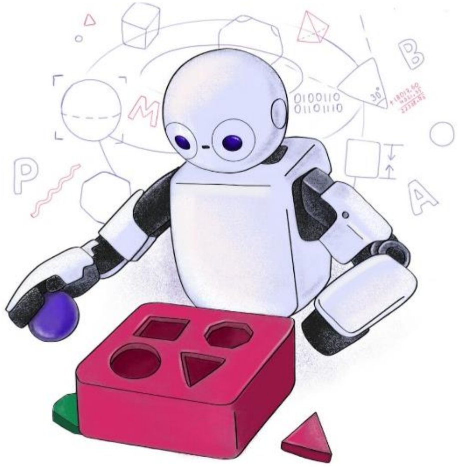
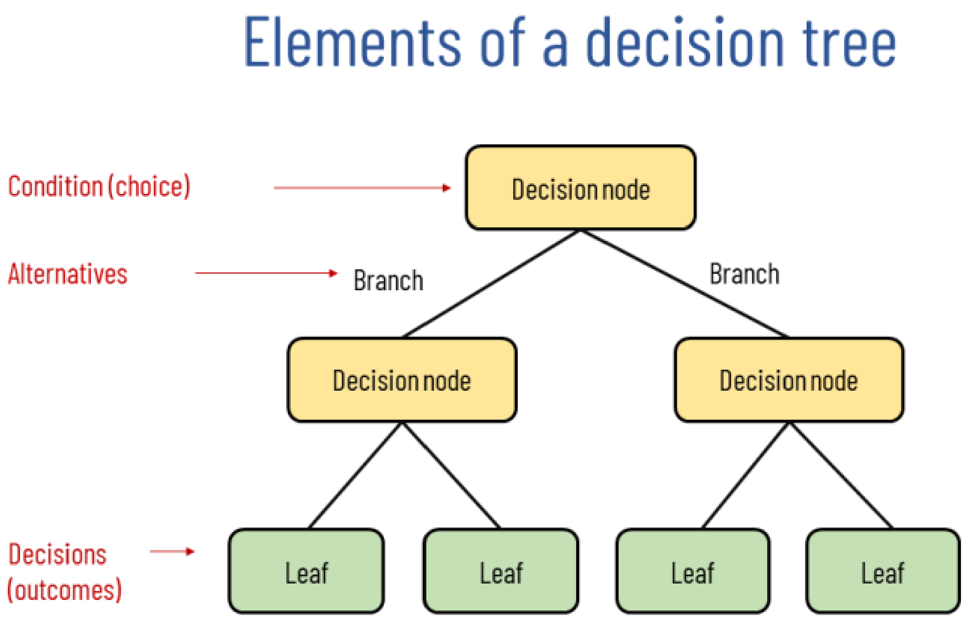
TP555 - Inteligência Artificial e Machine Learning:
Árvores de Decisão



Inatel

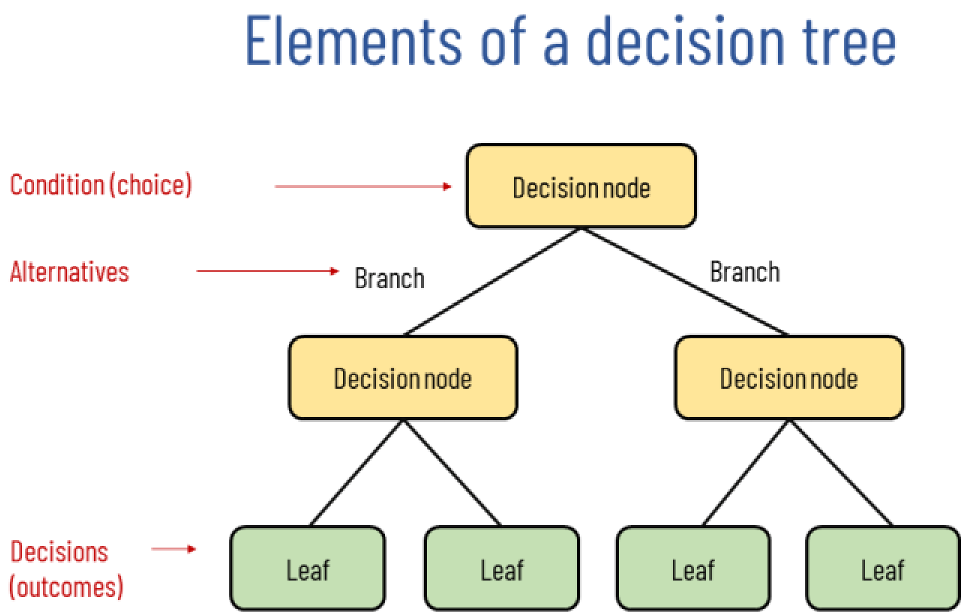
Felipe Augusto Pereira de Figueiredo
felipe.figueiredo@inatel.br

Árvores de decisão



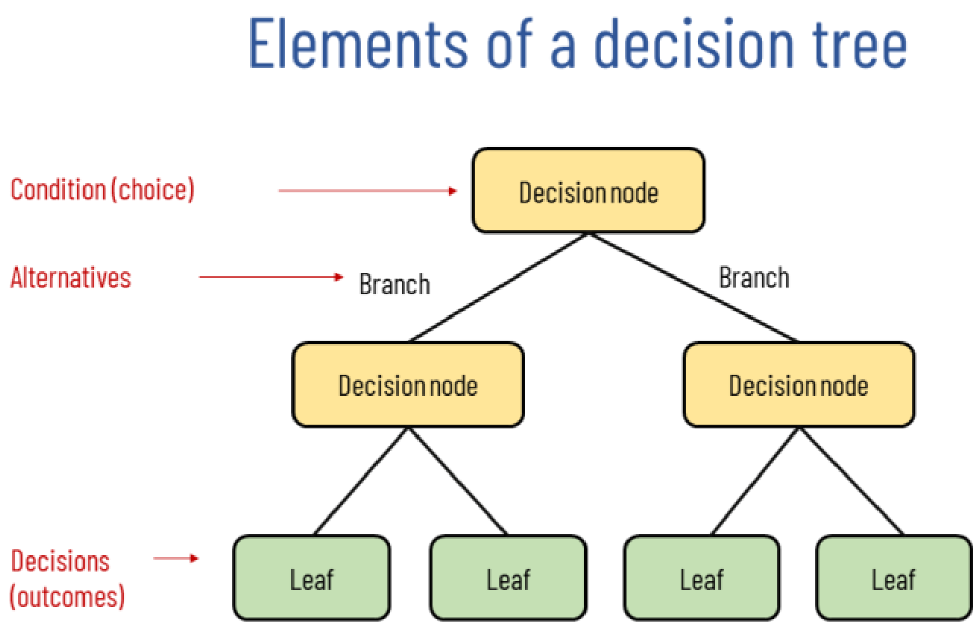
- Assim como o k-NN, uma ***árvore de decisão*** (do inglês, ***decision trees***), é um algoritmo de ***aprendizado supervisionado não-paramétrico*** e ***não-linear*** que pode ser utilizado tanto para ***classificação*** quanto para ***regressão***.

Árvores de decisão



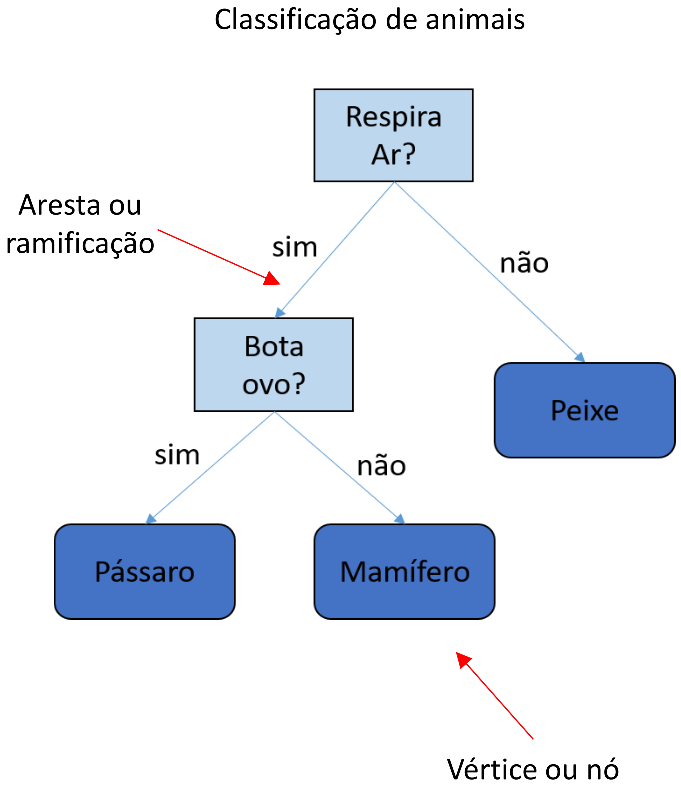
- ***Não-paramétrico***: elas ***não fazem suposições sobre a distribuição*** dos dados ou ***sobre a forma da função*** que estão tentando aprender.
- ***Não definem um número fixo de parâmetros*** como em modelos lineares, que têm um número fixo de pesos.
- Em vez de definir um número fixo de parâmetros, as ***árvores de decisão ajustam sua complexidade à medida que crescem***, dependendo da estrutura dos dados.

Árvores de decisão



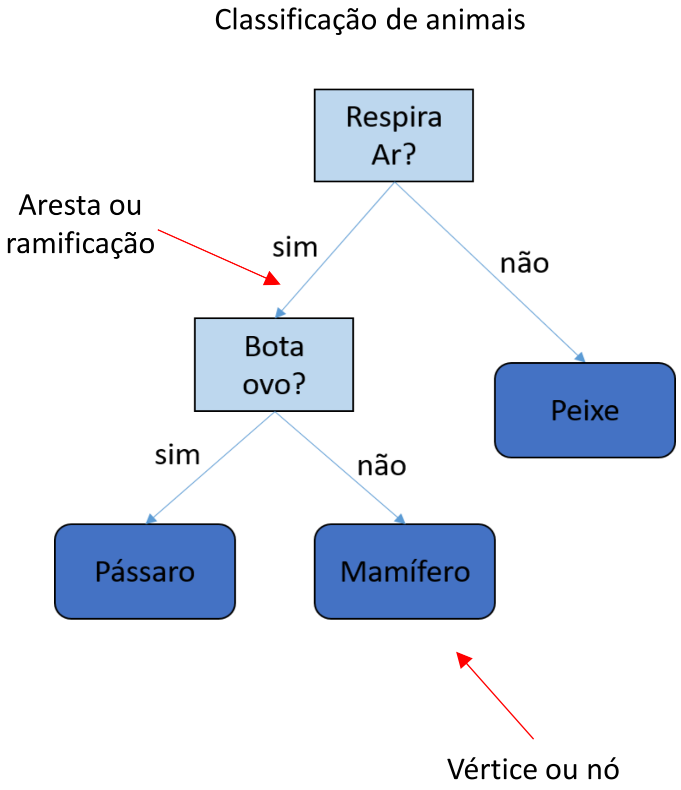
- Ou seja, os ***parâmetros são criados durante o treinamento*** ***para explicar os dados***.
- O ***modelo é construído apenas com base nos dados observados***
- O ***tamanho da árvore***, i.e., o número de parâmetros, ***tende a crescer com a base de dados***.
- ***Não-linear***: funções hipótese e discriminante são ***funções não-lineares***, i.e., os dados não são aproximados ou separados por um ***hiperplano***.

Árvores de decisão



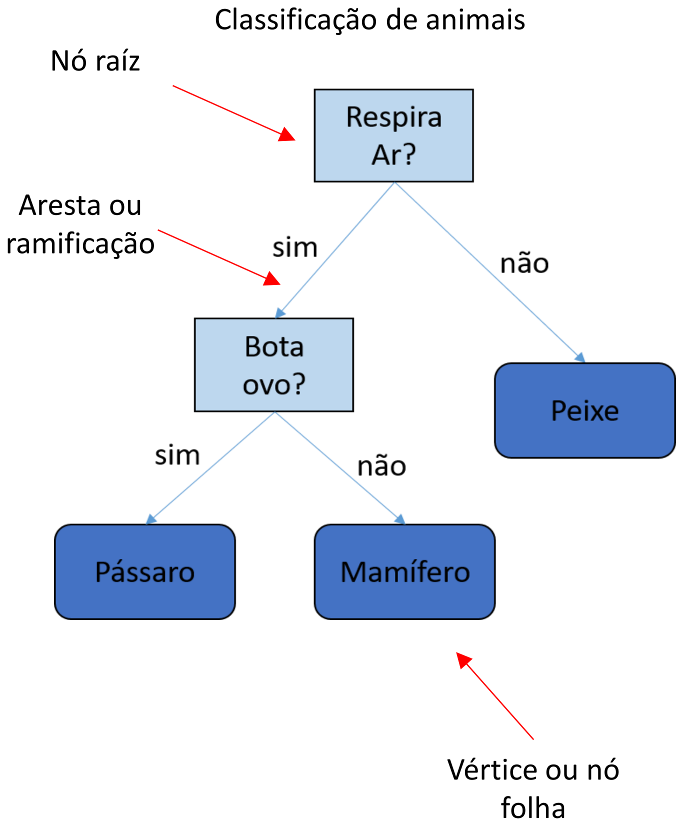
- O objetivo é criar um modelo que realize predições aprendendo ***regras simples de decisão inferidas*** a partir dos ***atributos do conjunto de treinamento***.
- As ***árvores de decisão*** são os componentes fundamentais das ***florestas aleatórias*** (do inglês, ***random forests***) que estão entre os ***algoritmos mais poderosos de aprendizado de máquina*** disponíveis atualmente.

Árvores de decisão



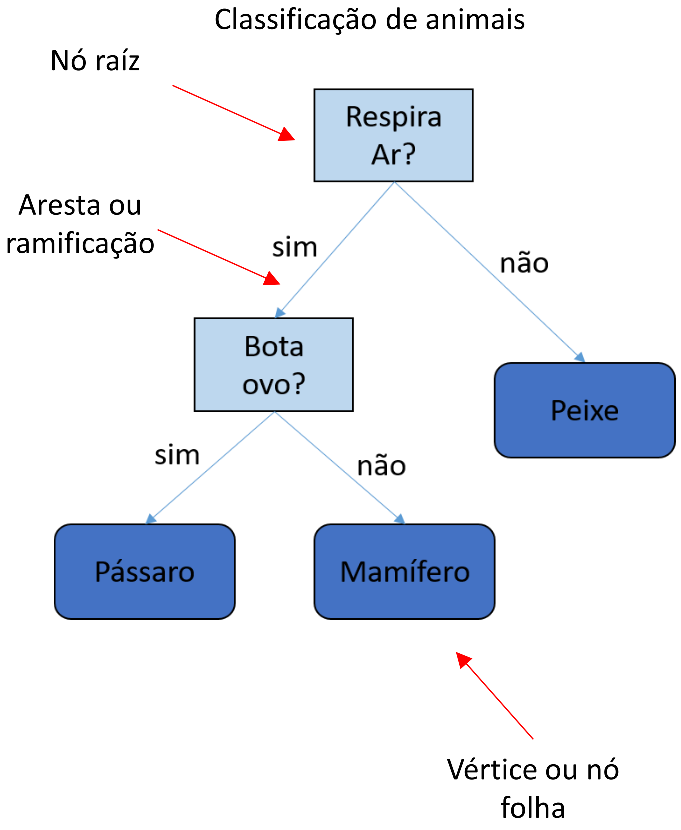
- Formalmente, uma árvore é um ***grafo não-direcionado*** no qual dois ***vértices*** quaisquer se conectam por um único caminho (ou seja, um ***grafo acíclico não-direcionado***) [Wikipedia, 2019].
  - Um ciclo é um caminho em que o primeiro e o último vértice coincidem.
- Por exemplo, o vértice "Pássaro" só se conecta com o vértice "Mamífero" através do vértice "Bota ovo?" e não existe um caminho que termine no mesmo vértice de início.

Árvores de decisão



- A árvore possui um ***nó raiz***, do qual ***parte o processo de decisão***.
- Nesse processo, ***valores distintos dos atributos geram arestas*** (i.e., ***ramificações***) e, quando se chega a um ***nó folha***, ocorre uma ***atribuição de uma classe ou valor***.

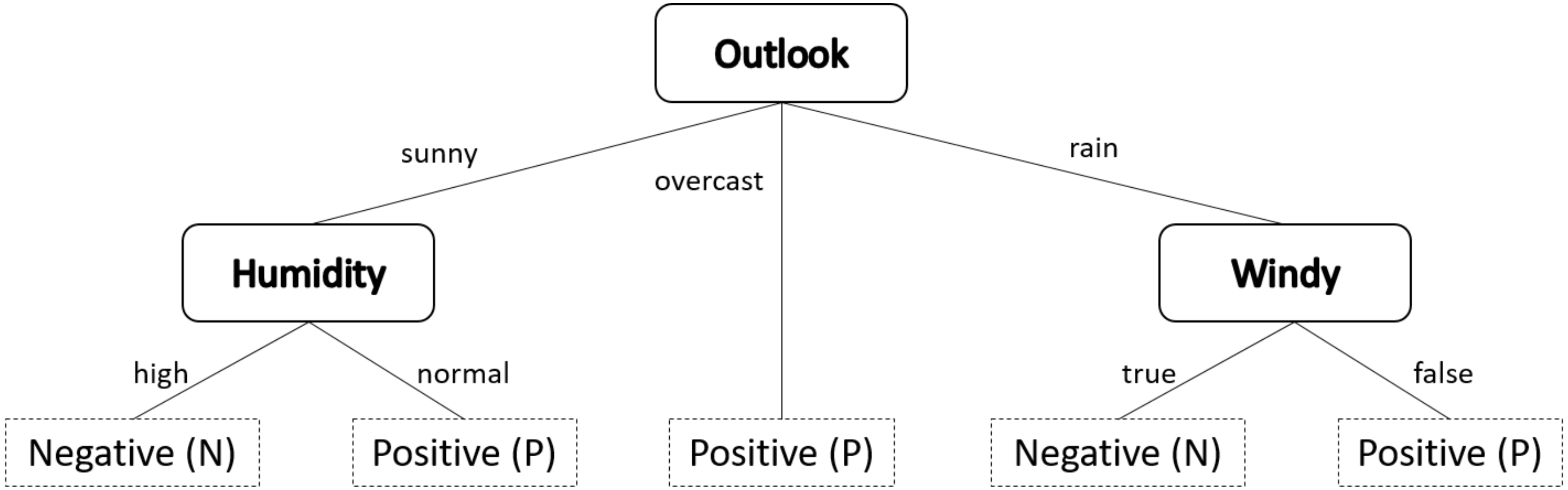
Árvores de decisão



- ***Árvores de decisão*** são modelos de ***caixa branca***, ou seja, é possível entender e ***explicar facilmente como o modelo realiza a classificação ou regressão*** baseando-se nos atributos.
- Elas são o oposto dos modelos de ***caixa preta***, onde os resultados são difíceis de interpretar e ***não é fácil entender como os diferentes atributos interagem entre si para gerar a saída*** (e.g., redes neurais artificiais).

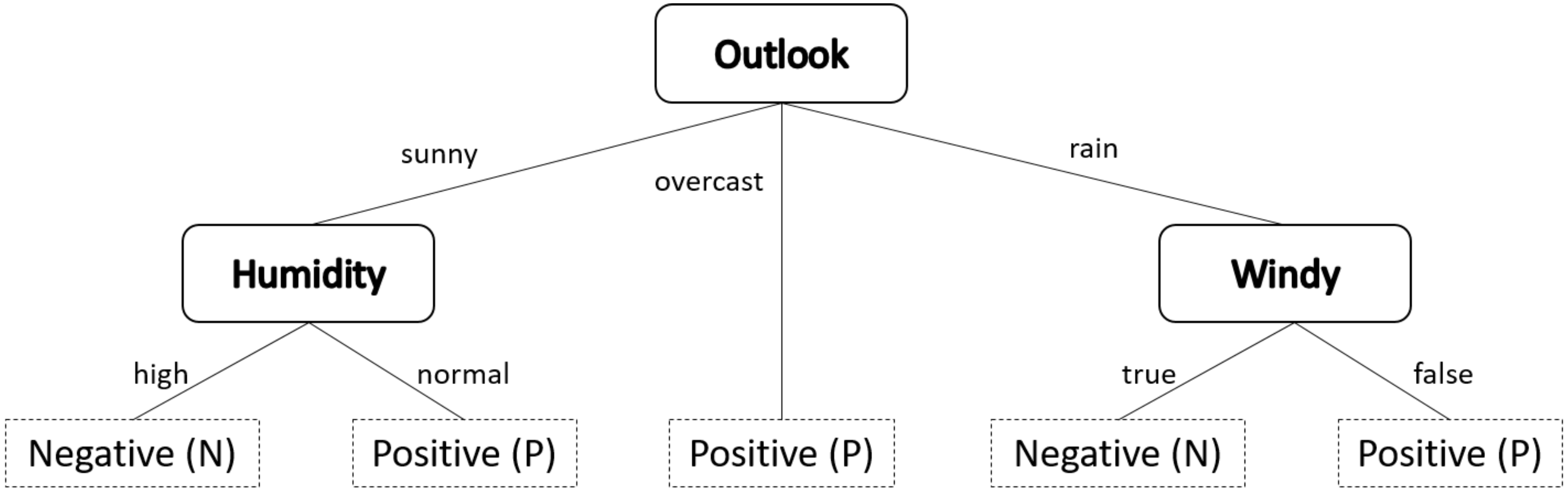
Árvores de decisão

- A figura abaixo mostra uma árvore de decisão criada a partir de informações se jogadores jogarão tênis ou não dependendo dos valores dos atributos ***Clima***, ***Humidade*** e ***Vento***.
- Cada ***nó da árvore atua como um caso de teste*** para algum atributo, e cada extremidade, ou seja, uma terminação ou folha, corresponde a uma classe.



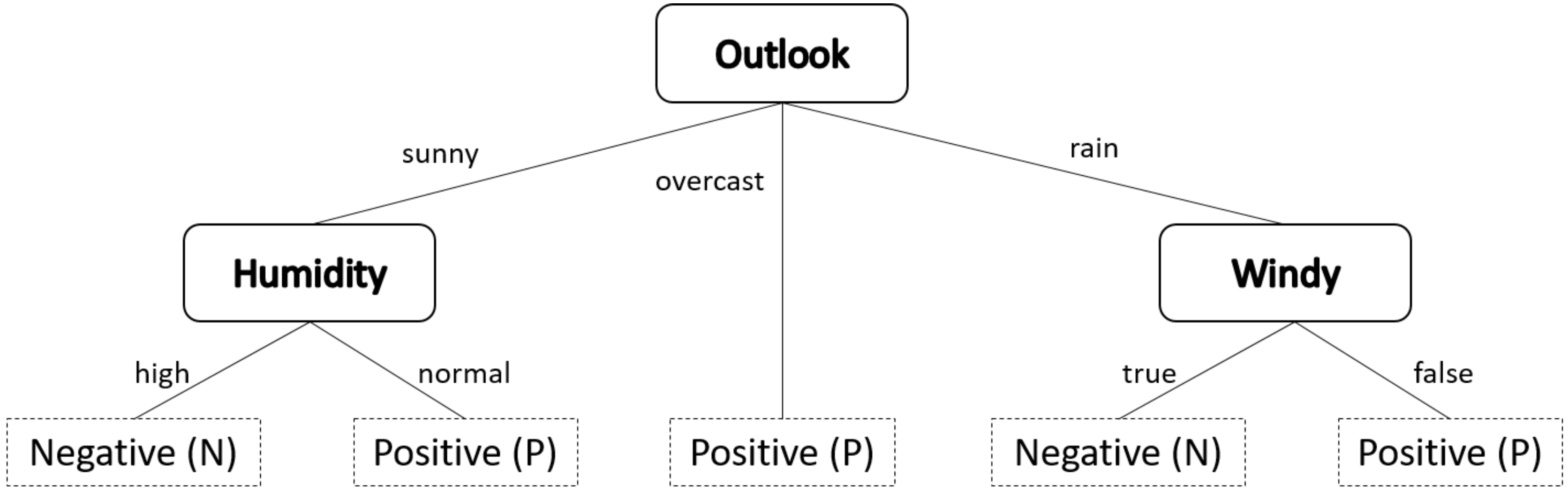
Árvores de decisão

- Na figura, cada atributo leva a uma ramificação até que se atinja um nó folha, onde decide-se sobre jogar ou não.
- O ***uso da árvore para classificar padrões é direto***, mas é preciso responder uma questão crucial: ***como induzir uma árvore de decisão a partir dos dados de treinamento***?



O processo de indução de uma árvore de decisão

- Uma primeira abordagem para induzir uma árvore poderia ser ***construir, de maneira exaustiva***, todas as árvores ***capazes de resolver o problema*** da classificação ou regressão e ***selecionar a mais simples*** (menos complexa) utilizando a ***regra da Navalha de Occam***.
- Entretanto, essa abordagem pode ser computacionalmente muito custosa.

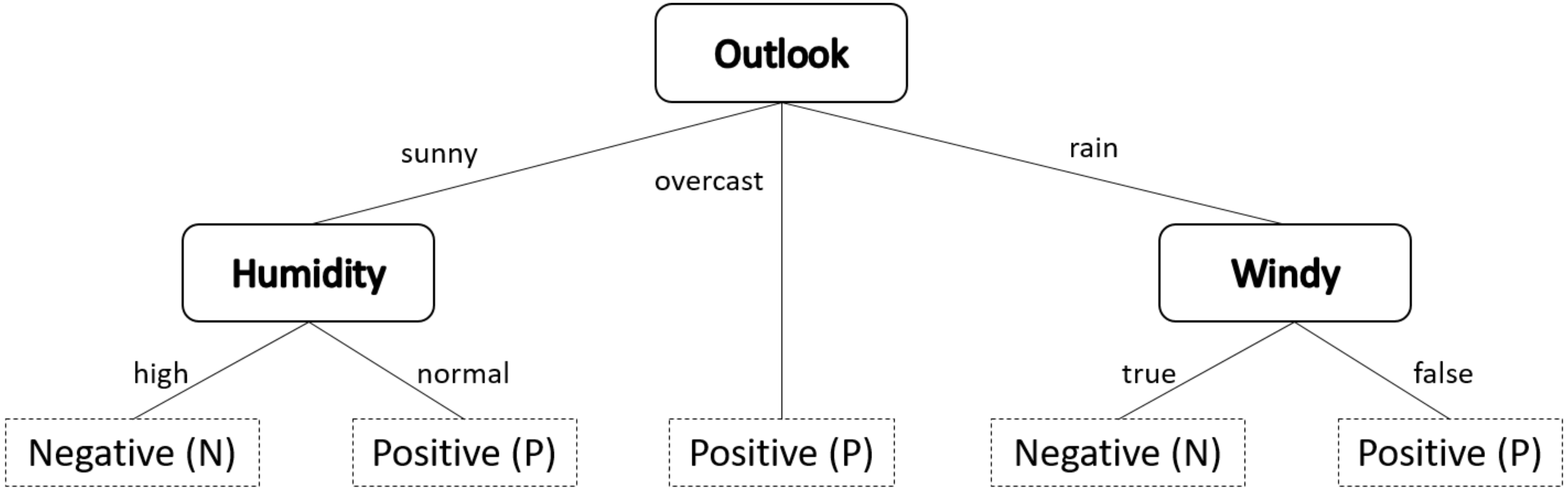


O processo de indução de uma árvore de decisão

- Encontrar uma árvore de decisão ótima é um problema ***tempo polinomial não-determinístico completo*** (NP-completo).
- São problemas:
  - Cuja solução pode ser verificada em tempo polinomial.
    - Um algoritmo roda em tempo polinomial se o tempo necessário para resolver um problema de tamanho n é limitado por uma função polinomial de n.
    - Por exemplo, a inversa de uma matriz $n \times n$ pode ser calculada em n^3.
  - Não se sabe se existe um algoritmo eficiente (polinomial) para **resolver** o problema.
- Exemplos incluem problemas clássicos como da Satisfatibilidade Booleana, Caixeiro Viajante e o Caminho Hamiltoniano.

O processo de indução de uma árvore de decisão

- Como a indução de árvores são problemas NP-completos, em geral, usa-se ***abordagens heurísticas*** para induzir árvores de decisão.
- Dentre os mais conhecidos podemos citar: **ID3**, C4.5, C5.0 e **CART (scikit-learn)**.



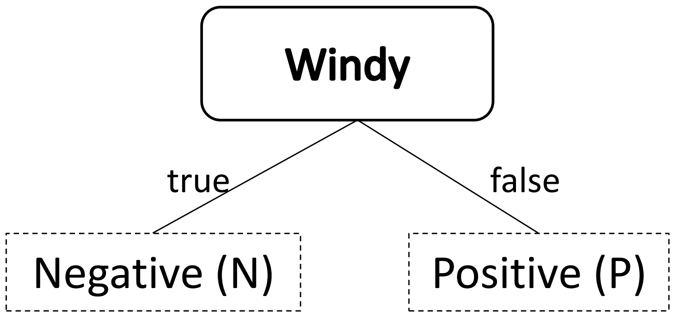
O processo de indução de uma árvore de decisão

- Um dos métodos ***heurísticos*** de indução de árvores de decisão mais utilizados é o ***ID3*** (do inglês, ***Iterative Dichotomiser 3***).
  - ***Heurística:*** estratégia prática para encontrar uma solução rápida e aproximada.
  - ***Dicotomização iterativa*** significa ***dividir-se repetidamente os atributos em duas ou mais classes*** a cada iteração (ou passo).
- O ***método ID3*** é uma abordagem que ***não garante*** a obtenção da ***menor árvore possível***, mas busca obter ***árvores apropriadas num intervalo de tempo relativamente curto***.

O processo de indução de uma árvore de decisão

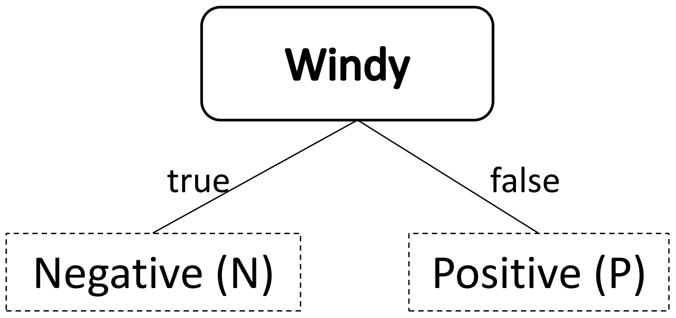
- Ele usa uma ***estratégia gananciosa top-down.***
- Ou seja, a árvore é ***criada de cima para baixo*** e um ***nó é escolhido*** selecionando-se o ***atributo que melhor divide o conjunto de dados naquele momento***.
- Mas como se decide qual é o melhor atributo?
- Qual é a métrica usada?
- O ***método ID3*** se baseia na ***teoria da informação*** para selecionar o melhor atributo de cada nó da árvore.

O processo de indução de uma árvore de decisão



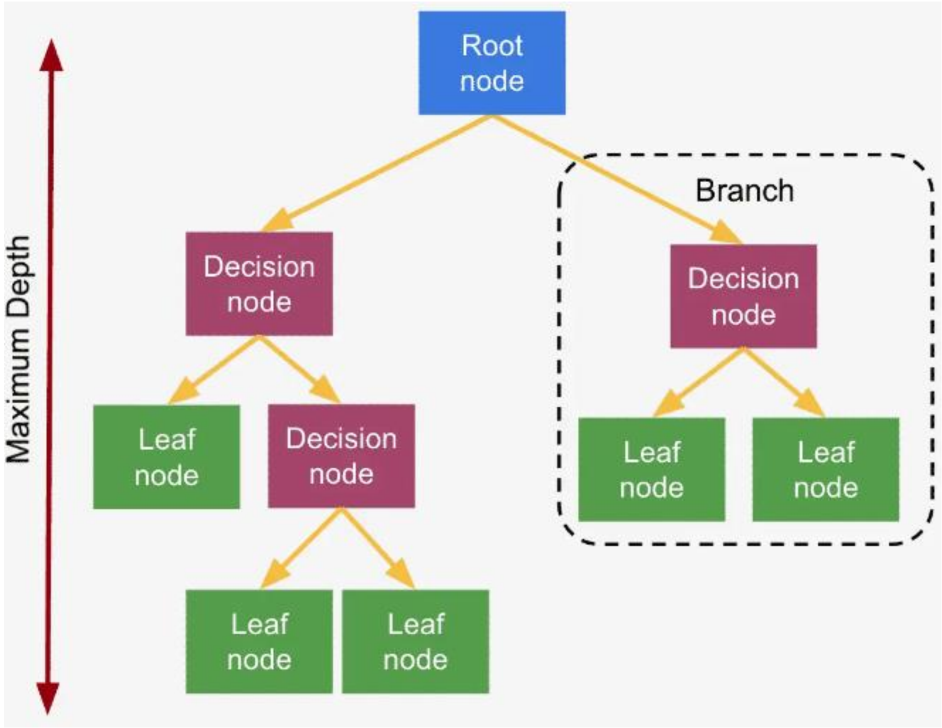
- A ideia do ***método ID3*** é escolher como ***nó*** o ***atributo que for o mais longe possível em dividir os exemplos***.
- Um ***atributo perfeito*** divide perfeitamente todos os exemplos em grupos (ou classes).
- Ou seja, é o atributo que consegue ***explicar perfeitamente o conjunto de dados***.
- Por exemplo, o atributo **Windy** divido as exemplos perfeitamente em duas classes.

O processo de indução de uma árvore de decisão



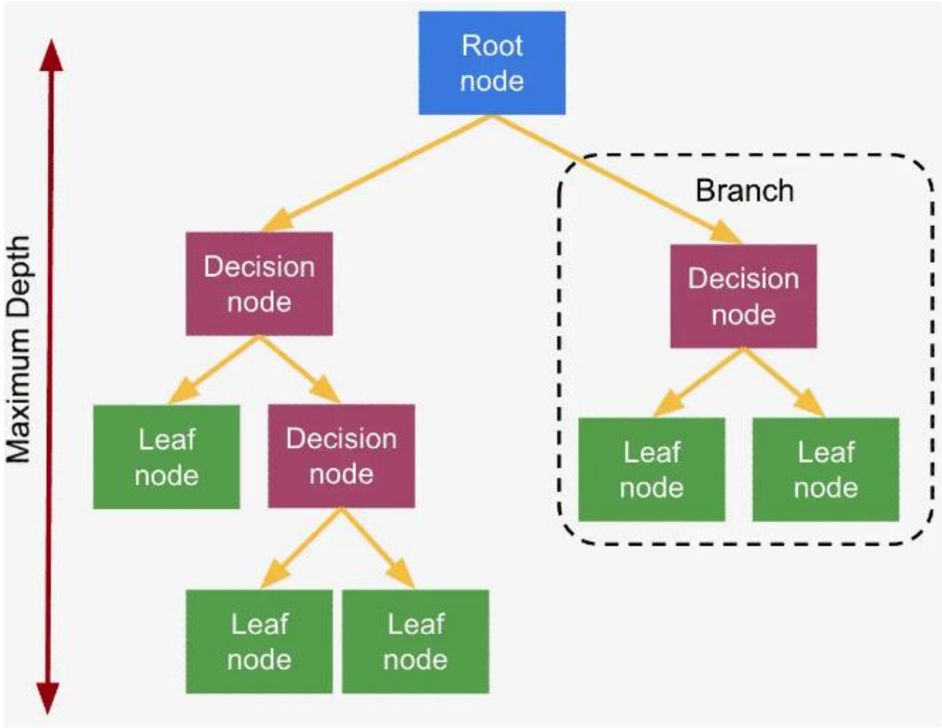
- Então, tudo o que precisamos é uma medida formal de ***atributo razoavelmente bom*** ou ***realmente inútil***.
- O ***método ID3*** utiliza a noção de ***ganho de informação***, o qual é ***definido em termos da entropia***, que é uma quantidade fundamental em ***teoria da informação***.
- A seguir, veremos alguns conceitos úteis para que possamos usar o ***método ID3*** para inferir árvores de decisão.

Ganho de informação



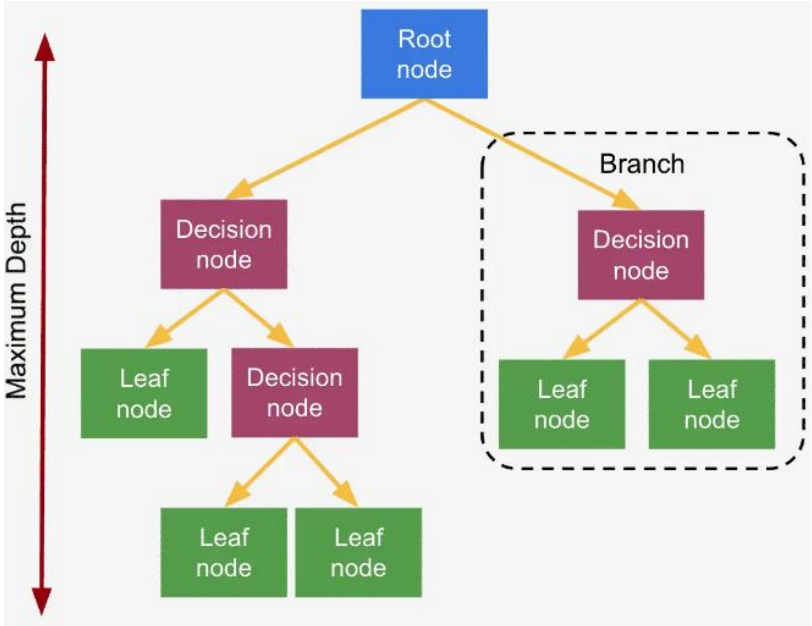
- É uma ***propriedade estatística*** que ***mede o quão bem um determinado atributo separa os exemplos*** de treinamento de acordo com suas classes.
- Portanto, construir uma ***árvore de decisão*** tem tudo a ver com encontrar, a cada momento (i.e., a cada nó), um ***atributo*** que retorne o maior ***ganho de informação***.

Entropia



- É uma medida da ***quantidade de incerteza ou aleatoriedade*** de uma variável aleatória (i.e., um conjunto de dados).
- Portanto, ***um ganho de informação*** corresponde a uma ***redução na entropia***.
- Quando ***ganhamos informação*** sobre o conjunto, a ***incerteza diminui***.
- O ganho é o quanto conseguimos explicar do conjunto com aquele atributo.

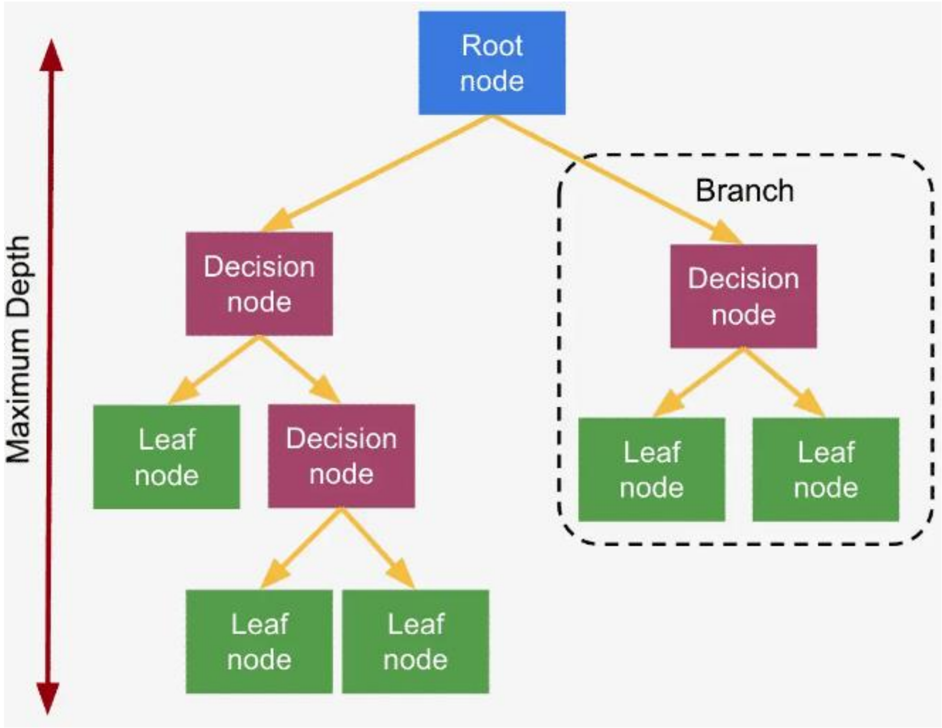
Entropia



- O ***ganho de informação*** nos dá a ***diferença entre a entropia antes e após a divisão do conjunto de dados*** com base nos valores de um determinado atributo.
- Assim, podemos escrever que o ***ganho de informação*** é dado por

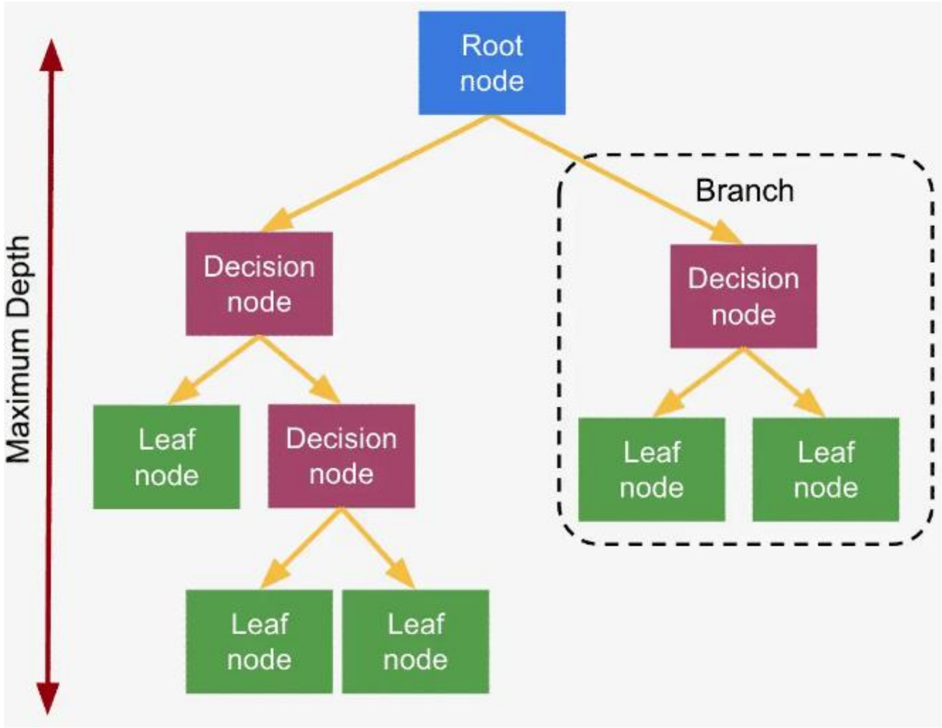
$$Gain = entropiaAntesDaDivisão - entropiaApósADivisão$$

Exemplo de entropia



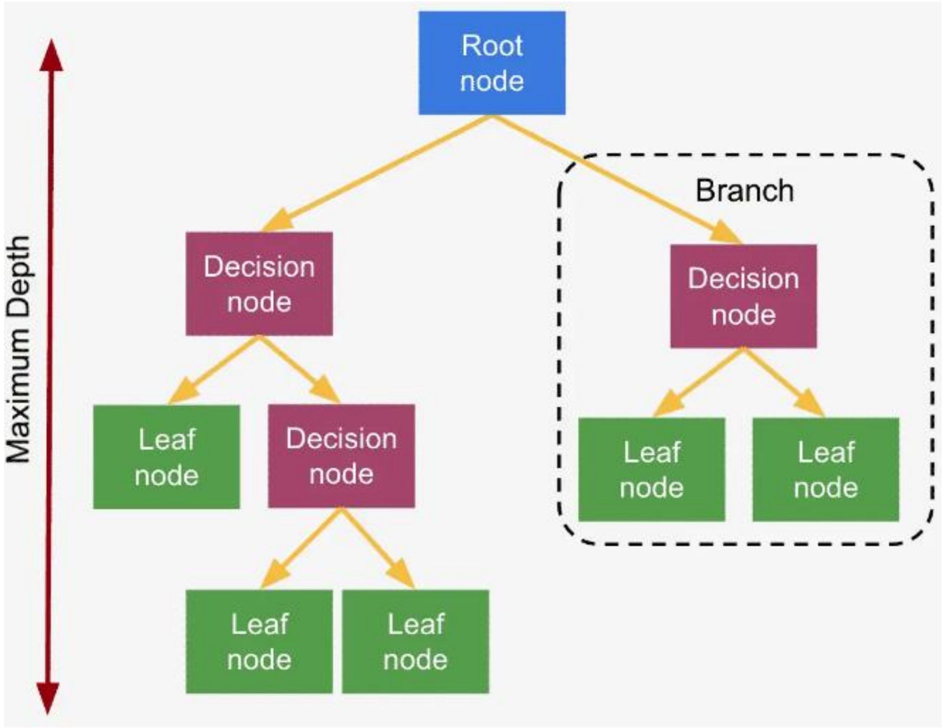
- Uma variável com apenas um único valor (e.g., o arremesso de uma moeda com ***cara*** em ambos os lados) não tem nenhuma ***incerteza*** associada
- Portanto, sua ***entropia é igual a zero***.
- Isso significa que ***não se ganha nenhuma informação nova ao se observar o valor***.

Exemplo de entropia



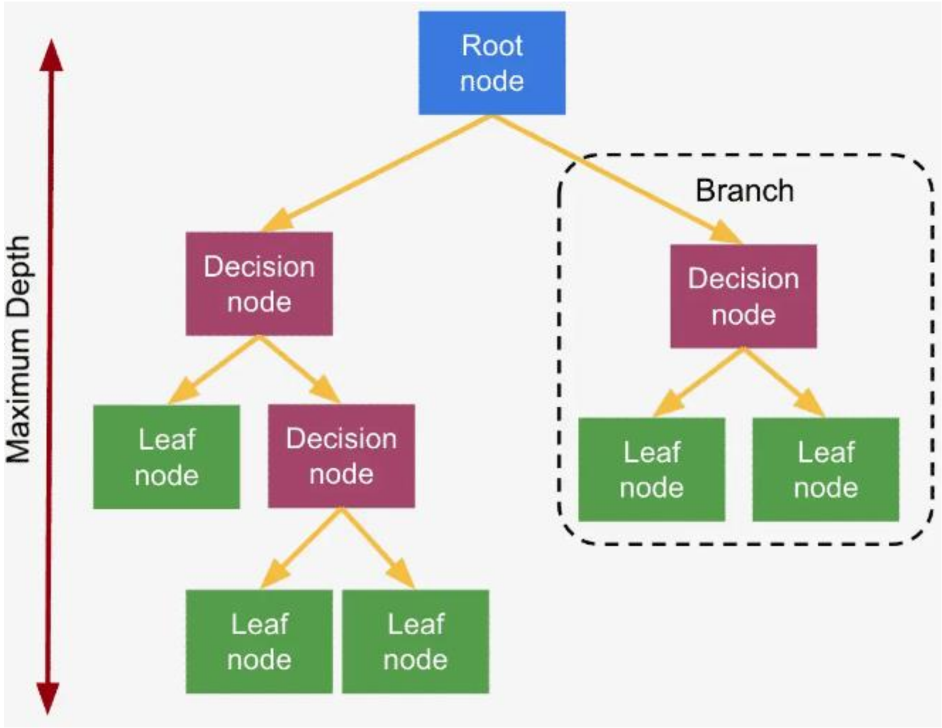
- Por outro lado, o resultado de se arremessar uma ***moeda honesta*** é igualmente provável de resultar em ***cara*** ou ***coroa***, os quais são associados aos valores 0 ou 1, respectivamente.
- Neste caso, esta variável tem ***1 bit de entropia***, significando que se necessita de 1 bit para representar os 2 possíveis resultados.

Exemplo de entropia



- Dessa forma, a variável aleatória que representa o resultado de se rolar um ***dado honesto de 4 lados***, ***tem 2 bits de entropia***, pois necessita-se de 2 bits para se representar os 4 possíveis valores.
- Agora imaginem um ***moeda desonesta*** que tenha uma probabilidade de resultar em ***cara*** em 99% dos arremessos.
- Nesse caso, a ***entropia*** deve ser um ***valor positivo muito próximo de zero***, pois a incerteza do resultado é muito baixa.

Cálculo da entropia



- Assim, a ***entropia*** de uma variável aleatória discreta, V, com valores v_i, onde cada um dos valores tem probabilidade $P(v_i)$, é definida como

$$H(V) = -\sum_i P(v_i)\log_2(P(v_i)).$$

Indução de uma árvore de decisão

- Retornando ao problema da indução de ***árvores de decisão*** nós temos que se um conjunto de treinamento, E, contém p exemplos pertencentes à classe positiva (*P*) e n exemplos pertencentes à classe negativa (*N*), então a ***entropia do objetivo*** (i.e., o rótulo) para todo o conjunto de treinamento é dada por

$$H(Goal) = B\left(\frac{p}{p+n}\right)$$
$$= -\left[\frac{p}{p+n}\log_2\left(\frac{p}{p+n}\right) + \left(1-\frac{p}{p+n}\right)\log_2\left(1-\frac{p}{p+n}\right)\right],$$

onde $B(q)$ é a ***entropia de uma variável booleana que é verdadeira com probabilidade igual a*** q, ou seja

$$B(q) = -\big(q\log_2(q) + (1-q)\log_2(1-q)\big).$$

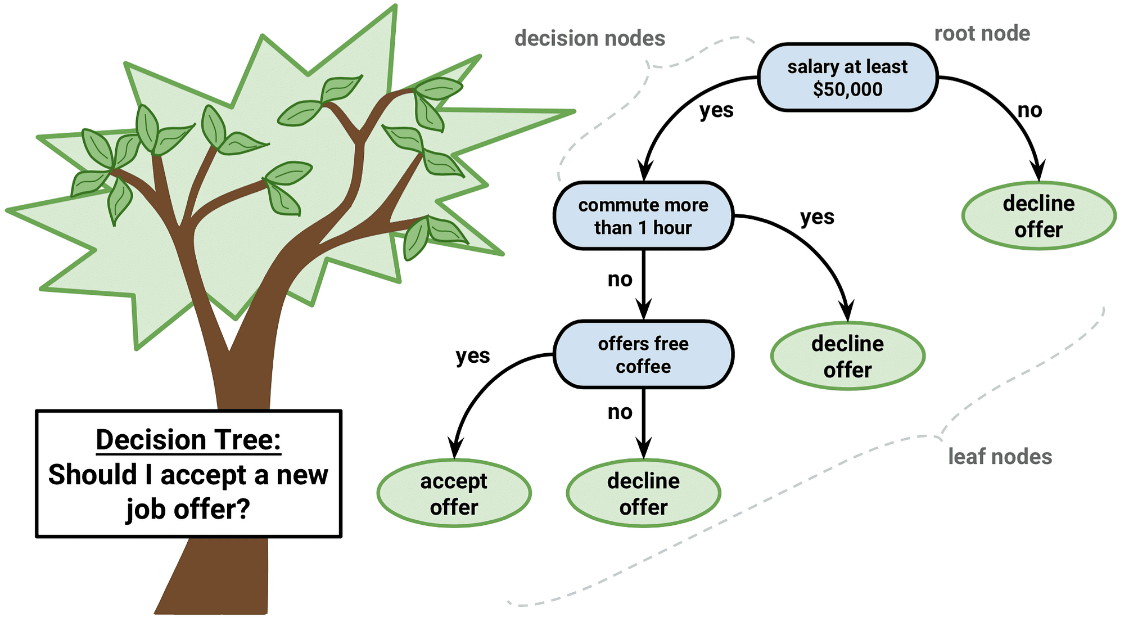
Indução de uma árvore de decisão

- Um teste em um único atributo, x_k, pode nos dar ***toda ou apenas parte da entropia do objetivo***, $H(Goal)$.
- Nós podemos medir exatamente o ***quanto cada atributo contribui para a entropia do objetivo*** através do cálculo da ***entropia restante após o teste do atributo***.
- Um ***atributo*** x_k ***com*** d ***valores distintos divide o conjunto de treinamento*** E ***em*** d ***subconjuntos***: $E_1, \dots, E_d$.
- Cada subconjunto $E_i, i \in \{1, \dots d\}$, possui $p_i, i \in \{1, \dots d\}$, exemplos da classe positiva, *P*, e $n_i, i \in \{1, \dots d\}$, exemplos da classe negativa, *N*.

Indução de uma árvore de decisão

- Um exemplo escolhido aleatoriamente do conjunto de treinamento tem probabilidade igual a $(p_i + n_i)/(p + n)$ de pertencer ao i-ésimo subconjunto, E_i, do atributo x_k.
- Assim, a ***entropia restante*** após o teste do atributo x_k é dada por
$$Remainder(x_k) = \sum_{i=1}^{d} \frac{p_i + n_i}{p + n} B\left(\frac{p_i}{p_i + n_i}\right).$$
- O ***ganho de informação*** com o atributo x_k é a ***redução na entropia do objetivo***, que é dado por
$$Gain(x_k) = B\left(\frac{p}{p + n}\right) - Remainder(x_k) \geq 0.$$

Método ID3



- A ideia por trás do ***método ID3*** é encontrar o ***atributo x_k que maximiza o ganho de informação*** e, então, usar o procedimento ***recursivamente com os demais atributos***.
- Ou seja, escolhe-se o atributo que gera a primeira ramificação e, então, se repete o processo usando os demais atributos para construir o restante da árvore.

Sequência de passos do método ID3

a) Cálculo da ***entropia do objetivo*** para o (sub)conjunto de treinamento ***corrente***.
   - **OBS.**: o (sub)conjunto é alterado a cada nova iteração do método de acordo com o(s) atributo(s) sendo testado(s).

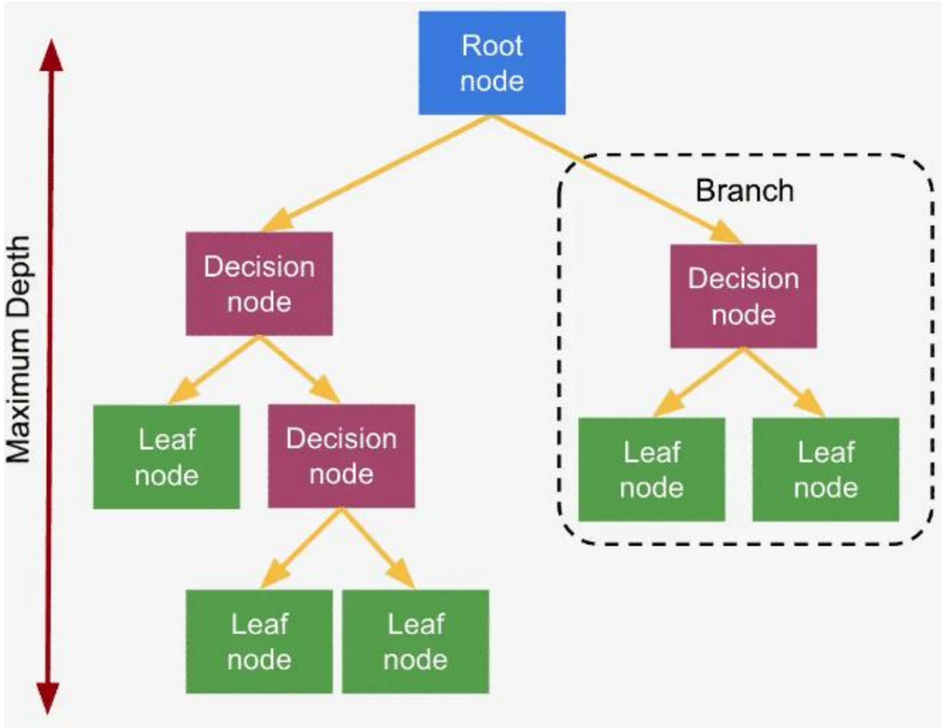
b) Cálculo do ***ganho de informação*** de cada atributo $x_k, k = 1, \dots, K$ do conjunto de treinamento, E.

c) Criação de um nó com o atributo que maximizou o ***ganho de informação***.

d) Particionamento do (sub)conjunto em subconjuntos usando o atributo x_k para o qual o ***ganho de informação*** resultante após a divisão é maximizado.

e) Repetir os itens a) até d) em ***subconjuntos de treinamento*** usando os atributos restantes. Essa sequência ***continua até que a árvore classifique perfeitamente todos os exemplos de treinamento*** ou ***até que todos os atributos tenham sido utilizados***.

Sequência de passos do método ID3

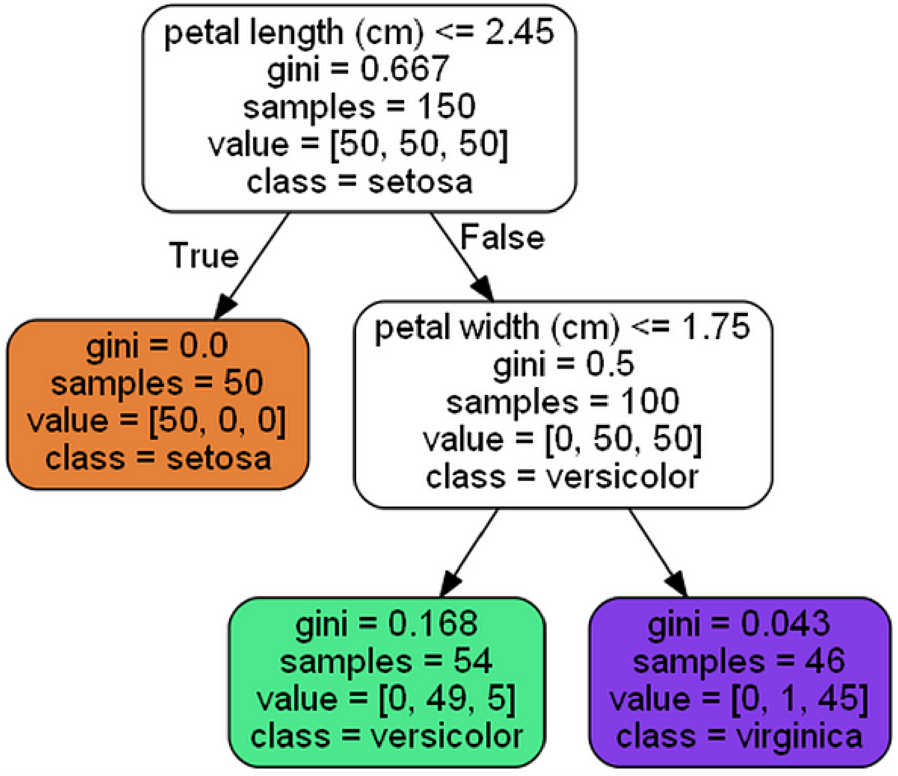


- O ***ID3*** segue a regra: um ***ramo*** com uma ***entropia igual a zero*** é uma ***folha*** e um ***ramo*** com ***entropia maior do que zero precisa de partição adicional***.
- O **método ID3** será exemplificado através do exemplo apresentado em breve.

Características do método ID3

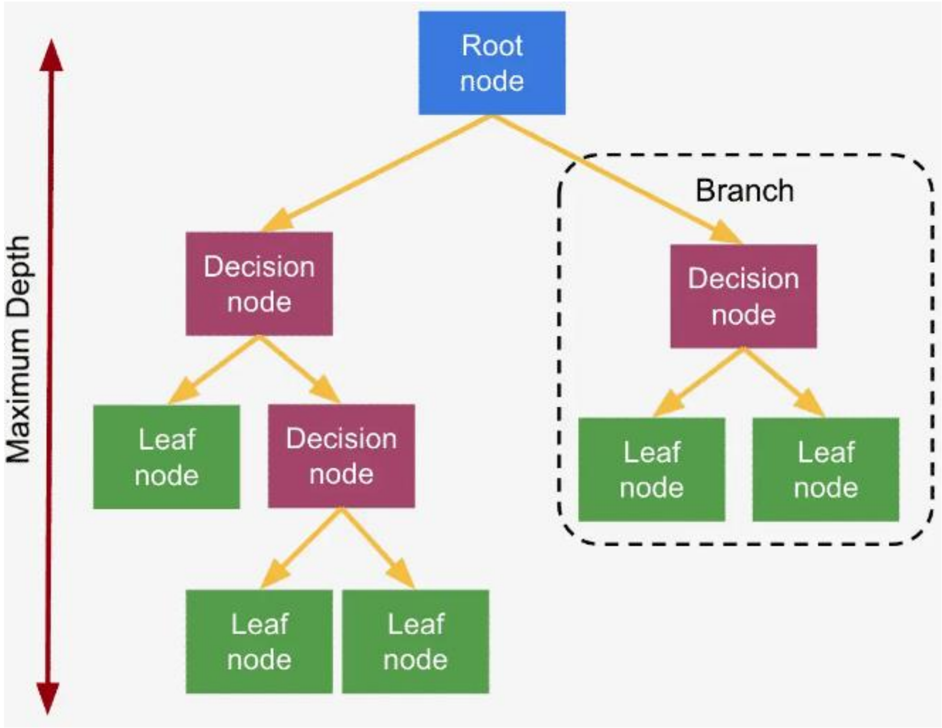
- Por usar uma abordagem baseada em uma ***heurística gananciosa***, o ID3 ***não garante uma solução ideal***.
- Pode sobreajustar aos dados de treinamento
  - Para evitar o sobreajuste, árvores de decisão menores devem ser preferidas ao invés das maiores.
- O método ID3 geralmente produz árvores pequenas, ***mas nem sempre*** produz ***a menor árvore possível***.
- É mais ***difícil de usar com dados contínuos***.
- Se os valores de um atributo forem contínuos, haverá muito mais pontos para se dividir os dados com esse atributo, e a busca pelo melhor valor a ser dividido pode se tornar demorada.

Observações



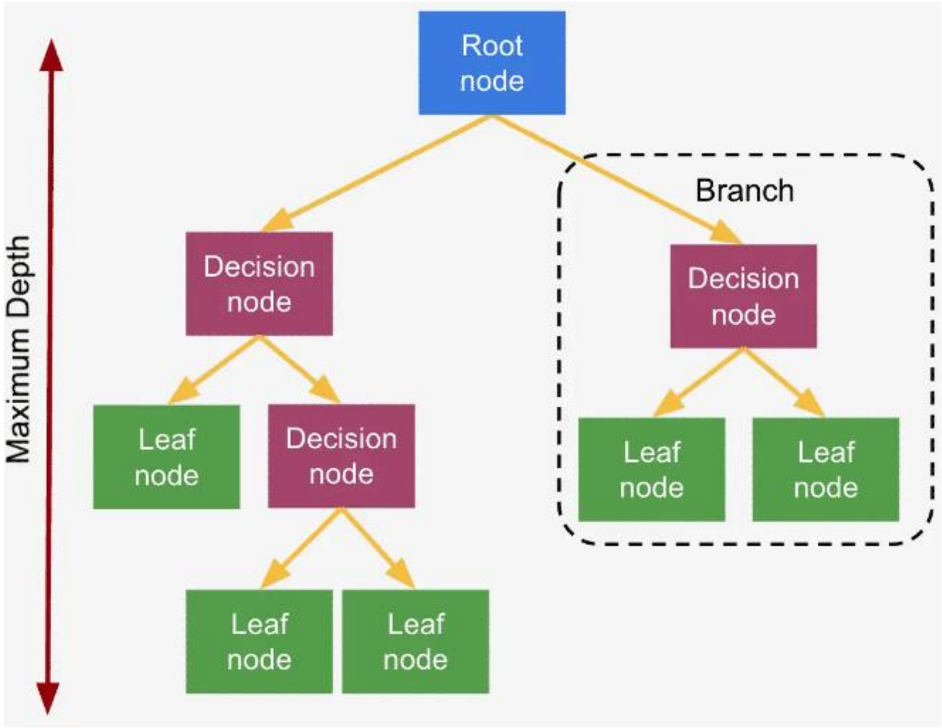
- Além do ***ganho de informação***, existem outras métricas que podem ser usadas para definir as partições.
- Uma possibilidade é usar ***métricas de distância ou divergência***, como o ***índice de Gini***.
- Outro ponto importante é, se for o caso, deve-se buscar metodologias para se lidar com atributos faltantes.
- Existem várias soluções, como por exemplo:
  - Remover o exemplo.
  - Atribuir ao atributo a média de seus valores.

Observações



- O conjunto de treinamento é a base para definirmos a ***árvore de decisão***.
- Um conjunto que contenha inconsistências, como, por exemplo, ***dois exemplos com os mesmos valores de atributos, porém classes diferentes***, precisará ser reconsiderado, pois os atributos podem não ser suficientes, por exemplo, ***precisando de mais atributos***.

Observações



- Um problema muito comum das ***árvores de decisão***, especialmente quando se tem um número muito grande de atributos, é o ***sobreajuste (alta variância)***.
- Existem duas formas para se minimizar este problema
  - Podar as árvores de decisão (***tree prunning***).
  - Ou utilizar ***florestas aleatórias***.

Exemplo de Árvore de Decisão com método ID3

- Vamos construir uma árvore de decisão para ***predizer se jogadores irão ou não praticar um determinado esporte*** baseado em algumas ***condições meteorológicas***.
- Vamos considerar um conjunto de dados da forma $(\boldsymbol{x}_i, d_i)$, onde $\boldsymbol{x}_i$ é um vetor de atributos e d_i é um rótulo correspondente ao vetor de atributos.
- Nesse conjunto, cada entrada diz respeito à condição meteorológica de um dia e se os jogadores jogaram ou não.
- Existem ***quatro*** atributos categóricos:
  - **Tempo**: {ensolarado, nublado, chuvoso}
  - **Temperatura**: {frio, agradável, quente}
  - **Umidade**: {alta, normal}
  - **Vento**: {presente, ausente}
- Os rótulos são apenas 2: ***positivo*** (*P*), ou seja, jogar, e ***negativo*** (*N*), ou seja, não jogar, denotando um problema binário.
- Um exemplo de condição meteorológica de um determinado dia poderia ser descrito por: {nublado, frio, normal, ausente}.

Exemplo de Árvore de Decisão com método ID3

- O conjunto de treinamento do exemplo é dado pela tabela abaixo.

Day	**Attributes**				**Class** (y)
	Outlook	**Temperature**	**Humidity**	**Windy**	
1	sunny	hot	high	false	N
2	sunny	hot	high	true	N
3	overcast	hot	high	false	P
4	rain	mild	high	false	P
5	rain	cool	normal	false	P
6	rain	cool	normal	true	N
7	overcast	cool	normal	true	P
8	sunny	mild	high	false	N
9	sunny	cool	normal	false	P
10	rain	mild	normal	false	P
11	sunny	mild	normal	true	P
12	overcast	mild	high	true	P
13	overcast	hot	normal	false	P
14	rain	mild	high	true	N

Exemplo de Árvore de Decisão com método ID3

- A ***entropia do objetivo***, i.e., y, para todo o conjunto de treinamento é

$$H(y) = -\left[\frac{9}{14}\log_2\left(\frac{9}{14}\right) + \left(1-\frac{9}{14}\right)\log_2\left(1-\frac{9}{14}\right)\right] = 0.9403.$$

- Encontrando o nó raíz: o ***ganho de informação*** de cada atributo é calculado como

		Jogar?		
		P	N	
Outlook	sunny	2	3	5
	overcast	4	0	4
	rain	3	2	5
				14

		Jogar?		
		P	N	
Temperature	hot	2	2	4
	mild	4	2	6
	cool	3	1	4
				14

		Jogar?		
		P	N	
Humidity	high	3	4	7
	normal	6	1	7
				14

		Jogar?		
		P	N	
Windy	true	3	3	6
	false	6	2	8
				14

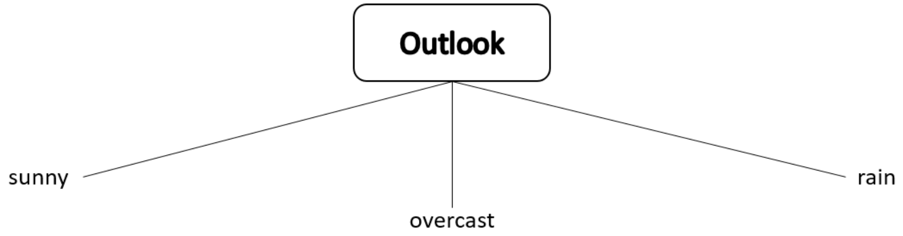
$$Gain(\textbf{outlook}) = 0.9403 - \left[\frac{5}{14}B\left(\frac{2}{5}\right) + \frac{4}{14}B(1) + \frac{5}{14}B\left(\frac{3}{5}\right)\right] = \boxed{0.247}$$

$$Gain(\textbf{temperature}) = 0.9403 - \left[\frac{4}{14}B\left(\frac{2}{4}\right) + \frac{6}{14}B\left(\frac{4}{6}\right) + \frac{4}{14}B\left(\frac{3}{4}\right)\right] = 0.029$$

$$Gain(\textbf{humidity}) = 0.9403 - \left[\frac{7}{14}B\left(\frac{3}{7}\right) + \frac{7}{14}B\left(\frac{6}{7}\right)\right] = 0.1518$$

$$Gain(\textbf{windy}) = 0.9403 - \left[\frac{6}{14}B\left(\frac{3}{6}\right) + \frac{8}{14}B\left(\frac{6}{8}\right)\right] = 0.04813$$

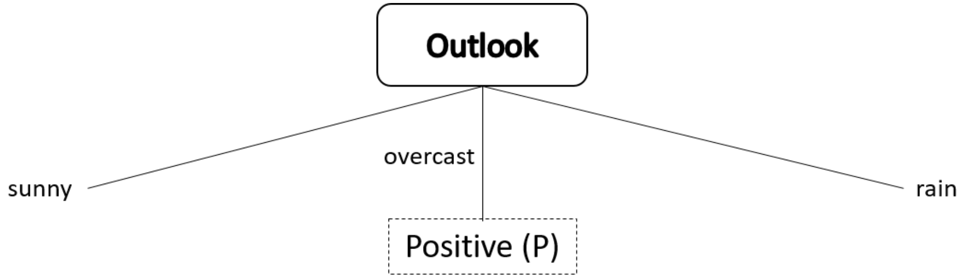
O ***ganho de informação*** é maximizado com o atributo ***outlook***, que é, portanto, escolhido como o nó raíz da árvore.



Exemplo de Árvore de Decisão com método ID3

- Agora, criamos subconjuntos para cada um dos valores do atributo ***Outlook*** (i.e., overcast, sunny e rain) e refazemos os cálculos do ***ganho de informação*** para cada um deles.
- Quando ***Outlook = overcast***, vemos no subconjunto abaixo que os valores dos outros atributos não importam, sendo a classe escolhida sempre a ***Positiva*** (*P*), ou seja, a decisão será sempre pela classe Positiva se o tempo estiver nublado.
- A ***entropia*** nessa caso é igual a zero (pois não há incerteza), indicando uma ***folha*** da árvore.
- Portanto, encontramos a folha deste ramo.

Day	**Attributes**				**Class (y)**
	Outlook	**Temperature**	**Humidity**	**Windy**	
3	overcast	hot	high	false	P
7	overcast	cool	normal	true	P
12	overcast	mild	high	true	P
13	overcast	hot	normal	false	P



Exemplo de Árvore de Decisão com método ID3

- Quando ***Outlook = rain***

Outlook = rain		Jogar? P	Jogar? N	
Temperature	hot	0	0	0
	mild	2	1	3
	cool	1	1	2
				5

Outlook = rain		Jogar? P	Jogar? N	
Humidity	high	1	1	2
	normal	2	1	3
				5

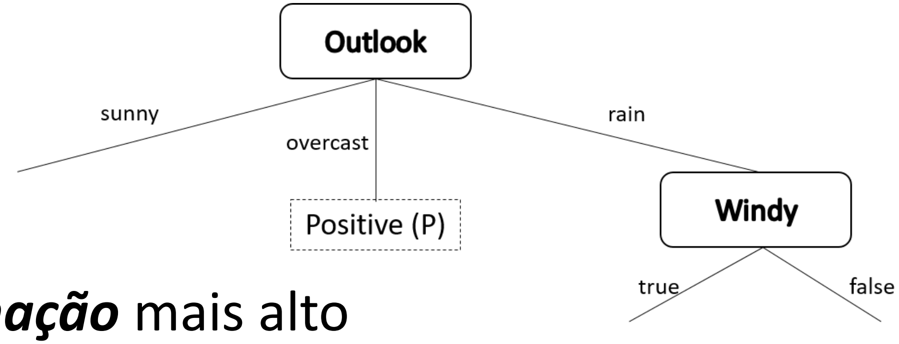
Outlook = rain		Jogar? P	Jogar? N	
Windy	true	0	2	2
	false	3	0	3
				5

Entropia do objetivo para o subconjunto $\mathbf{Outlook = rain}$: $H(y \mid \mathbf{Outlook = rain}) = 0.971$

$$Gain(\mathbf{temperature}) = 0.971 - \left[\frac{0}{5}B\left(\frac{0}{0}\right) + \frac{3}{5}B\left(\frac{2}{3}\right) + \frac{2}{5}B\left(\frac{1}{2}\right)\right] = 0.02$$

$$Gain(\mathbf{humidity}) = 0.971 - \left[\frac{2}{5}B\left(\frac{1}{2}\right) + \frac{3}{5}B\left(\frac{2}{3}\right)\right] = 0.02$$

$$Gain(\mathbf{windy}) = 0.971 - \left[\frac{2}{5}B\left(\frac{0}{2}\right) + \frac{3}{5}B\left(\frac{3}{3}\right)\right] = \boxed{0.971}$$



- Aqui, o atributo ***windy*** resulta no valor de ***ganho de informação*** mais alto quando o tempo estiver chuvoso (i.e., ***Outlook = rain***).
- Por isso, o atributo ***windy*** será o nó do 2º nível da árvore, no ramo **rain** de **Outlook**.

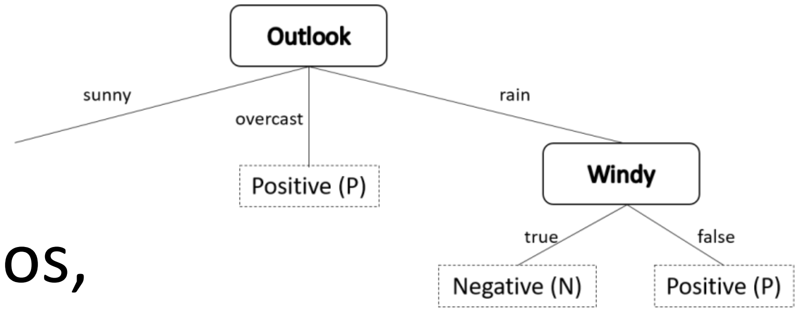
Exemplo de Árvore de Decisão com método ID3

- Se analisarmos o subconjunto onde ***Outlook = rain*** e ***windy = false***, percebemos que a decisão será sempre pela classe ***Positiva*** (*P*). A entropia H(y|Outlook = rain, windy = false) = 0.

Day	Attributes				Class (y)
	Outlook	Temperature	Humidity	Windy	
4	rain	mild	high	false	P
5	rain	cool	normal	false	P
10	rain	mild	normal	false	P

- Além disso, a decisão sempre será pela classe Negativa (*N*) se ***Outlook = rain*** e **windy = true**. A entropia H(y|Outlook = rain, windy = false) = 0.

Day	Attributes				Class (y)
	Outlook	Temperature	Humidity	Windy	
6	rain	cool	normal	true	N
14	rain	mild	high	true	N



- Portanto, encontramos as folhas para os dois ramos, ***true*** e ***false*** do nó ***windy***.

Exemplo de Árvore de Decisão com método ID3

- Quando ***Outlook = sunny***

Outlook = sunny		Jogar?		
		P	N	
Temperature	hot	0	2	2
	mild	1	1	2
	cool	1	0	1
				5

Outlook = sunny		Jogar?		
		P	N	
Humidity	high	0	3	3
	normal	2	0	2
				5

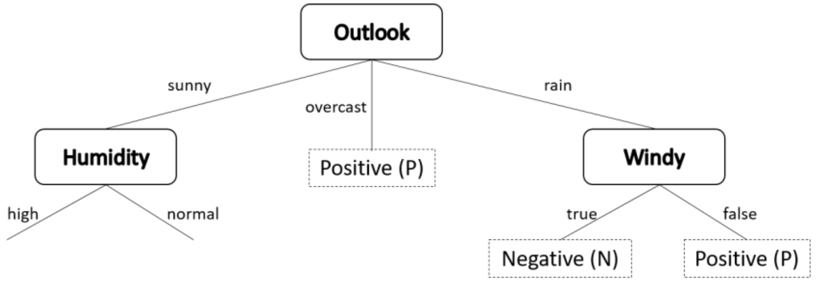
Outlook = sunny		Jogar?		
		P	N	
Windy	true	1	1	2
	false	1	2	3
				5

Entropia do objetivo para o subconjunto dado por **Outlook=sunny**: $H(y \mid \textbf{Outlook} = \textbf{sunny}) = 0.971$

$$Gain(\textbf{temperature}) = 0.971 - \left[\frac{2}{5}B\left(\frac{0}{2}\right) + \frac{2}{5}B\left(\frac{1}{2}\right) + \frac{1}{5}B\left(\frac{1}{1}\right)\right] = 0.570$$

$$Gain(\textbf{humidity}) = 0.971 - \left[\frac{3}{5}B\left(\frac{0}{3}\right) + \frac{2}{5}B\left(\frac{2}{2}\right)\right] = \boxed{0.971}$$

$$Gain(\textbf{windy}) = 0.971 - \left[\frac{2}{5}B\left(\frac{1}{2}\right) + \frac{3}{5}B\left(\frac{1}{3}\right)\right] = 0.02$$



- Aqui, o atributo ***humidity*** resulta no ***ganho de informação*** mais alto quando o tempo estiver ensolarado (i.e., ***Outlook = sunny***).
- Por isso, o atributo ***humidity*** será o nó do 2º nível da árvore no ramo ***sunny***.

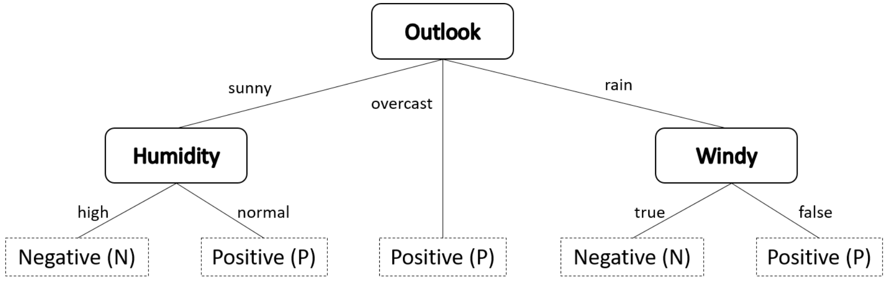
Exemplo de Árvore de Decisão com método ID3

- Analisando o subconjunto onde ***Outlook = sunny*** e ***humidity = normal***, percebemos que a decisão será sempre pela classe ***Positiva*** (*P*). A entropia H(y|Outlook = sunny, humidity = normal) = 0.

Day	Attributes				Class (y)
	Outlook	**Temperature**	**Humidity**	**Windy**	
9	sunny	cool	normal	false	P
11	sunny	mild	normal	true	P

- Além disso, a decisão sempre será pela classe ***Negativa*** (*N*) se ***Outlook = sunny*** e ***humidity = high***. A entropia H(y Outlook = sunny, humidity = high) = 0

Day	Attributes				Class (y)
	Outlook	**Temperature**	**Humidity**	**Windy**	
1	sunny	hot	high	false	N
2	sunny	hot	high	true	N
8	sunny	mild	high	false	N



- Portanto, encontramos as folhas para os dois ramos, ***normal*** e ***high*** do nó ***humidity***.
- Com isso, a construção da ***árvore de decisão*** se encerra e podemos usar as regras encontradas por ela para classificar novos exemplos.
- Algum atributo ficou de fora? Sim, **Temperature**, indicando que ele não traz informação.

Exercício

- Lista #7:
  - Exercício #1 (Árvores de Decisão)

Considerações sobre as Árvores de Decisão

- Uma ***árvore de decisão*** ***infere através dos exemplos do conjunto de treinamento uma sequência de regras*** que classifica os exemplos de entrada.
  - Portanto, elas são ***fáceis de serem interpretadas*** (modelos de ***caixa branca***).
  - Podem ser facilmente interpretadas como uma ***estrutura de controle de fluxo***.
- Embora as ***árvores de decisão*** sejam poderosos algoritmos de ***classificação***, elas apresentam um ***longo tempo de treinamento, principalmente quando os atributos são contínuos***.
- Em casos onde as classes são separadas por ***fronteiras de decisão não-lineares***, as ***árvores de decisão apresentam um desempenho de classificação superior ao apresentado por classificadores lineares***.
  - ***Exemplo***: DTTwoConcentricClassesClassification.ipynb

Considerações sobre as Árvores de Decisão

- Entretanto, quando as ***classes não são bem separadas*** (ou seja, se elas se sobrepõem), ***as árvores são suscetíveis a sobreajustar*** ao conjunto de treinamento, de modo que a ***fronteira de decisão linear*** dos ***classificadores lineares*** separa melhor as classes, apresentando melhor desempenho de ***classificação***.
  - ***Exemplo***: DTTwoOverlappingClassesClassification.ipynb
- Para evitar ***sobreajuste***, existem duas maneiras:
  1. Limitamos sua profundidade e/ou o número mínimo de amostras necessárias em um nó folha.
  2. Geramos primeiro uma árvore completa e, em seguida, eliminamos alguns ramos (i.e., podamos a árvore).
- ***Árvores de decisão precisam de muito pouco pré-processamento dos dados***. Em particular, elas não necessitam de ***escalonamento dos atributos***, mas ***valores faltantes devem ser tratados de alguma forma***.

Considerações sobre as Árvores de Decisão

- O ***principal problema*** das ***árvores de decisão*** é que elas ***são muito sensíveis a pequenas variações nos dados de treinamento*** (e.g., rotação).
- ***Árvores de decisão*** criam ***fronteiras de decisão ortogonais*** (i.e., todas as ***fronteiras de decisão*** são perpendiculares aos eixos), o que as torna ***sensíveis à rotação do conjunto de treinamento***.
  - ***Exemplo***: DTSensitivityToTrainingSetRotation.ipynb
  - Uma maneira para minimizar esse problema é usar a técnica conhecida como ***Análise de Componentes Principais (PCA)***, que rotaciona e dimensiona linearmente a matriz de atributos.
- Alguns ***algoritmos para inferência de árvores de decisão são estocásticos*** (e.g., o CART seleciona aleatoriamente o conjunto de atributos para avaliar em cada nó) e, portanto, ***podem gerar árvores completamente diferentes com o mesmo modelo e conjunto de dados, mas sementes aleatórias diferentes***.
  - ***Exemplo***: DTSensitivityToTrainingSetDetails.ipynb
  - As ***florestas aleatórias*** podem limitar essa instabilidade calculando a média das previsões feitas por diversas ***árvores de decisão***.

Considerações sobre as Árvores de Decisão

- Se não for restringida, a estrutura de uma ***árvore de decisão*** se adaptará aos dados de treinamento, ajustando-se muito bem e, provavelmente, se ***sobreajustando*** a eles.
  - Esse modelo é frequentemente chamado de modelo ***não-paramétrico***, não porque não tenha nenhum parâmetro (ele geralmente tem muitos), mas porque o ***número de parâmetros não é determinado antes do treinamento***, de modo que a estrutura do modelo é livre para se adaptar aos dados.
  - Para evitar o ***sobreajuste*** do modelo aos dados de treinamento, nós precisamos restringir (pode ser visto como ***uma forma de regularização***) a liberdade da árvore de decisão durante o treinamento.
  - No Scikit-Learn, a regularização pode ser controlada pelos hiperparâmetros: ***max_depth***, ***min_samples_split***, ***min_samples_leaf***, ***min_weight_fraction_leaf***, ***max_leaf_nodes*** e ***max_features***.
  - ***Exemplo***: DTRegularizationHyperparameters.ipynb

Considerações sobre as Árvores de Decisão

- ***Árvores de decisão*** também podem ser utilizadas para ***regressão***.
  - Assim como em tarefas de ***classificação***, as ***árvores de decisão*** tendem a se ***sobreajustar*** ao conjunto de treinamento ao lidar com tarefas de ***regressão***.
  - ***Exemplo***: DTNoisyQuadraticDatasetRegression.ipynb
- Predições feitas por ***árvores de decisão*** não são suaves nem contínuas, mas ***aproximações constantes por partes/trechos***, conforme visto na figura ao lado.
- O valor previsto para cada trecho é sempre o valor médio dos exemplos nesse trecho.

Classificação com árvores de decisão e SciKit-Learn

Exemplo: DTTwoConcentricClassesClassification.ipynb

```python
# Import all necessary libraries.
import numpy as np
from sklearn.tree import DecisionTreeClassifier
from sklearn.model_selection import train_test_split
from sklearn.datasets import make_blobs
from sklearn.metrics import accuracy_score
```

Importa a classe DecisionTreeClassifier.

```python
# Define the number of examples.
N = 1000
# Create the dataset.
x, y = make_circles(n_samples=N, random_state=42, noise=0.1, factor=0.2)
```

Cria duas classes concêntricas com a função ***make_circles***.

```python
# Split array into random train and test subsets.
x_train, x_test, y_train, y_test = train_test_split(x, y, random_state=23, test_size=0.2)
```

Divide o conjunto em subconjuntos de treinamento (80%) e teste (20%).

```python
# Instantiate classifier.
clf = DecisionTreeClassifier(criterion='entropy')
```

Instancia classificador. Não suporta atributos categóricos, apenas contínuos

```python
# Fit the classifier on the training features and labels.
clf.fit(x_train, y_train)
```

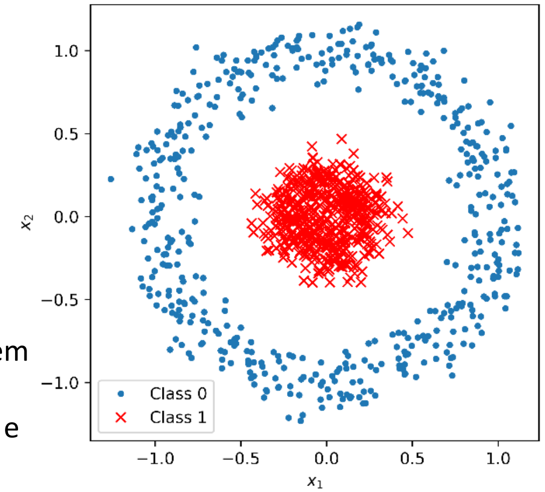
Treina o classificador.

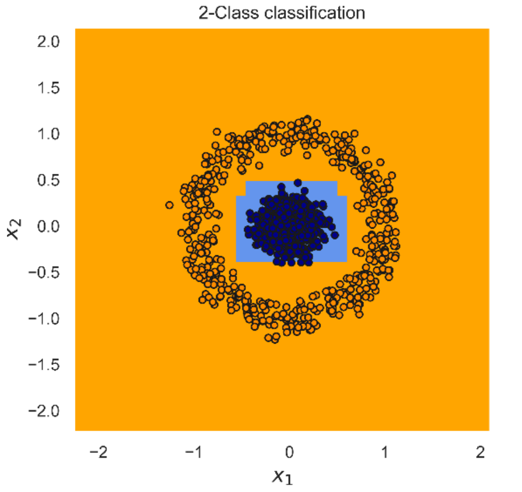
```python
# Use the trained classifier to predict labels for the test features.
y_pred = clf.predict(x_test)
```

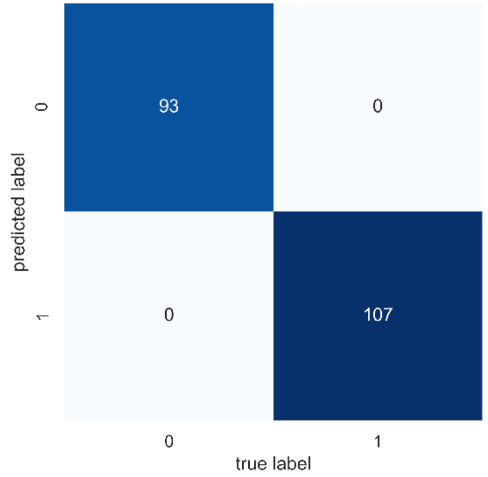
Realiza predição com conjunto de testes.

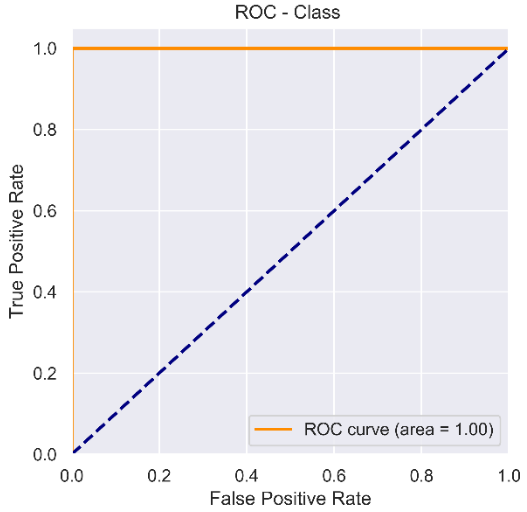
```python
# Calculate and return the accuracy on the test data
accuracy = accuracy_score(y_test, y_pred)
```

Calcula a performance do classificador no conjunto de teste.









Exemplo de classificação de 2 classes concêntricas. As figuras mostram a distribuição das classes, fronteira de decisão, matriz de confusão e curva ROC. Conforme podemos ver a classificação do conjunto de testes é perfeita.

Regressão com árvores de decisão e SciKit-Learn

```python
# Import the necessary modules and libraries.
from sklearn.model_selection import train_test_split
from sklearn.tree import DecisionTreeRegressor
from sklearn.metrics import mean_squared_error
from sklearn.model_selection import GridSearchCV
from sklearn.datasets import make_regression

# Create datase.
X, y = make_regression(n_samples=1000, n_features=1, n_informative=1, random_state=42, noise=5)

# Split the dataset.
X_train, X_test, y_train, y_test = train_test_split(X, y, test_size=0.2, random_state=42)

# Set parameters for grid-search.
param_grid = [{'max_depth': [1, 2, 3, 4, 5, 6, None], 'min_samples_leaf': [1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9]}]

# Instantiate DT class.
reg = DecisionTreeRegressor(random_state=42)
grid_search = GridSearchCV(reg, param_grid, cv=5, verbose=3, n_jobs=-1)

# Find best hyperparameters.
grid_search.fit(X_train, y_train)

# Print best parameters.
print(grid_search.best_params_)

# Predicting with test set.
y_pred = grid_search.predict(X_test)

# Calculate MSE.
mse = mean_squared_error(y_test, y_pred)
```

Importa a classe DecisionTreeRegressor.

Cria dados para a regressão com a função make_regression.

Divide o conjunto em subconjuntos de treinamento (80%) e teste (20%).

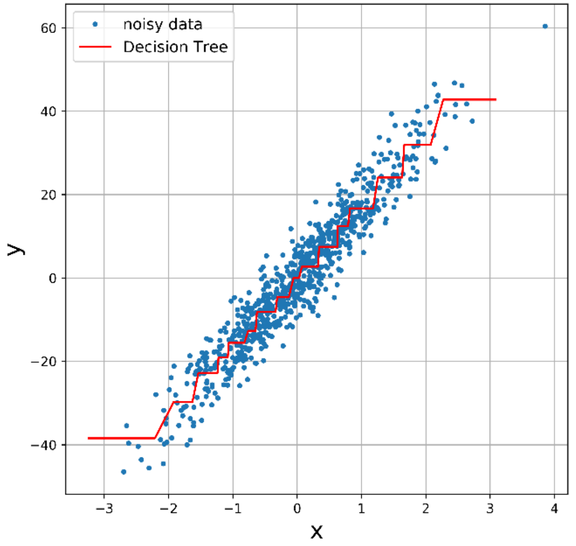
Lista de valores a serem testados.

Executa o grid search.

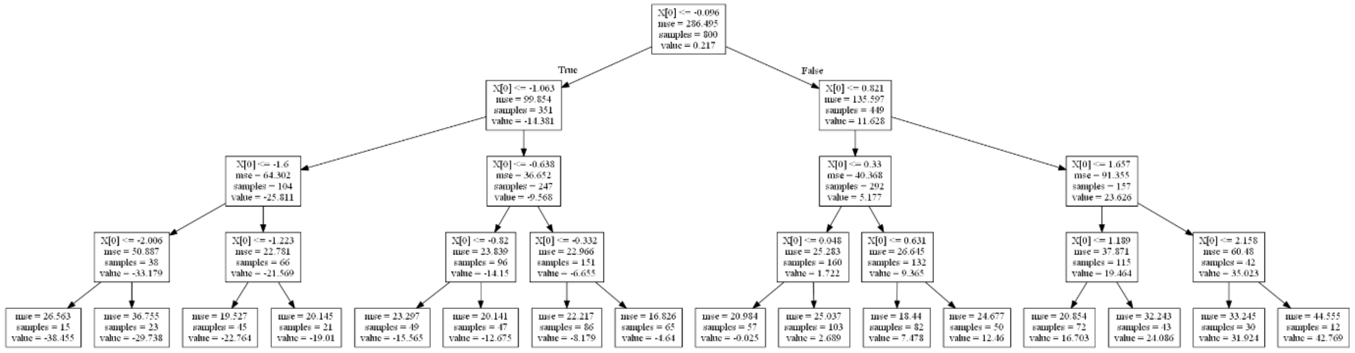
Imprime os valores ótimos dos hiperparâmetros.

Realiza predição com conjunto de testes.

Calcula a performance com conjunto de teste.



Exemplo: DTMakeRegression.ipynb



Exemplo de ***regressão*** utilizando ***GridSearch*** para encontrar os valores ótimos para os hiperparâmetros 'max_depth' e 'min_samples_leaf'. As figuras acima mostram os dados ruidosos, a curva de regressão e a árvore de decisão do regressor.

Avisos

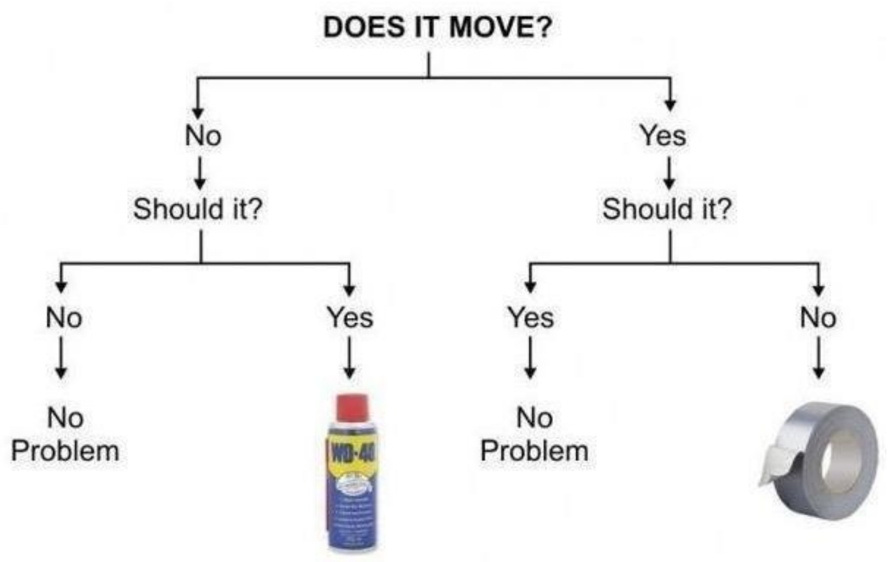
- Nossa próxima aula será um estudo dirigido sobre ***florestas aleatórias*** (Lista #8) e ***k-Means*** (Lista #9).
- Material se encontra no github.

Material das aulas

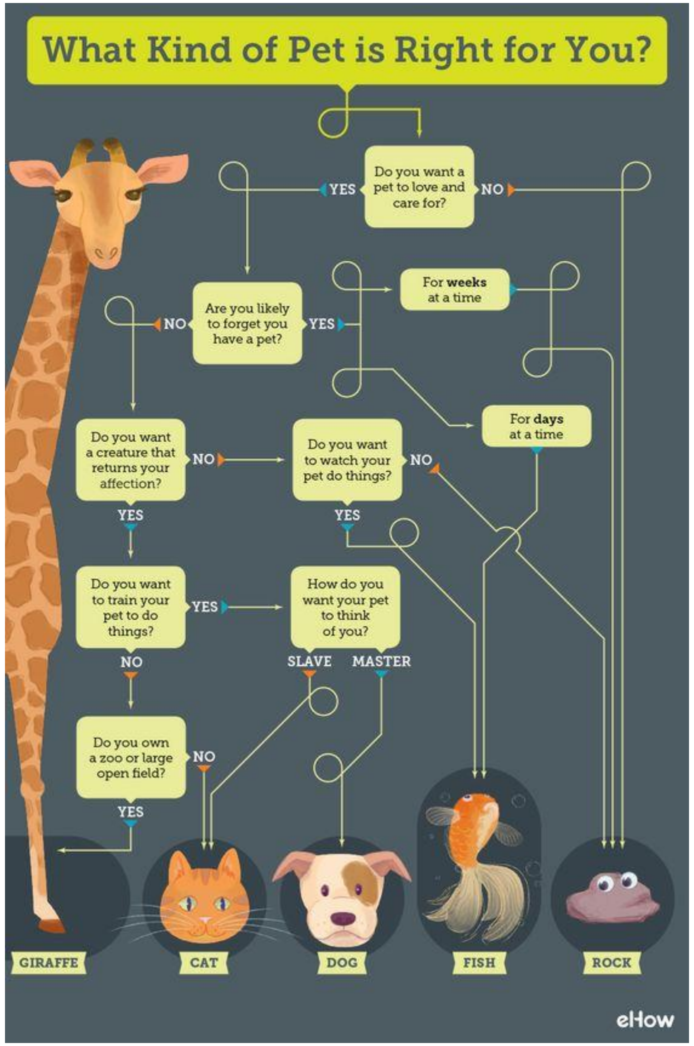
O material das aulas pode ser encontrado na pasta **slides** e pode ser acessado através dos links abaixo.

1. Introdução
2. Regressão Linear
3. Regressão Não-Linear
4. Classificação
5. kNN
6. Decision Trees
7. Ensemble Learning e Random Forests
8. k-Means

Obrigado!


DOES IT MOVE?
No
Yes
Should it?
Should it?
No
Yes
Yes
No
No Problem
No Problem


MUST I EXERCISE?
DO I WANT TO GO FOR A JOG?
YES
NO
Did I get enough sleep?
Am I just being lazy?
YES
NO
YES
NO
Am I in sound condition?
Skip it. Do it tomorrow.
Get up. Go.
If you're not sick, go for it.
YES
NO
Rest today.
Do it.


What Kind of Pet is Right for You?
Do you want a pet to love and care for?
YES
NO
Are you likely to forget you have a pet?
NO
YES
For weeks at a time
For days at a time
Do you want a creature that returns your affection?
NO
Do you want to watch your pet do things?
NO
YES
YES
Do you want to train your pet to do things?
YES
How do you want your pet to think of you?
NO
SLAVE
MASTER
Do you own a zoo or large open field?
NO
YES
GIRAFFE
CAT
DOG
FISH
ROCK
eHow

Anexo I: Cálculo da entropia para mais de duas classes

Cálculo da entropia para mais de duas classes

- Veja a tabela ao lado com os exemplos de treinamento.
- Problema com três classes: 0, 1, e 2. Portanto, o cálculo da entropia terá três termos.
- A ***entropia*** do objetivo, i.e., y, para o conjunto de treinamento é

$$H(y) = -\left[\frac{2}{4}\log_2\left(\frac{2}{4}\right) + \left(\frac{1}{4}\right)\log_2\left(\frac{1}{4}\right) + \left(\frac{1}{4}\right)\log_2\left(\frac{1}{4}\right)\right] = 1.5$$

Atributos		Rótulos
x1	**x2**	**Classe (y)**
0	0	0
2	1	1
1	1	2
3	0	0

- Separando os atributos em tabelas separadas, temos

		Classes (y)			
		0	1	2	
x1	0	1	0	0	1
	1	0	0	1	1
	2	1	1	0	2
					4

		Classes (y)			
		0	1	2	
x2	0	2	0	0	2
	1	0	1	1	2
					4

- O ***ganho de informação*** de cada atributo é calculado como:

$$Gain(\boldsymbol{x1}) = H(y) - \left\{\frac{1}{4}H(x1=0) + \frac{1}{4}H(x1=1) + \frac{2}{4}H(x1=2)\right\}$$

$$Gain(\boldsymbol{x2}) = H(y) - \left\{\frac{2}{4}H(x2=0) + \frac{2}{4}H(x2=1)\right\}$$

Cálculo da entropia para mais de duas classes

Obs.:

- $H(0) = 0$
- $H(1) = 0$
- $0 * \log_2(0) = 0$

Como exemplo do cálculo da entropia, vejamos como $H(x1 = 0)$ deve ser calculado.

$$H(x1 = 0) = -\sum_{i=0}^{2} p(y = i|x1 = 0)\log_2\big(p(y = i|x1 = 0)\big)$$

$$= -\big[p(y = 0|x1 = 0)\log_2\big(p(y = 0|x1 = 0)\big) + p(y = 1|x1 = 0)\log_2\big(p(y = 1|x1 = 0)\big) +$$
$$p(y = 2|x1 = 0)\log_2(p(y = 2|x1 = 0))\big]$$

Assim, os ganhos de informação para $x1$ e $x2$ são calculados como

$$Gain(x1) = H(y) - \left\{\frac{1}{4}H(x1 = 0) + \frac{1}{4}H(x1 = 1) + \frac{2}{4}H(x1 = 2)\right\}$$

$$= H(y) - \left\{\frac{1}{4}\left[\frac{1}{1}\log_2\left(\frac{1}{1}\right)\right] + \frac{1}{4}\left[\frac{1}{1}\log_2\left(\frac{1}{1}\right)\right] + \frac{2}{4}\left[\frac{1}{2}\log_2\left(\frac{1}{2}\right) + \frac{1}{2}\log_2\left(\frac{1}{2}\right)\right]\right\}$$

$$Gain(x2) = H(y) - \left\{\frac{2}{4}H(x2 = 0) + \frac{2}{4}H(x2 = 1)\right\}$$

$$= H(y) - \left\{\frac{2}{4}\left[\frac{2}{2}\log_2\left(\frac{2}{2}\right)\right] + \frac{2}{4}\left[\frac{1}{2}\log_2\left(\frac{1}{2}\right) + \frac{1}{2}\log_2\left(\frac{1}{2}\right)\right]\right\}$$

		Classes (y)			
		0	1	2	
x1	0	1	0	0	1
	1	0	0	1	1
	2	1	1	0	2
					4

		Classes (y)			
		0	1	2	
x2	0	2	0	0	2
	1	0	1	1	2
					4

Anexo II: Qual a entropia de 0?

Qual a entropia de 0?

- À primeira vista, pode parecer que $-x\log_2(x)$ é um valor indeterminado, pois resulta em $0 \times -\infty$. Porém, se fizermos uma pequena modificação na equação:

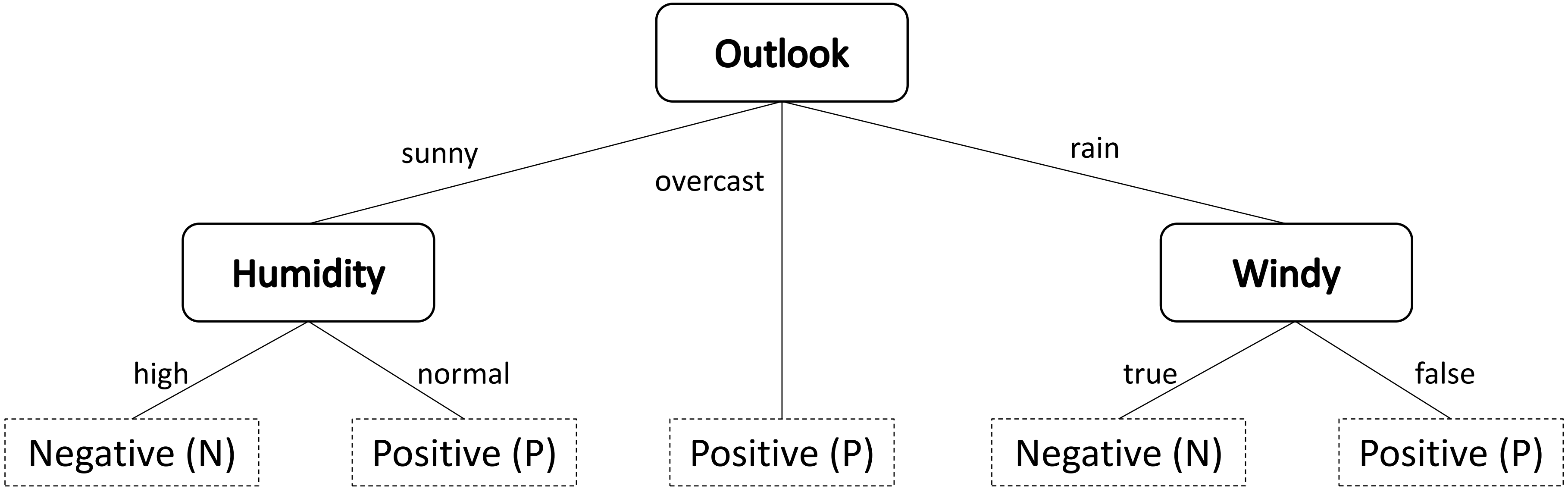
$$H(x) = -x\log_2(x) = -\frac{\log_2(x)}{\frac{1}{x}}.$$

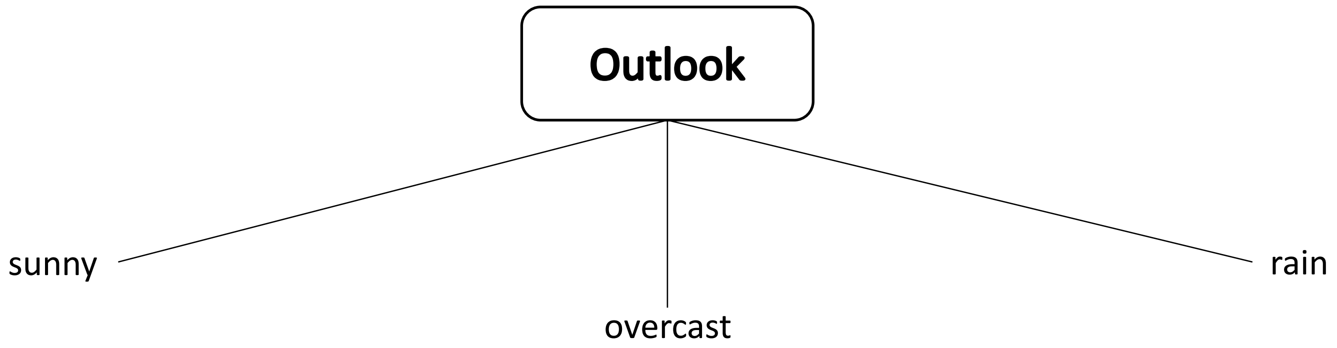
e, na sequência, aplicarmos a regra de L'Hôpital, conseguimos encontrar o valor quando x se aproxima de zero do lado positivo (0_+):

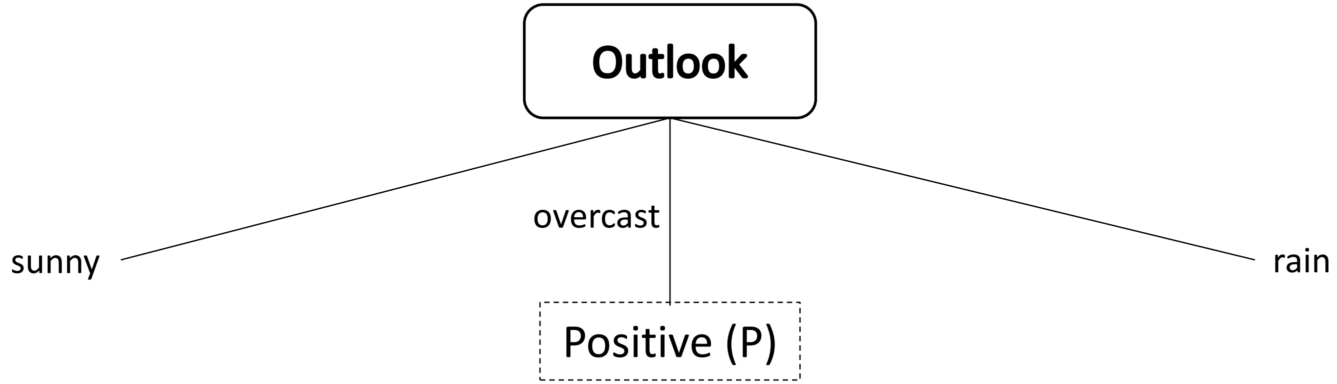
$$\lim_{x\to 0_+} H(x) = \lim_{x\to 0_+} -\frac{\frac{1}{x\log_2(2)}}{-\frac{1}{x^2}} = \lim_{x\to 0_+} \frac{x}{\log_2(2)} = 0.$$

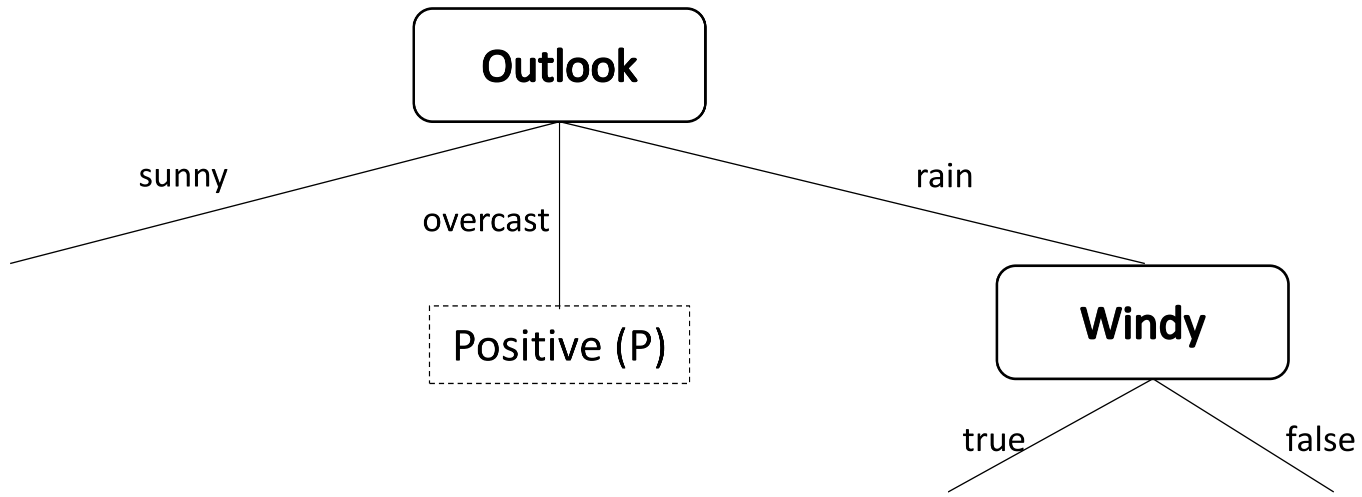
Assim, $H(x) = 0$.

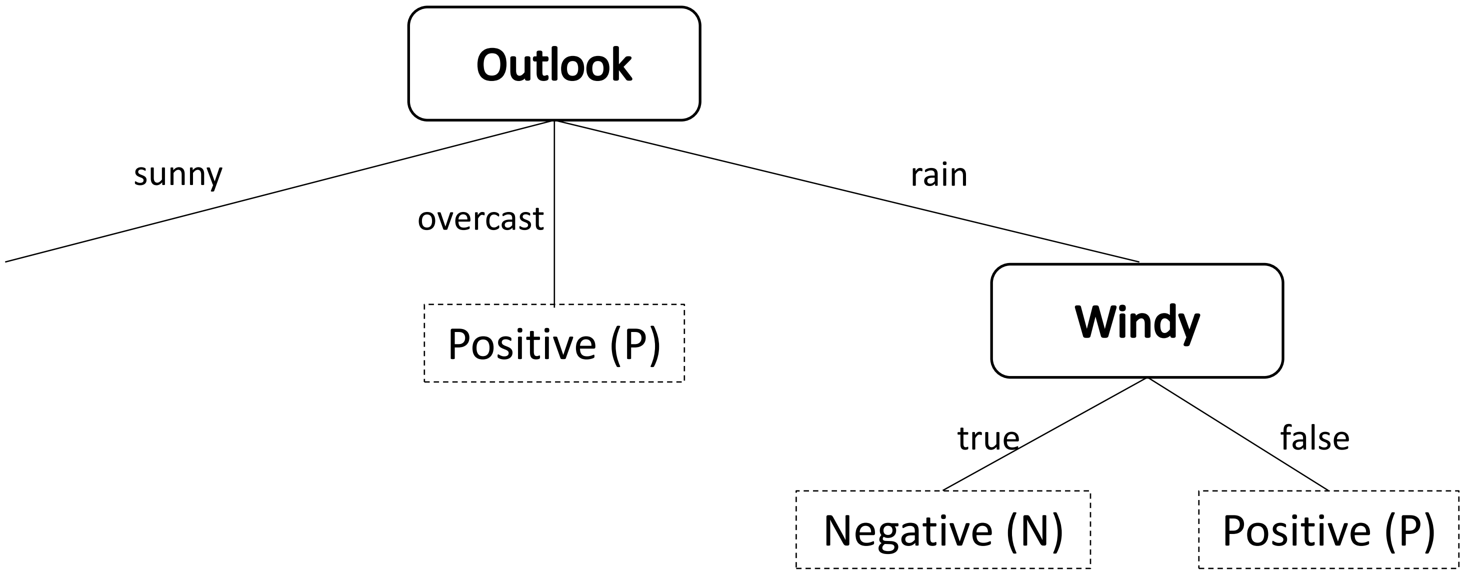
Figuras

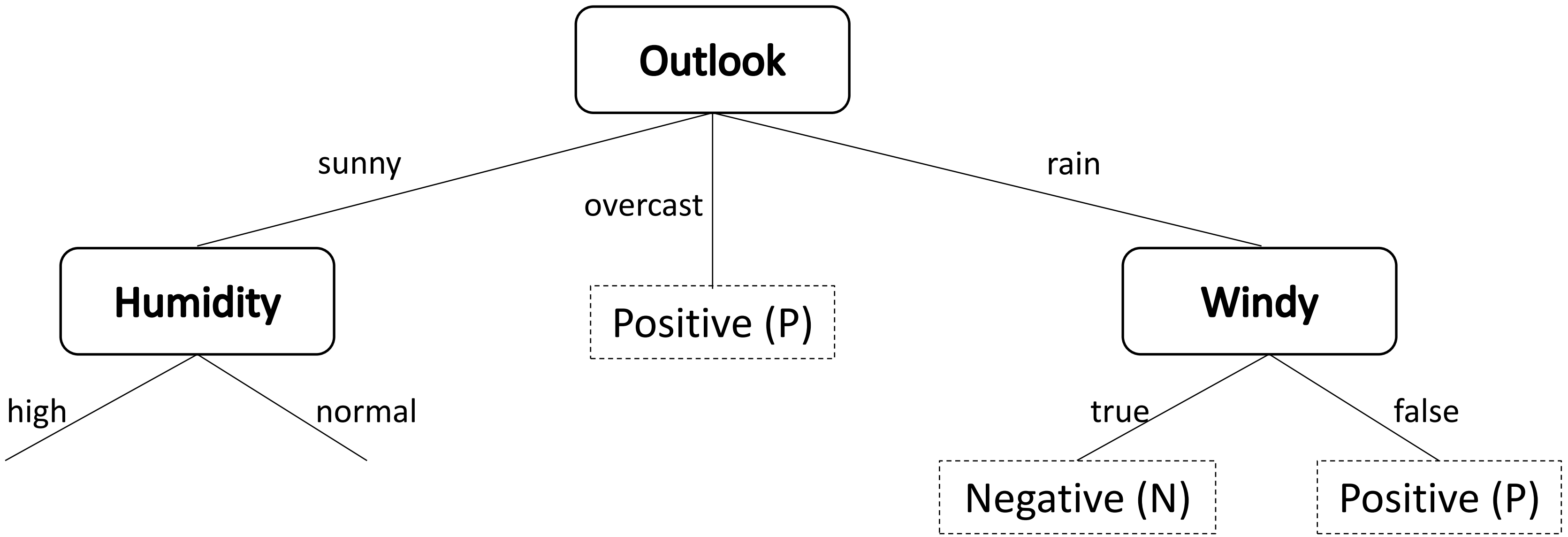

Outlook
sunny
overcast
rain
Humidity
Windy
high
normal
true
false
Negative (N)
Positive (P)
Positive (P)
Negative (N)
Positive (P)

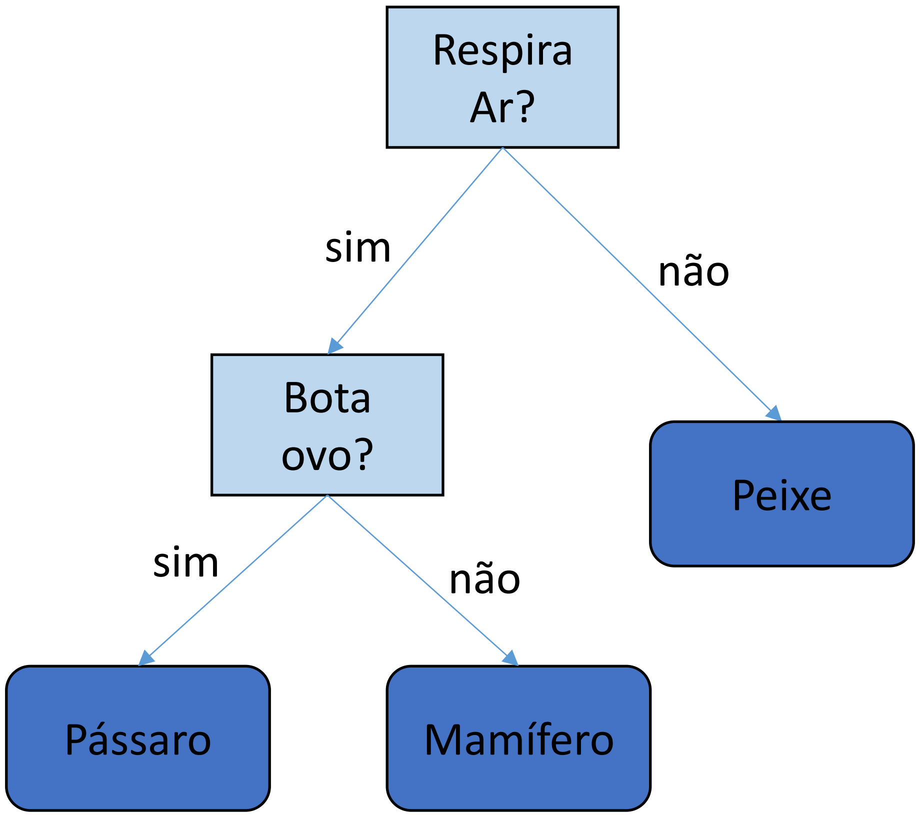

Outlook
sunny
overcast
rain


Outlook
overcast
sunny
rain
Positive (P)


Outlook
sunny
overcast
rain
Positive (P)
Windy
true
false


Outlook
sunny
overcast
rain
Positive (P)
Windy
true
false
Negative (N)
Positive (P)


Outlook
sunny
overcast
rain
Humidity
Positive (P)
Windy
high
normal
true
false
Negative (N)
Positive (P)


Respira Ar?
sim
não
Bota ovo?
Peixe
sim
não
Pássaro
Mamífero