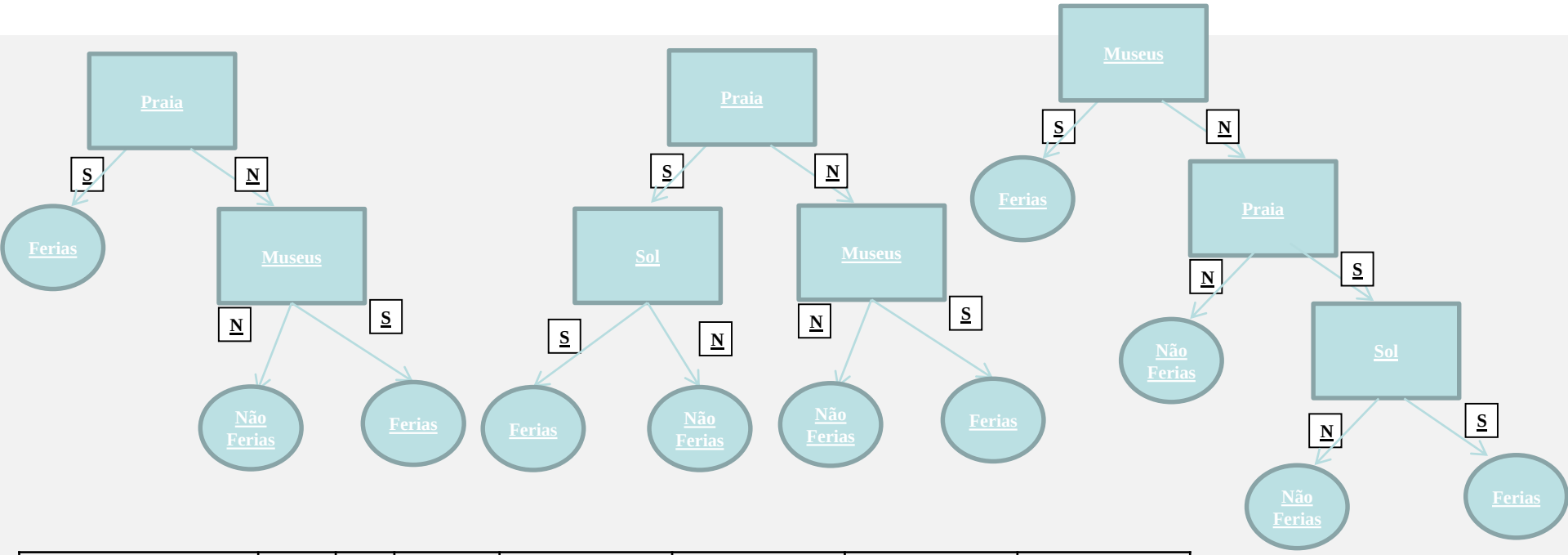
Exemplo

Cidade	Praia	Sol	Museus	Férias
Barcelona	1	1	1	Sim
Tavira	1	1	0	Sim
Berlin	0	0	1	Sim
Beja	0	1	0	Não
Povoa do Varzim	1	0	0	Não



GI(Praia)=1-(2/4 I(0.5,0.5) + 2/4 I(0.5,0.5))=0
GI(Sol)=1-(2/4 I(0.5,0.5) + 2/4 I(0.5,0.5))=0
GI(Museus)=1-(2/4 I(0,1) + 2/4 I(0.1,0.1))=1

Qual escolher?



Cidade	Praia	Sol	Museus	Férias	A1	A2	A3
Conjunto de Treino							
Barcelona	1	1	1	Sim	S	S	S
Tavira	1	1	0	Sim	S	S	S
Berlin	0	0	1	Sim	S	S	S
Beja	0	1	0	Não	N	N	N
Povoa do Varzim	1	0	0	Não	S	N	N
Exemplos Futuros							
Helsinquia	1	0	1	Sim	S	N	S
Badajoz	0	0	0	Não	N	N	N