APRENDIZAGEM DE MÁQUINA

(usando Python)

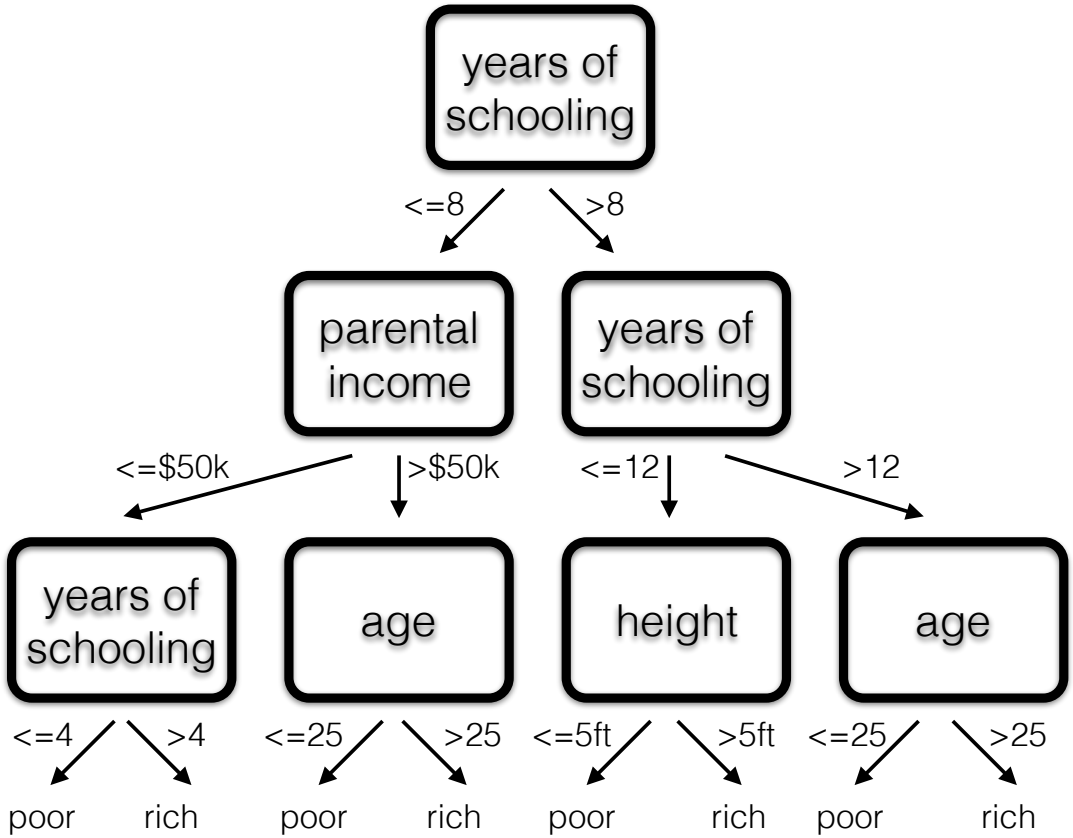
Thiago Marzagão

ÁRVORE DE DECISÃO & VALIDAÇÃO

árvore de decisão

- Aulas passadas: queríamos prever variáveis quantitativas.
- Aula de hoje (e seguintes): queremos prever variáveis qualitativas.
- Em outras palavras: queremos prever a *classe*.
- Em outras palavras (2): queremos *classificar*.
- Vários algoritmos de classificação: regressão logística, árvore de decisão, SVM, NN.

árvore de decisão



árvore de decisão

Table 4.1. The vertebrate data set.

Name	Body Temperature	Skin Cover	Gives Birth	Aquatic Creature	Aerial Creature	Has Legs	Hiber-nates	Class Label
human	warm-blooded	hair	yes	no	no	yes	no	mammal
python	cold-blooded	scales	no	no	no	no	yes	reptile
salmon	cold-blooded	scales	no	yes	no	no	no	fish
whale	warm-blooded	hair	yes	yes	no	no	no	mammal
frog	cold-blooded	none	no	semi	no	yes	yes	amphibian
komodo dragon	cold-blooded	scales	no	no	no	yes	no	reptile
bat	warm-blooded	hair	yes	no	yes	yes	yes	mammal
pigeon	warm-blooded	feathers	no	no	yes	yes	no	bird
cat	warm-blooded	fur	yes	no	no	yes	no	mammal
leopard shark	cold-blooded	scales	yes	yes	no	no	no	fish
turtle	cold-blooded	scales	no	semi	no	yes	no	reptile
penguin	warm-blooded	feathers	no	semi	no	yes	no	bird
porcupine	warm-blooded	quills	yes	no	no	yes	yes	mammal
eel	cold-blooded	scales	no	yes	no	no	no	fish
salamander	cold-blooded	none	no	semi	no	yes	yes	amphibian

(Intro to Data Mining, p. 147)

visão geral

- Objetivo: dividir as amostras recursivamente até obter "folhas" suficientemente homogêneas.
- Começamos com as amostras todas.
- Dividimos as amostras em dois grupos, com base em alguma variável (e ponto de corte, se a variável é quantitativa).
- Mas não arbitrariamente! Dividimos as amostras em dois grupos de tal maneira que os dois grupos sejam tão homogêneos quanto possível com relação a y.
- Dividimos cada grupo da mesma forma e assim vamos "crescendo" a árvore de cima p/ baixo.
- Diferentes medidas de homogeneidade são usadas na prática. Duas mais comuns: Gini e entropia.

Gini

- $G = \sum_{c=1}^{C} p_{gc}(1 - p_{gc})$
- p_{gc} é a porcentagem de amostras no grupo g que pertencem à classe c.
- Quanto menor G, maior a homogeneidade dos grupos.
- Exemplo: 2 classes, um grupo c/ 70 amostras dividido 50/50, um grupo c/ 30 amostras dividido 60/40.
- $G_{g=1} = (0,5 \times (1 - 0,5)) + (0,5 \times (1 - 0,5)) = 0,5$
- $G_{g=2} = (0,6 \times (1 - 0,6)) + (0,4 \times (1 - 0,4)) = 0,48$
- $G = 70/100 \times 0,5 + 30/100 \times 0,48 = 0,494$
- Dividimos as amostras recursivamente. P/ cada divisão escolhemos a variável e ponto de corte que minimizam G. Paramos quando os grupos forem 100% homogêneos.

Entropia

- $E = -\sum_{c=1}^{C} p_{gc}(\log(p_{gc}))$
- (log geralmente na base 2, mas base não é fundamental)
- p_{gc} é a porcentagem de amostras no grupo g que pertencem à classe c.
- Quanto menor E, maior a homogeneidade dos grupos.
- Exemplo: 2 classes, um grupo c/ 70 amostras dividido 50/50, um grupo c/ 30 amostras dividido 60/40.
- $E_{g=1} = -0,5 \times \log 0,5 - 0,5 \times \log 0,5 \approx 0,693$
- $E_{g=2} = -0,6 \times \log 0,6 - 0,4 \times \log 0,4 \approx 0,673$
- $E = 70/100 \times 0,693 + 30/100 \times 0,673 = 0,687$
- Dividimos as amostras recursivamente. P/ cada divisão escolhemos a variável e ponto de corte que minimizam E. Paramos quando os grupos forem 100% homogêneos.

árvore de decisão

- Crescemos a árvore de cima p/ baixo, usando G ou E, até que os grupos sejam 100% homogêneos.
- A cada divisão é preciso identificar qual variável maximiza a homogeneidade dos grupos resultantes.
- Isso é feito iterativamente - i.e., na base da tentativa e erro.
- Parece uma tarefa hercúlea mas seu laptop é capaz de fazer isso em uma fração de segundos.
- Depois de pronta, podemos usar a árvore p/ classificar novas amostras.

árvore de decisão

- Principal vantagem:
- Matematicamente simples: método não-paramétrico. Não exitem parâmetros p/ estimar ($\neq$ regressão; não existe $\mathbf{b}$).
- Principal desvantagem:
- Pouca robustez. Pequenas perturbações nos dados podem criar uma árvore completamente diferente. E um corte ótimo num determinado ponto pode resultar em cortes subótimos depois.
- Vamos ver como resolver isso no final da aula.

validação

- Como avaliar o poder preditivo de uma árvore?
- Existem vários métodos de validação.
- Método mais simples: dividir as amostras em 2/3 treinamento e 1/3 teste.
- "Crescemos" a árvore usando apenas os 2/3 de treinamento e depois usamos a árvore p/ prever a classe dos 1/3 de teste.
- Na verdade isso serve p/ qualquer algoritmo de classificação, não apenas árvores de decisão. Serve inclusive p/ compararmos o desempenho de diferentes algoritmos (ex.: árvore de classificação vs SVM, usando o mesmo dataset).

matriz de confusão

Table 4.2. Confusion matrix for a 2-class problem.

		Predicted Class	
		$Class = 1$	$Class = 0$
Actual Class	$Class = 1$	f_{11}	f_{10}
	$Class = 0$	f_{01}	f_{00}

(Intro to Data Mining, p. 149)

medidas de desempenho: acurácia

- Acurácia = predições corretas / predições totais
- $= \dfrac{f_{11} + f_{00}}{f_{11} + f_{10} + f_{01} + f_{00}}$
- Diagonal contém as predições corretas.

medidas de desempenho: taxa de erros

- Taxa de erros = predições incorretas / predições totais
- $= \dfrac{f_{10} + f_{01}}{f_{11} + f_{10} + f_{01} + f_{00}}$
- $= 1 -$ acurácia

medidas de desempenho: precisão

- Precisão $=$ % de vezes em que a classe correta é 0 quando o modelo prevê 0
- $= \dfrac{f_{00}}{f_{10} + f_{00}}$
- P/ mais de 2 classes: média ponderada.

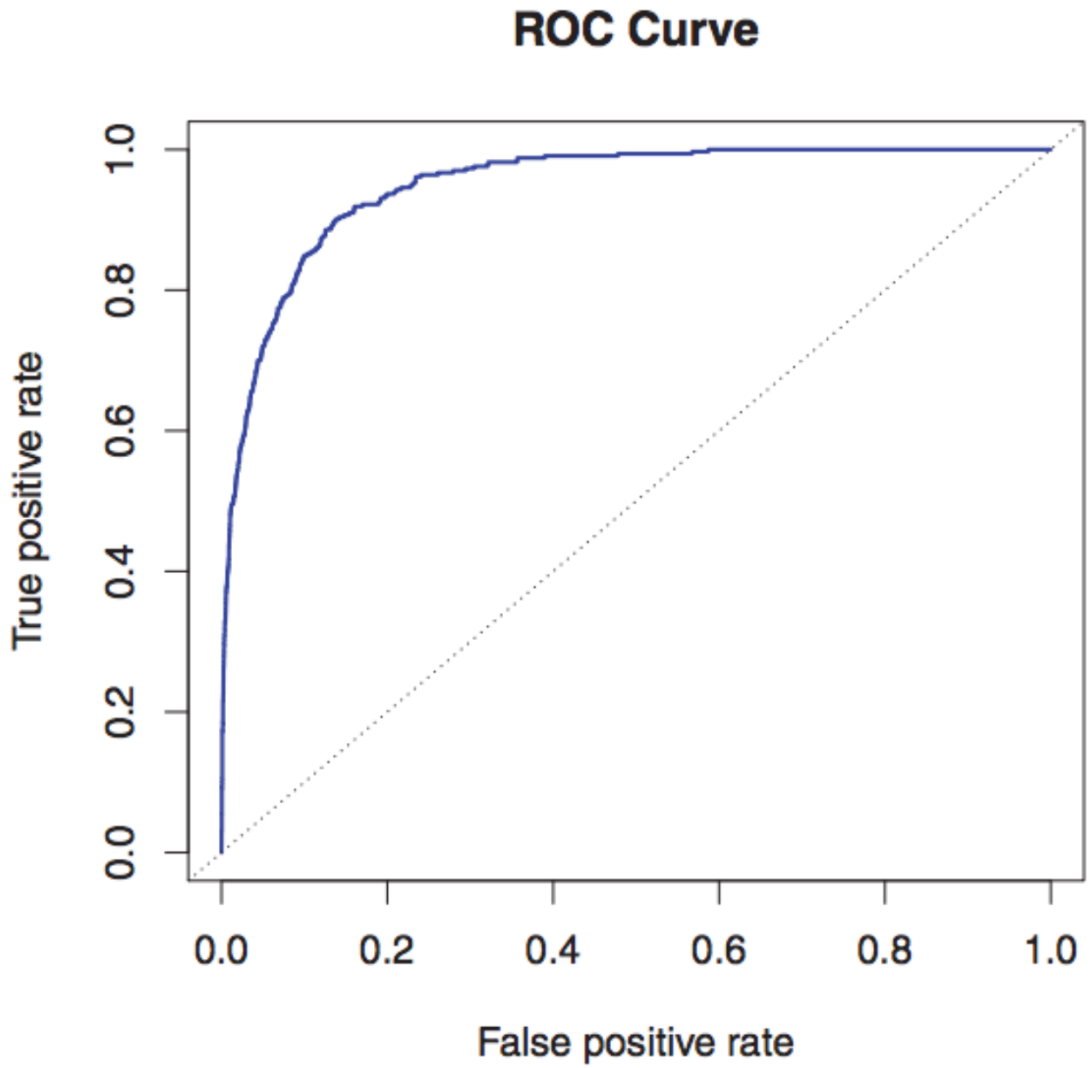
medidas de desempenho: recall

- Recall $=$ % de vezes em que o modelo prevê 0 quando a classe correta é 0
- $= \dfrac{f_{00}}{f_{01} + f_{00}}$
- P/ mais de 2 classes: média ponderada.

medidas de desempenho: F1

- $F1 = 2\dfrac{\text{precisão} \times \text{recall}}{\text{precisão} + \text{recall}}$
- Melhor: 1. Pior: 0.
- P/ mais de 2 classes: média ponderada.

medidas de desempenho: ROC



medidas de desempenho

- Ok, mas como sei se um modelo é suficientemente bom?
- R: Não existe um valor "mágico" p/ acurácia, etc.
- Depende do caso concreto em análise.
- Ex.: acurácia de 70% p/ qualidade do tomador de crédito. Bom? Ruim?
- Importante: classes desbalanceadas podem ser um problema.
- Ex.: exame médico que detecta um determinado tipo de câncer.
- A cada 100 exames, apenas 1 efetivamente é câncer.
- Classificador que sempre dá não-câncer vai estar correto 99% das vezes!
- Nesse caso a acurácia não é uma boa métrica. É preciso aceitar mais falsos positivos. (Ou usar correções p/ rebalancear classes - e.g., bootstrapping.)

validação

- Uma alternativa comum à divisão 2/3 - 1/3 é a chamada validação cruzada:
- ... divide-se o dataset em n grupos; freqüentemente $n = 10$
- ... treina-se o algoritmo classificador usando $n - 1$ grupos
- ... afere-se o desempenho do classificador usando o grupo deixado de fora como teste
- ... repete-se o procedimento p/ cada grupo (i.e., cada grupo será usado como teste uma vez)
- ... afere-se o desempenho médio do classificador

overfitting

- Todo algoritmo de classificação está sujeito a overfitting.
- Overfitting: o classificador (árvore, SVM, o que seja) responde a idiossincrasias do dataset e assim não desempenha bem com novas amostras. Ex.: por uma razão qualquer todos os candidatos a uma determinada linha de crédito que tinham altura superior a 1,90 foram bons pagadores. Mas poucas pessoas têm mais que 1,90, então esse achado é provavelmente inócuo. Mas o classificador pode "aprender" erroneamente que candidatos mais altos são bons pagadores. Overfitting = classificador confunde ruído com sinal.
- Importante validar o classificador: é preciso avaliar seu desempenho com amostras ainda não vistas.

random forest

- Em vez de criar uma árvore, criamos centenas ou milhares. P/ novas amostras, vale a predição modal das árvores. Isso aumenta a robustez das predições.
- P/ "crescer" cada árvore usamos bootstrapping: pegamos N amostras, com reposição, com N sendo o número total de amostras no dataset.
- A cada partição usamos não as variáveis todas, mas um subset aleatório delas, geralmente $\sqrt{K}$.
- Quantas árvores? O necessário p/ que as predições fiquem estáveis.
- Individualmente cada árvore tem desempenho ruim, mas a predição modal tende a ser boa.
- Variante: extreme random forest, em que o ponto de corte das variáveis contínuas também é aleatório.
- Na prática: quase ninguém usa uma única árvore de decisão; é random forest ou boosting.