Aprendizagem - Homework 1

Pedro Curvo (ist1102716)

Salvador Torpes (ist1102474)

1º Semestre - 23/24

Dataset

Consideramos o seguinte dataset D:

D	y_1	y_2	y_3	y_4	y_{out}
x_1	0.24	1	1	0	A
x_2	0.06	2	0	0	B
x_3	0.04	0	0	0	B
x_4	0.36	0	2	1	C
x_5	0.32	0	0	2	C
x_6	0.68	2	2	1	A
x_7	0.90	0	1	2	A
x_8	0.76	2	2	0	A
x_9	0.46	1	1	1	B
x_{10}	0.62	0	0	1	B
x_{11}	0.44	1	2	2	C
x_{12}	0.52	0	2	0	C

Tabela 1: Dataset D

1 Exercício 1.

De modo a corretamente completar a árvore de decisão, é necessário calcular o Information gain (IG) da variável de output y_{out} condicionada a cada uma das variáveis y_2, y_3 e y_4.

1.1 Escolha do 2º nó

Como queremos completar o ramo $y_1 > 0.4$, vamos apenas considerar as ocorrencias em que $y_1 > 0.4$ para calcular o IG.

Information Gain de y_{out} condicionada a y_2

$$IG(y_{out}|y_2) = H(y_{out}) - H(y_{out}|y_2)$$

$$H(y_{out}) = \left(-\sum_{i=1}^{3} p_{out_i}(\log_2 p_{out_i})\right) = -\left(\frac{3}{7}\log_2\left(\frac{3}{7}\right) + \frac{2}{7}\log_2\left(\frac{2}{7}\right) + \frac{2}{7}\log_2\left(\frac{2}{7}\right)\right) = 1.5567$$

$$H(y_{out}|y_2) = \sum_{i=0}^{2} p_{y_2=i} H(y_{out}|y_2 = i)$$

Tabela dividida em 3 sub-tabelas, cada uma com os dados que verificam $y_2 = 0$, $y_2 = 1$ e $y_2 = 2$, respetivamente:

D	y_2	y_{out}
x_7	0	A
x_{10}	0	B
x_{12}	0	C

Tabela 2: Dataset D com $y_2 = 0$

D	y_2	y_{out}
x_9	1	B
x_{11}	1	C

Tabela 3: Dataset D com $y_2 = 1$

D	y_2	y_{out}
x_6	2	A
x_8	2	A

Tabela 4: Dataset D com $y_2 = 2$

$$H(y_{out}|y_2 = 0) = -\left(\frac{1}{3}\log_2\left(\frac{1}{3}\right) + \frac{1}{3}\log_2\left(\frac{1}{3}\right) + \frac{1}{3}\log_2\left(\frac{1}{3}\right)\right) = 1.58496$$

$$H(y_{out}|y_2 = 1) = -\left(\frac{1}{2}\log_2\left(\frac{1}{2}\right) + \frac{1}{2}\log_2\left(\frac{1}{2}\right)\right) = 1$$

$$H(y_{out}|y_2 = 2) = -(\log(1)) = 0$$

Assim, podemos calcular a entropia de y_{out} condicionada a y_2:

$$H(y_{out}|y_2) = \frac{3}{7}H(y_{out}|y_2 = 0) + \frac{2}{7}H(y_{out}|y_2 = 1) + \frac{2}{7}H(y_{out}|y_2 = 2) =$$
$$= \frac{3}{7} \times 1.58496 + \frac{2}{7} \times 1 + \frac{2}{7} \times 0 = 0.96498$$

Por fim, podemos calcular o Information Gain:

$$IG(y_{out}|y_2) = H(y_{out}) - H(y_{out}|y_2) = 1.5567 - 0.96498 = 0.59172$$

Information Gain de y_{out} condicionada a y_3

$$IG(y_{out}|y_3) = H(y_{out}) - H(y_{out}|y_3)$$

$$H(y_{out}|y_3) = \sum_{i=0}^{2} p_{y_3=i} H(y_{out}|y_3 = i)$$

Tabela dividida em 3 sub-tabelas, cada uma com os dados que verificam $y_3 = 0$, $y_3 = 1$ e $y_3 = 2$, respetivamente:

D	y_3	y_{out}
x_{10}	0	B

Tabela 5: Dataset D com $y_3 = 0$

D	y_3	y_{out}
x_7	1	A
x_9	1	B

Tabela 6: Dataset D com $y_3 = 1$

D	y_3	y_{out}
x_6	2	A
x_8	2	A
x_{11}	2	C
x_{12}	2	C

Tabela 7: Dataset D com $y_3 = 2$

$$H(y_{out}|y_3 = 0) = -\left(\log(1)\right) = 0$$

$$H(y_{out}|y_3 = 1) = -\left(\frac{1}{2}\log_2\left(\frac{1}{2}\right) + \frac{1}{2}\log_2\left(\frac{1}{2}\right)\right) = 1$$

$$H(y_{out}|y_3 = 2) = -\left(\frac{2}{4}\log_2\left(\frac{2}{4}\right) + \frac{2}{4}\log_2\left(\frac{2}{4}\right)\right) = 1$$

Assim, podemos calcular a entropia de y_{out} condicionada a y_3:

$$H(y_{out}|y_3) = \frac{1}{7}H(y_{out}|y_3 = 0) + \frac{2}{7}H(y_{out}|y_3 = 1) + \frac{4}{7}H(y_{out}|y_3 = 2) =$$

$$= \frac{1}{7} \times 0 + \frac{2}{7} \times 1 + \frac{4}{7} \times 1 = 0.85714$$

Por fim, podemos calcular o Information Gain:

$$IG(y_{out}|y_3) = H(y_{out}) - H(y_{out}|y_3) = 1.5567 - 0.85714 = 0.69956$$

Information Gain de y_{out} condicionada a y_4

$$IG(y_{out}|y_4) = H(y_{out}) - H(y_{out}|y_4)$$

$$H(y_{out}|y_4) = \sum_{i=0}^{2} p_{y_4=i} H(y_{out}|y_4 = i)$$

Tabela dividida em 3 sub-tabelas, cada uma com os dados que verificam $y_4 = 0$, $y_4 = 1$ e $y_4 = 2$, respetivamente:

D	y_4	y_{out}
x_8	0	A
x_{12}	0	C

Tabela 8: Dataset D com $y_4 = 0$

D	y_4	y_{out}
x_6	1	A
x_9	1	B
x_{10}	1	B

Tabela 9: Dataset D com $y_4 = 1$

D	y_4	y_{out}
x_7	2	A
x_{11}	2	C

Tabela 10: Dataset D com $y_4 = 2$

$$H(y_{out}|y_4 = 0) = -\left(\frac{1}{2}\log_2\left(\frac{1}{2}\right) + \frac{1}{2}\log_2\left(\frac{1}{2}\right)\right) = 1$$

$$H(y_{out}|y_4 = 1) = -\left(\frac{2}{3}\log_2\left(\frac{2}{3}\right) + \frac{1}{3}\log_2\left(\frac{1}{3}\right)\right) = 0.918295$$

$$H(y_{out}|y_4 = 2) = -\left(\frac{1}{2}\log_2\left(\frac{1}{2}\right) + \frac{1}{2}\log_2\left(\frac{1}{2}\right)\right) = 1$$

Assim, podemos calcular a entropia de y_{out} condicionada a y_4:

$$H(y_{out}|y_4) = \frac{2}{7}H(y_{out}|y_4 = 0) + \frac{3}{7}H(y_{out}|y_4 = 1) + \frac{2}{7}H(y_{out}|y_4 = 2) =$$

$$= \frac{2}{7} \times 1 + \frac{3}{7} \times 0.918295 + \frac{2}{7} \times 1 = 0.96498$$

Por fim, podemos calcular o Information Gain:

$$IG(y_{out}|y_4) = H(y_{out}) - H(y_{out}|y_4) = 1.5567 - 0.96498 = 0.59172$$

Comparação dos IG Podemos confirmar, pelos cálculos acima, que:

$$IG(y_{out}|y_2) = IG(y_{out}|y_4) < IG(y_{out}|y_3)$$

Assim, a variável y_3 é a que tem maior IG, pelo que é a variável que escolhemos para o $2^{\underline{o}}$ nó da árvore de decisão no ramo $y_1 > 0.4$. Este nó vai ter três ramos, um para cada valor possível de y_3: a ocorrência $y_3 = 0$ tem apenas uma ocorrência e a ocorrência $y_3 = 1$ tem apenas duas ocorrências, pelo que estes dois nós não são expandidos. Por outro lado, $y_3 = 2$ tem 4 ocorrências, pelo que é o único nó que é expandido. Falta averiguar qual a variável que vai ser usada para expandir este nó.

1.2 Escolha do $3^{\underline{o}}$ nó

Queremos agora completar o ramo que verifica $y_1 > 0.4$ e $y_3 = 2$. Para isso, vamos calcular o IG de y_{out} para y_2 e y_4 considerando apenas as ocorrências que verificam $y_1 > 0.4$ e $y_3 = 2$:

Information Gain de y_{out} condicionada a y_2

$$IG(y_{out}|y_2) = H(y_{out}) - H(y_{out}|y_2)$$

$$H(y_{out}) = \left(-\sum_{i=1}^{3} p_{out_i}(\log_2 p_{out_i})\right) = -\left(\frac{2}{4}\log_2\left(\frac{2}{4}\right) + \frac{2}{4}\log_2\left(\frac{2}{4}\right)\right) = 1$$

$$H(y_{out}|y_2) = \sum_{i=0}^{2} p_{y_2=i}H(y_{out}|y_2 = i)$$

As entropias condicionadas de y_{out} para cada valor de y_2 são:

$$H(y_{out}|y_2 = 0) = -\left(\log_2(1)\right) = 0$$

$$H(y_{out}|y_2 = 1) = -\left(\log_2(1)\right) = 0$$

$$H(y_{out}|y_2 = 2) = -\left(\log_2(1)\right) = 0$$

Assim, podemos calcular a entropia de y_{out} condicionada a y_2:

$$H(y_{out}|y_2) = \frac{1}{4}H(y_{out}|y_2 = 0) + \frac{1}{4}H(y_{out}|y_2 = 1) + \frac{2}{4}H(y_{out}|y_2 = 2) =$$

$$= \frac{1}{4} \times 0 + \frac{1}{4} \times 0 + \frac{2}{4} \times 0 = 0$$

Por fim, podemos calcular o Information Gain:

$$IG(y_{out}|y_2) = H(y_{out}) - H(y_{out}|y_2) = 1 - 0 = 1$$

Information Gain de y_{out} condicionada a y_4

$$IG(y_{out}|y_4) = H(y_{out}) - H(y_{out}|y_4)$$

$$H(y_{out}|y_4) = \sum_{i=0}^{2} p_{y_4=i} H(y_{out}|y_4 = i)$$

As entropias condicionadas de y_{out} para cada valor de y_4 são:

$$H(y_{out}|y_4 = 0) = -\left(\frac{1}{2}\log_2\left(\frac{1}{2}\right) + \frac{1}{2}\log_2\left(\frac{1}{2}\right)\right) = 1$$

$$H(y_{out}|y_4 = 1) = -\left(\log_2(1)\right) = 0$$

$$H(y_{out}|y_4 = 2) = -\left(\log_2(1)\right) = 0$$

Assim, podemos calcular a entropia de y_{out} condicionada a y_4:

$$H(y_{out}|y_4) = \frac{2}{4}H(y_{out}|y_4 = 0) + \frac{1}{4}H(y_{out}|y_4 = 1) + \frac{1}{4}H(y_{out}|y_4 = 2) =$$

$$= \frac{2}{4} \times 1 + \frac{1}{4} \times 0 + \frac{1}{4} \times 0 = 0.5$$

Por fim, podemos calcular o Information Gain:

$$IG(y_{out}|y_4) = H(y_{out}) - H(y_{out}|y_4) = 1 - 0.5 = 0.5$$

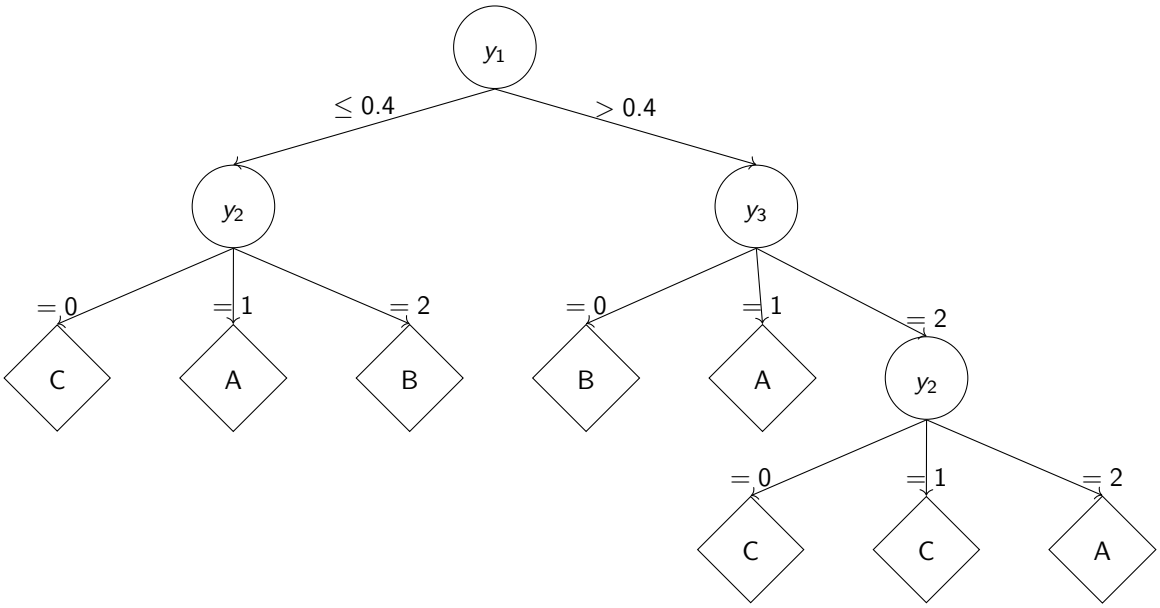
Comparação dos IG Podemos confirmar, pelos cálculos acima, que:

$$IG(y_{out}|y_2) > IG(y_{out}|y_4)$$

Assim, a variável y_2 é a que tem maior IG, pelo que é a variável que escolhemos para o $3^{\underline{o}}$ nó da árvore de decisão no ramo $y_1 > 0.4$ e $y_3 = 2$. Todos os nós desta árvore têm menos que 4 ocorrências, pelo que nenhum deles é expandido e termina a árvore de decisão.

1.3 Construção da árvore de decisão

Para completar a árvore, resta preencher os nós terminais com os valores de y_{out} que são mais prováveis em cada ramo. Em caso de empate, escolhemos por ordem alfabética. A árvore de decisão final é:



2 Exercício 2.

Com o objetivo de desenhar a matriz de confusão da árvore de decisão construída acima, começamos por calcular os valores previstos para o output, $\hat{y}_{out}$, para cada uma das ocorrências do dataset D:

D	y_1	y_2	y_3	y_4	$\hat{y}_{out}$	y_{out}
x_1	0.24	1	1	0	A	A
x_2	0.06	2	0	0	B	B
x_3	0.04	0	0	0	C	B
x_4	0.36	0	2	1	C	C
x_5	0.32	0	0	2	C	C
x_6	0.68	2	2	1	A	A
x_7	0.90	0	1	2	A	A
x_8	0.76	2	2	0	A	A
x_9	0.46	1	1	1	A	B
x_{10}	0.62	0	0	1	B	B
x_{11}	0.44	1	2	2	C	C
x_{12}	0.52	0	2	0	C	C

Tabela 11: Dataset D com $\hat{y}_{out}$

Assim, desenhamos a **matriz de confusão**:

		Valores reais		
		A	B	C
Valores Previstos	A	4	1	0
	B	0	2	0
	C	0	1	4

Tabela 12: Matriz de confusão

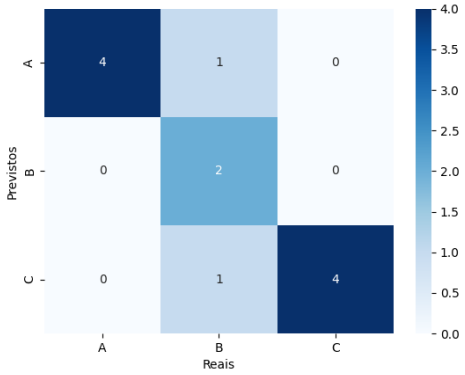


Figura 1: Matriz de confusão

3 Exercício 3.

Para calcular o F_1-score para cada uma das classes de y_{out}, começamos por calcular a precisão e o recall para cada uma delas:

A precisão é dada por:

$$P = \frac{TP}{TP + FP}$$

O recall é dado por:

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

Assim, obtemos que:

$$P_A = \frac{4}{4+1+0} = \frac{4}{5} \qquad P_B = \frac{2}{2+0+0} = 1 \qquad P_C = \frac{4}{4+1+0} = \frac{4}{5}$$
$$R_A = \frac{4}{4+0+0} = 1 \qquad R_B = \frac{2}{2+1+1} = \frac{1}{2} \qquad R_C = \frac{4}{4+0+0} = 1$$

Por fim, o F_1-score é dado por:

$$F_1 = \frac{1}{0.5 \cdot \frac{1}{P} + 0.5 \cdot \frac{1}{R}}$$

Assim, podemos calcular o F_1-score para cada uma das classes:

$$F_1(A) = \frac{1}{0.5 \cdot \frac{5}{4} + 0.5 \cdot 1} = \frac{1}{\frac{5}{8} + \frac{1}{2}} = \frac{1}{\frac{5}{8} + \frac{4}{8}} = \frac{1}{\frac{9}{8}} = \frac{8}{9}$$

$$F_1(B) = \frac{1}{0.5 \cdot 1 + 0.5 \cdot 2} = \frac{1}{0.5 + 1} = \frac{1}{1.5} = \frac{2}{3}$$

$$F_1(C) = \frac{1}{0.5 \cdot \frac{5}{4} + 0.5 \cdot 1} = \frac{1}{\frac{5}{8} + \frac{1}{2}} = \frac{1}{\frac{5}{8} + \frac{4}{8}} = \frac{1}{\frac{9}{8}} = \frac{8}{9}$$

Resposta: Assim, podemos concluir que a classe com menor F_1-score é a classe B, com um F_1-score de $\frac{2}{3}$.

4 Exercício 4.

Para calcular o coeficiente de Spearman entre as variáveis y_1 e y_2, começamos por calcular o rank de cada uma das variáveis:

D	y_1	y_1 rank	y_2	y_2 rank
x_1	0.24	3	1	8
x_2	0.06	2	2	11
x_3	0.04	1	0	3.5
x_4	0.36	5	0	3.5
x_5	0.32	4	0	3.5
x_6	0.68	10	2	11
x_7	0.90	12	0	3.5
x_8	0.76	11	2	11
x_9	0.46	7	1	8
x_{10}	0.62	9	0	3.5
x_{11}	0.44	6	1	8
x_{12}	0.52	8	0	3.5

Tabela 13: Dataset D com ranks

A fórmula para o coeficiente de Spearman é:

$$r_S = \frac{\text{cov}(rank(y_1), rank(y_2))}{\sqrt{\text{var}(rank(y_1)) \cdot \text{var}(rank(y_2))}} = \frac{\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})}{\sqrt{\left(\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(rank(x_i) - ran\bar{k}(x))^2\right) \cdot \left(\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(rank(y_i) - ran\bar{k}(y))^2\right)}} = 0.079659$$

Resposta: Como o coeficiente de Spearman entre as duas variáveis é $<< 1$, podemos concluir que as duas variáveis não estão correlacionadas.

5 Exercício 5.

Queremos desenhar os histogramas da variável y_1 condicionados aos diferentes outcomes da variável y_{out}. Assim, é necessário calcular os valores dos bins para 3 histogramas diferentes. Em primeiro lugar, utilizamos os dados:

y_{out}	y_1
A	0.24
A	0.68
A	0.90
A	0.76
B	0.06
B	0.04
B	0.46
B	0.62
C	0.36
C	0.32
C	0.44
C	0.52

Tabela 14: Dataset D com y_1 e y_{out}

Queremos que cada histograma tenha 5 bins sendo a range total $[0, 1]$, logo, os bins possíveis são $[0, 0.2]$, $[0.2, 0.4]$, $[0.4, 0.6]$, $[0.6, 0.8]$ e $[0.8, 1]$.

Bins	Contagens com $y_{out} = A$	Altura do bin para $y_{out} = A$	Contagens com $y_{out} = B$	Altura do bin para $y_{out} = B$	Contagens com $y_{out} = C$	Altura do bin para $y_{out} = C$	Classe predominante no bin
$[0, 0.2]$	0	0	2	$\frac{2}{4 \cdot 0.2} = 2.5$	0	0	B
$[0.2, 0.4]$	1	$\frac{1}{4 \cdot 0.2} = 1.25$	0	0	2	$\frac{2}{4 \cdot 0.2} = 2.5$	C
$[0.4, 0.6]$	0	0	1	$\frac{1}{4 \cdot 0.2} = 1.25$	2	$\frac{2}{4 \cdot 0.2} = 2.5$	C
$[0.6, 0.8]$	2	$\frac{2}{4 \cdot 0.2} = 2.5$	1	$\frac{1}{4 \cdot 0.2} = 1.25$	0	0	A
$[0.8, 1]$	1	$\frac{1}{4 \cdot 0.2} = 1.25$	0	0	0	0	A

Na tabela acima encontram-se os cálculos para a altura de cada bin em cada um dos três histogramas. A altura é dada pela fórmula:

$$h = \frac{C}{n \cdot l}$$

Onde C é o número de ocorrências no bin, n é o número total de ocorrências e l é a largura do bin.

Obtivemos os seguintes histogramas da variável y_1 condicionados aos diferentes outcomes da variável y_{out}:

6 Componente de Programação

6.1 Imports

```
import sklearn as sk
from sklearn.feature_selection import f_classif
from sklearn.model_selection import train_test_split
from sklearn import tree
import numpy as np
import pandas as pd
import matplotlib.pyplot as plt
import seaborn as sns
from pathlib import Path
from scipy.io.arff import loadarff
```

Listing 1: Python example

6.2 Dataset

```
```

Listing 2: Python example